

## **Calcul des propriétés électroniques ab-initio de VC**

***R.Benecheikh, O. Boukraet K.Belakroum***

Université KasdiMerbah-Ouargla, Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière, laboratoire de développement des énergies nouvelles et renouvelables dans les zones arides et sahariennes  
radia.benechik@yahoo.fr

### **Résumé**

La structure électronique des VC est fondamentalement intéressante et technologiquement importante. Avec le code de simulation WIEN2k, nous avons effectué des calculs de propriétés électroniques en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans l'approximation de gradient généralisé (GGA). Les densités d'états et les structures des bands d'énergie des VC ainsi que les résultats obtenus sont en accord avec celles trouvées dans la littérature ainsi que les résultats expérimentaux disponibles.

**Mots-clés:** Théorie de la fonctionnelle de densité, WIEN2K, DFT, GGA