

# MODELE DE PRESENTATION DU PROJET

## SITUATION ACTUELLE DU PROJET:

Intitulé du PNR

Code du Projet (Réservé à l'administration)

SCIENCES FONDAMENTALES

Nouveau projet :

Projet reformulé:  (Joindre une copie de la notification de l'avis de reformulation)

### 1.1. Domiciliation du projet

Laboratoire de Physique de Guelma, Université 8 Mai 1945 Guelma

### 1.2. Identification du projet

#### 1.2.1- Nature de la recherche

Fondamentale  Appliquée  Développement  Formation

Titre du projet :	<b>Propriétés des matériaux à base des métaux alcalins et métaux de transition</b>
Acronyme du projet :	PMBMAMT
Intitulé du thème :	Physique du solide
Intitulé de l'axe :	Physique des matériaux et de la matière condensée
Intitulé du domaine :	Physique
Mots-clés (12 max)	métaux alcalins ; métaux de transition ; composés de Nowotny-Joza ; antiflourite, alliage de Heusler ; propriétés électroniques ; propriétés optiques, propriétés dynamiques ; propriétés thermodynamiques ; haute pression, transition de phase, propriétés magnétiques ; ab initio.
Durée estimée du projet	24 mois

#### 1.2.2 Résumé du projet (250 mots)

Le développement technologique n'aura pas eu lieu sans excellente connaissance des différents matériaux et leurs propriétés physiques. Les matériaux formés des métaux (métaux alcalins et ceux de transition) et des éléments des groupes IV, V et VI constituent des familles de matériaux caractérisées par des propriétés spécifiques qui leurs rendent très utiles pour des applications technologiques. Par exemple, les systèmes Cs-K-Sb et Na-K-Sb sont utilisés comme des photodétecteurs. Les systèmes à base du lithium ont trouvé leur application dans les batteries lithium ion rechargeables. Une recherche très active, vue le développement très rapide de l'électronique portable, est donc menée aujourd'hui pour améliorer des composantes de ces batteries : matériaux d'électrodes positive et négative. Dans ces familles on trouve aussi les composés tétraédriques remplis, qui sont des matériaux dont les sites interstitiels proches des anions et des cations sont partiellement ou entièrement remplis. Cette dernière classe de structure regroupe :

- Les composés de Nowotny-Joza  $A^I B^{II} C^V$  ( $A^I = \text{Li, Cu, Ag}$  ;  $B^{II} = \text{Be, Mg, Zn, Cd}$  ; et  $C^V = \text{N, P, As, Sb et Bi}$ ).
- Composés antiflourite

- Les alliages de Heusler et demi Heusler avec les structures  $L2_1$  ( $X_2YZ$ ) et  $C1_b$  ( $XYZ$ ).

Dans ce projet nous comptons étudier les différentes propriétés de ces matériaux en utilisant des simulations ab initio qui avec la montée en puissance des ressources informatiques a permis de franchir un nouveau cap : la prédiction de nouveaux matériaux qui n'ont pas encore été observés dans la nature et l'étude de leurs propriétés physique.

### 1.3. Problématique du projet

**Sommaire** (250 mots)

Les simulations numériques ont acquis une place de choix en physique et notamment en sciences des matériaux. Elles peuvent seconder ou même se substituer aux expériences. L'approche ab initio ou du premier principe, qui ne requiert pas à priori la connaissance expérimentale du système considéré, permet d'étudier des matériaux placés dans des conditions de pression et de température difficilement accessibles à l'expérience et même prévoir de nouveaux matériaux. D'autre part, la combinaison des calculs ab initio et des expériences ouvre des nouvelles perspectives en constituant une nouvelle voie de recherche. Ainsi les calculs peuvent aider à l'interprétation des données dont la qualité est altérée par les conditions expérimentales ou lorsque les techniques sont limitées à cause de l'environnement en conditions extrêmes.

Le projet proposé est développé autour des problématiques qui constituent une poursuite des travaux récents qui ont été menés par les membres de l'équipe de simulation et modélisation du laboratoire de physique à Guelma. Ces problématiques se résument essentiellement dans la détermination des différentes propriétés (mécaniques, électroniques, optiques et vibrationnelles) des matériaux à base des métaux alcalins et métaux de transitions, ainsi que l'investigation des effets de la température et de la pression sur les différentes propriétés afin de prévoir la stabilité des matériaux considérés et leurs transitions de phase possibles.

### 1.4. Objectifs du projet

**Lister les objectifs** scientifiques, techniques, technologiques, socio-économiques et/ou socioculturels. (250 mots)

Le but de ce projet de recherche est :

- Etude théorique des propriétés électroniques, optiques, vibrationnelles et thermodynamiques des familles de matériaux à bases des métaux alcalins et métaux de transitions.
- Etude de l'effet de la température et de la pression sur les propriétés citées ci-dessus.
- Elaboration d'un programme de calcul afin de calculer les propriétés thermiques ; équation d'état en fonction de la température (volume en fonction de la température, le module de compression en fonction de la température et la dilatation thermique) des matériaux en se basant sur les résultats obtenus par des codes utilisant des méthodes de premier principe (abinit, pwscf, ...).

## 1.5. Description du projet

### 1.5-1- Etat des connaissances sur le sujet (500 mots)

Ces classes de matériaux ont été étudiées dans le passé. Pour les composés à base du césium par exemple, la majorité des travaux reportée était sur l'évaluation du gap d'énergie et le coefficient d'absorption à partir desquelles les paramètres clés pour leur application peuvent être extraits. Cependant, les données sur ces matériaux sont incomplètes. De plus, les travaux reportés portent sur le cas de la pression normale, mais les modifications entraînées par la pression, que nous avons initié pour les propriétés optiques des matériaux à base du Césium, peuvent avoir des conséquences sur l'application technologique de ces derniers.

### 1.5-2- Méthodologie détaillée (300 mots)

Des méthodes ab initio, à savoir la méthode des ondes planes augmentées (FP-LAPW) et celle des pseudo potentiels avec des ondes planes (PP- PW) basées sur de la théorie de la fonctionnelle de la densité pour l'évaluation du potentiel d'échange et de corrélation sont utilisées dans cette étude théorique des propriétés des matériaux considérés.

Comme dans tout calcul ab initio, on commence par l'optimisation des différents paramètres de convergence. Puis, on détermine les paramètres structuraux de l'état fondamental qui vont être utilisés pour obtenir les autres propriétés ; propriétés mécaniques, électroniques et optiques. Pour ces dernières, les spectres optiques sont calculés et l'assignement des structures et des pics à la structure des bandes est faite par la décomposition de chaque spectre en contribution de paire de bandes (valence-conduction) et en faisant appel aux structures des bandes de transition. Pour les propriétés vibrationnelles, la théorie de perturbation de la fonctionnelle de la densité est utilisée, les courbes de dispersion des phonons et les densités d'états des phonons servent à évaluer les fonctions thermodynamiques. La stabilité des phases est examinée par l'évaluation des constantes élastiques, les fréquences des modes de vibration (phonons) et les fonctions thermodynamiques et les transitions de phases possibles peuvent être déterminées en considérant l'effet de la pression sur ces propriétés.

### 1.5-3- Principales références bibliographiques

1. J. Xie, X. Zhao, G. Cao, Y. Zhong, M. Zhao  
Ex-situ XRD studies of  $\text{CoSb}_3$  compound as the anode material for lithium ion batteries, *Journal of Electroanalytical Chemistry* 542, 1-6, (2003)
2. G. T. Zhou, O. Palchik, V. G. Pol, E. Sominski, Y. Koltyoin, A. Gedanken  
Microwave-assisted solid-state synthesis and characterization of intermetallic compounds of  $\text{Li}_3\text{Bi}$  and  $\text{Li}_3\text{Sb}$ , *J. Mater. Chem.* 13, 2607-2611(2003).
3. L. Kalarasse, B. Bennecer, F. Kalarasse and S. Djeroud  
Pressure effect on the electronic and optical properties of the alkali antimonide semiconductors  $\text{Cs}_3\text{Sb}$ ,  $\text{KCs}_2\text{Sb}$ ,  $\text{CsK}_2\text{Sb}$  and  $\text{K}_3\text{Sb}$ : Abinitio study

Journal of Physics and Chemistry of Solids (in press)

4. L. Kalarasse, B. Bennecer , F. Kalarasse

Optical properties of the alkali antimonide semiconductors Cs<sub>3</sub>Sb, Cs<sub>2</sub>KSb, CsK<sub>2</sub>Sb and K<sub>3</sub>Sb, Journal of Physics and Chemistry of Solids Volume 71, Issue 3, Pages 314-322 (2010)

5. F. Kalarasse, L. Kalarasse, B. Bennecer and A. Mellouki

Elastic and electronic properties of Li<sub>2</sub>ZnGe, Computational Materials Science 47 869–874 (2010)

6. A. Hamidani, B. Bennecer\*, B. Boutarfa

Structural and elastic properties of the half-Heusler compounds IrMnZ (Z = Al, Sn and Sb), Materials Chemistry and Physics 114 (2009) 732–735.

7. Mellouki, B. Bennecer and F. Kalarasse

Calculation of the vibrational properties of LiMgAs, J. Phy: Condens. Matter 21 305402 (2009)

8. F. Kalarasse and B. Bennecer,

Structural and elastic properties of the filled tetrahedral semiconductors LiZnX (X=N,P, and As), Journal of Physics and Chemistry 67, 846-850,(2006)

9. F. Kalarasse, B. Bennecer and A. Mellouki

Optical properties of the filled tetrahedral semiconductors LiMgX (X = N, P and As) J. Phys.: Condens. Matter 18, 7237–7247,(2006)




## 1.6. Impacts attendus

### Impacts directs et indirects (Scientifiques, socio-économiques, socioculturels)

- Développement d'un code de calcul des propriétés thermodynamiques.
- Investigation des différentes propriétés physiques des matériaux considérés.
- Formation de chercheurs dans le domaine de la physique de la matière condensée.

## 1.7. Planning des taches / année

Taches	semestre 1	semestre 2	semestre 3	semestre 4
1) Développement d'un code pour le calcul des propriétés thermodynamiques basé sur l'approximation quasi-harmonique Test du code développé sur des systèmes dont les données expérimentales sont disponibles, diamant, silicium, ... etc	←————→			
2) Prédiction des propriétés thermodynamiques du composé LiMgSb et comparaison avec celles de AlSb			←————→	
3) Prédiction des propriétés thermodynamiques des composé NaMgAs et NaMgSb				←————→
4) Étude des propriétés électroniques du composé LiBeP	←————→			
5) Étude des propriétés optiques du composé LiBeP		←————→		
6) Étude des propriétés vibrationnelles et thermodynamiques du composé LiBeP			←————→	
7) Études des propriétés électroniques, magnétique et optiques des composés de type $ABO_4$ (où $A=Ca,Sr,Ba$ et $B=Cr,Mo,W$ )	←————→			
8) Étude de la stabilité et des transitions de phases des composés de type $ABO_4$ (où $A=Ca,Sr,Ba$ et $B=Cr,Mo,W$ )			←————→	
9) Étude des propriétés électroniques et optiques des composés de type $A_3B$ (où $A=Li,Na,K$ , et $B=Sb,Bi$ )	←————→			
10) Étude des propriétés élastiques et thermodynamiques des composés de type $A_3B$ (où $A=Li,Na,K$ , et $B=Sb,Bi$ )		←————→		

<b>11)</b> Étude de la de phases des composés de type $A_3B$ stabilité et de transitions où $A=Li,Na,K$ , et $B=Sb,Bi$ )				
<b>12)</b> Propriétés vibrabionelles et thermodynamiques des composés de type $A_2B$ (où $A=Li,Na,K$ , et $B=O,S,Se,Te$ )				
<b>13)</b> Étude de la stabilité et de transitions de phases des composés de type $A_2B$ (où $A=Li,Na,K$ , et $B=O,S,Se,Te$ )				

## MODELE DE PRESENTATION DE L'EQUIPE DE RECHERCHE

### 1. Identification du porteur (chef) de projet

Nom & Prénom	BENNECER Badis		
Grade	Professeur		
Spécialité	Physique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input checked="" type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre(4) <input type="checkbox"/>		
Email	<u>B bennacer@hotmail.com, bennecer.badis@univ-guelma.dz</u>		
Adresse professionnelle	Laboratoire de Physique de Guelma Université 8 Mai 1945 Guelma BP 401 24000 Guelma Algérie		
Contacts	Tel : 037 20 81 16	Fax : 037 20 72 68	GSM : 07 72 61 64 16

Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)	Année	Etablissement
1 (Bacc.)	Sciences	1979 Lycée d'Oued Zenati, Guelma
2 (L,M,Ing)	D.E.S. en Physique théorique	1984 Université de Constantine
3 (doct.)	M.Phil	1987 University of East Anglia, Norwich, UK
	Ph.D	1991 University of East Anglia, Norwich, UK

#### Participation à des programmes de recherche (*nationaux, Internationaux, multisectoriels*)

Intitulé du Programme	Année	Organisme

#### Lister vos trois derniers travaux les plus importants (recherche/recherche développement)

1	<p><b>L. Kalarasse, B. Bennecer, F. Kalarasse, S. Djeroud</b></p> <p>Pressure effect on the electronic and optical properties of the alkali antimonide semiconductors Cs3Sb, KCs2Sb, CsK2Sb and K3Sb: ab initio study</p> <p>Journal of Physics and Chemistry of Solids (in press)</p>
2	<p><b>A. Hamidani, B. Bennecer and K. Zanat</b></p> <p>Structural and electronic properties of the pseudo-binary compounds PdX2 (X = P, S and Se)</p> <p>Journal of Physics and Chemistry of Solids, 71, (2010), 42-46</p>
3	<p><b>A. Mellouki, B. Bennecer and F. Kalarasse</b></p> <p>Calculation of the vibrational properties of LiMgAs</p> <p>J. Phy: Condens. Matter 21 (2009) 305402.</p>

Visa du Chef d'établissement  
de rattachement :



رئيس الجامعة  
الأستاذ الدكتور محمد حمامة

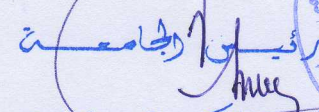

Date : 14/10/2010

Signature :

### 3. Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	KALARASSE Fateh		
Grade	MCB		
Spécialité	Physique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input checked="" type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input type="checkbox"/>		
Email	Fateh.kalarasse@gmail.com		
Adresse professionnelle	Laboratoire de Physique de Guelma Université 8 Mai 1945 Guelma BP 401 24000 Guelma Algérie		
Contacts tel :	Tel : 037-21-58-51	Fax : 037-20-72-68	GSM :06 99 31 64 85
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)	Année	Etablissement	
1	DES Physique du solide	2000	Université 8 Mai 1945 Guelma
2	Magister	2003	Université 8 Mai 1945 Guelma
3	Doctorat	2008	Université 8 Mai 1945 Guelma
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	<b>F. Kalarasse, L. Kalarasse, B. Bennecer and A. Mellouki</b> Elastic and electronic properties of Li <sub>2</sub> ZnGe, Computational Materials Science 47 (2010) 869–874		
2	<b>L. Kalarasse, B. Bennecer , F. Kalarasse</b> Pressure effect on the electronic and optical properties of the alkali antimonide semiconductors Cs <sub>3</sub> Sb, KCs <sub>2</sub> Sb, CsK <sub>2</sub> Sb and K <sub>3</sub> Sb: Ab initio study Journal of Physics and Chemistry of Solids in press		
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
CNEPRU	<b>D01520070006</b> Etude des propriétés électroniques, optiques, vibrationnelles et magnétiques des composés tétraédriques remplis		
CNEPRU	<b>D01520100016</b> Etude des différentes propriétés des matériaux à base des métaux alcalins et de transition et des éléments des groupes IV, V et VI.		
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Développement d'un code pour le calcul des propriétés thermodynamiques basé sur l'approximation quasi-harmonique. Test du code développé sur des systèmes dont les données expérimentales sont disponibles, diamant, silicium, ... etc.		
2	Prédiction des propriétés thermodynamiques du composé LiMgSb et comparaison avec celles de AlSb		
3	Prédiction des propriétés thermodynamiques des composé NaMgAs et NaMgSb		

Visa du Chef d'établissement  
de rattachement :

  
 الأستاذ الدكتور محمد خرامشة  


Date : 14/10/2010

Signature :





### 3. Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	MELLOUKI Abdallah		
Grade	MAB		
Spécialité	Physique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input checked="" type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input type="checkbox"/>		
Email			
Adresse professionnelle	Département de Physique Université Larbi Ben Mhidi BP 358 Oum El Bouaghi 04000 Algérie		
Contacts tel :	Tel : 032 42 42 12	Fax : 032 42 10 36	GSM :07 97 19 64 87
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)	Année	Etablissement	
1	DES Physique du solide	2002	Université 8 Mai 1945 Guelma
2	Magister	2007	Université 8 Mai 1945 Guelma
3	Doctorat	En cours	Université 8 Mai 1945 Guelma
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	<b>A. Mellouki, B. Bennecer and F. Kalarasse</b> Calculation of the vibrational properties of LiMgAs, J. Phy: Condens. Matter 21 (2009) 305402. B.		
2	<b>A. Mellouki, L. Kalarasse, B. Bennecer and F. Kalarasse</b> Vibrational properties of the filled tetrahedral compounds LiCdP and LiCdAs <i>Computational Materials Science, Volume 44, Issue 3, January 2009, Pages 876-880</i>		
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
CNEPRU	<b>D01520070006</b> Etude des propriétés électroniques, optiques, vibrationnelles et magnétiques des composés tétraédriques remplis		
CNEPRU	<b>D01520100016</b> Etude des différentes propriétés des matériaux à base des métaux alcalins et de transition et des éléments des groupes IV, V et VI.		
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Étude des propriétés électroniques du composé LiBeP		
2	Étude des propriétés optiques composé LiBeP		
3	Étude des propriétés vibrationnelles et thermodynamiques du composé LiBeP		

Visa du Chef d'établissement  
de rattachement :

Date : 14/10/2010

Signature :



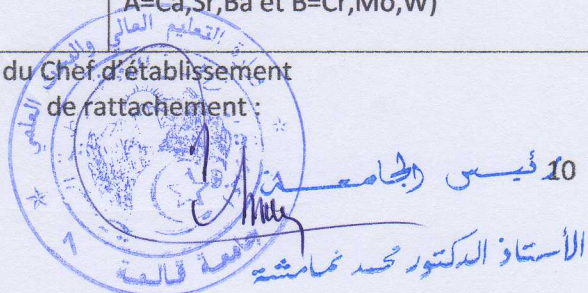
### 3. Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	HAMIDANI Ali		
Grade			
Spécialité	Physique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input checked="" type="checkbox"/>		
Email	<a href="mailto:hamidani.ali@gmail.com">hamidani.ali@gmail.com</a>		
Adresse professionnelle	Laboratoire de Physique de Guelma Université 8 Mai 1945 Guelma BP 401 24000 Guelma Algérie		
Contacts tel :	Tel : 037-21-58-51	Fax : 037-20-72-68	GSM :07 93 12 06 04
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)	Année	Etablissement	
1	DES Physique du solide	2001	Université 8 Mai 1945 Guelma
2	Magister	2006	Université 8 Mai 1945 Guelma
3	Doctorat	En cours	Université 8 Mai 1945 Guelma
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	<b>A. Hamidani and B. Bennecer</b> Electronic and optical properties of the orthorhombic compounds PdPX (X=S and Se) <i>Computational Materials Science, Volume 48, Issue 1, March 2010, Pages 115-123</i>		
2	<b>A. Hamidani, B. Bennecer and K. Zanat</b> Structural and electronic properties of the pseudo-binary compounds PdX <sub>2</sub> (X = P, S and Se) <i>Journal of Physics and Chemistry of Solids, 71, (2010), 42-46</i>		
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
CNEPRU	<b>D01520070006</b> Etude des propriétés électroniques, optiques, vibrationnelles et magnétiques des composés tétraédriques remplis		
CNEPRU	<b>D01520100016</b> Etude des différentes propriétés des matériaux à base des métaux alcalins et de transition et des éléments des groupes IV, V et VI.		
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Études des propriétés électroniques, magnétique et optiques des composés de type ABO <sub>4</sub> (où A=Ca,Sr,Ba et B=Cr,Mo,W)		
2	Étude de la stabilité et de transitions de phases des composés de type ABO <sub>4</sub> (où A=Ca,Sr,Ba et B=Cr,Mo,W)		

Visa du Chef d'établissement  
de rattachement :

Date : 14/10/2010

Signature :



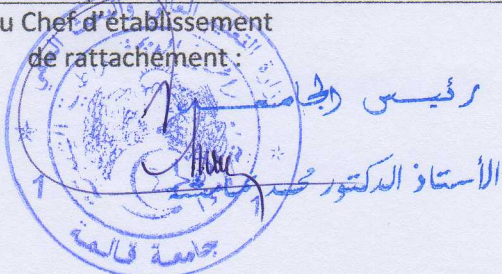
### 3. Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	KALARASSE Lamia		
Grade			
Spécialité	Physique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input checked="" type="checkbox"/>		
Email	<u>kalarasse.lam@gmail.com</u>		
Adresse professionnelle	Laboratoire de Physique de Guelma Université 8 Mai 1945 Guelma BP 401 24000 Guelma Algérie		
Contacts tel :	Tel : 037-21-58-51	Fax : 037-20-72-68	GSM :
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)	Année	Etablissement	
1	DES Physique du solide	2001	Université Badji Mokhtar Annaba
2	Magister	2006	Université 8 Mai 1945 Guelma
3	Doctorat	En cours	Université 8 Mai 1945 Guelma
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	L. Kalarasse, B. Bennecer, F. Kalarasse Pressure effect on the electronic and optical properties of the alkali antimonide semiconductors $Cs_3Sb$ , $KCs_2Sb$ , $CsK_2Sb$ and $K_3Sb$ : Ab initio study Journal of Physics and Chemistry of Solids in press		
2	L. Kalarasse, B. Bennecer, F. Kalarasse Optical properties of the alkali antimonide semiconductors $Cs_3Sb$ , $Cs_2KSb$ , $CsK_2Sb$ and $K_3Sb$ Journal of Physics and Chemistry of Solids Volume 71, Issue 3, March 2010, Pages 314-322		
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
CNERU	D01520070006 Etude des propriétés électroniques, optiques, vibrationnelles et magnétiques des composés tétraédriques remplis		
CNEPRU	D01520100016 Etude des différentes propriétés des matériaux à base des métaux alcalins et de transition et des éléments des groupes IV, V et VI.		
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Étude des propriétés électroniques et optiques des composés de type $A_3B$ (où $A=Li, Na, K$ , et $B=Sb, Bi$ )		
2	Étude des propriétés élastiques et thermodynamiques des composés de type $A_3B$ (où $A=Li, Na, K$ , et $B=Sb, Bi$ )		
3	Étude de la stabilité et des transitions de phases des composés de type $A_3B$ (où $A=Li, Na, K$ , et $B=Sb, Bi$ )		

Visa du Chef d'établissement  
de rattachement :

Date : 14/10/2010

Signature :



### 3. Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	Souadkia Mourad		
Grade			
Spécialité	Physique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input checked="" type="checkbox"/>		
Email	<u>somourad@gmail.com</u>		
Adresse professionnelle	Laboratoire de Physique de Guelma Université 8 Mai 1945 Guelma BP 401 24000 Guelma Algérie		
Contacts tel :	Tel : 037-21-58-51	Fax : 037-20-72-68	GSM :07 77 36 53 05
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)	Année	Etablissement	
1	DES Physique du solide	2000	Université 8 Mai 1945 Guelma
2	Magister	2008	Université 8 Mai 1945 Guelma
3	Doctorat	En cours	Université 8 Mai 1945 Guelma
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	M. Souadkia , B. Bennecer , F. Kalarasse, A. Mellouki Ab initio calculation of vibrational and thermodynamic properties of SrX (S, Se, Te) in the B1 (NaCl) and B2 (CsCl) structures. <b>Submitted to Computational Materials Science.</b>		
2			
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Propriétés vibrabionelles et thermodynamiques des composés de type $A_2B$ (où $A=Li,Na,K$ , et $B=O,Se,Te$ )		
2	Étude de la stabilité et de transitions de phases des composés de type $A_2B$ (où $A=Li,Na,K$ , et $B=O,Se,Te$ )		
3			

Visa du Chef d'établissement

de rattachement :



رئيس الجامعة  
الأستاذ الدكتور محمد حمامة

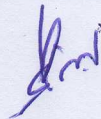
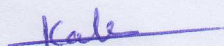

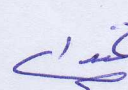

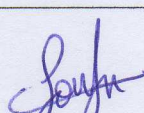
Date : 14/10/2010

Signature :

*[Handwritten signature]*

#### 4. Composante de l'équipe de recherche

(Tableau anonyme : six personnes au maximum dont 3 chercheurs confirmés. Inscrire le responsable du projet en début de liste, ne pas inscrire de nom, ni l'intitulé de l'établissement de rattachement)

Grade universitaire ou scientifique	Dernier diplôme obtenu	Tâche principale affectée dans le projet	Emargement
1-Professeur	Ph.D	Développement d'un code pour le calcul des propriétés thermodynamiques basé sur l'approximation quasi-harmonique et Coordination entre les membres de l'équipe	
2-MCB	Doctorat	Développement d'un code pour le calcul des propriétés thermodynamiques basé sur l'approximation quasi-harmonique	
3-MAB	Magister	Étude des propriétés vibrationnelles et thermodynamiques du composé LiBeP	
4- Doctorant	Magister	Études des propriétés électroniques, magnétique et optiques des composés de type $ABO_4$ (où A=Ca,Sr,Ba et B=Cr,Mo,W)	
5- Doctorant	Magister	Étude de la stabilité et des transitions de phases des composés de type $A_3B$ (où A=Li,Na,K, et B=Sb,Bi)	
6- Doctorant	Magister	Propriétés vibrationnelles et thermodynamiques des composés de type $A_2B$ (où A=Li,Na,K, et B=O,S,Se,Te)	

-Ne pas inscrire dans ce tableau les noms des membres de l'équipe, ni leurs établissements de rattachement.  
-Indiquer en tête de liste les informations relatives au porteur (chef) de projet.

## 5. Equipements scientifiques disponibles

5.1- Matériel existant pouvant être utilisé dans l'exécution du projet		
Nature	Localisation	Observations
P4 Dell	Laboratoire de Physique de Guelma	03
P4	Laboratoire de Physique de Guelma	06

5.2 – Matériel et Mobilier de Bureau à acquérir pour l'exécution du projet			
Nature	Montant en DA	Destination	Observations

Détailler la liste des matériels et mobiliers dont les montants sont mentionnés dans l'annexe financière.

### 5. Annexe financière : Budget et postes de dépenses prévisionnels (exprimés en DA)

<i>Intitulés des postes de dépenses par année</i>	<b>1<sup>ère</sup></b>	<b>2<sup>ème</sup></b>
Frais de séjour scientifique et de déplacement à l'étranger	<b>450.000</b>	<b>450.000</b>
Frais de séjour scientifique et de déplacement en Algérie	<b>100.000</b>	<b>100.000</b>
Frais d'organisation de rencontres scientifiques	/	<b>600.000</b>
Honoraires des enquêteurs	/	/
Honoraires des guides		
Frais de travaux et de prestations		
Matériels et instruments scientifiques		
Matériel informatique	<b>500.000</b>	
Matériels d'expérience (animaux, végétaux, etc..)		
Mobilier de bureau et de laboratoire		
Entretien et réparation		<b>50.000</b>
Produits chimiques		
Produits consommables		
Composants électroniques, mécaniques et audio- visuels		
Accessoires et consommables informatiques	<b>50.000</b>	<b>10.000</b>
Papeterie et fournitures de bureau	<b>50.000</b>	<b>20.000</b>
Périodiques		
Ouvrages et documentation scientifiques et techniques	<b>300.000</b>	<b>20.000</b>
Logiciels	<b>800.000</b>	
Impression et Edition		<b>50.000</b>
Affranchissements Postaux		
Communications téléphoniques, Fax, Internet		
Droits de douanes, Assurances		
Carburant		
<b>TOTAL DES CREDITS OUVERTS :</b>	<b>2.250.000</b>	<b>1.300.000</b>

**Remarque :** Les besoins financiers en devises doivent être exprimés en Dinars Algériens, après conversion au taux de change en cours.