

## **Introduction générale**

Il nous est désormais possible de calculer avec précision les propriétés électroniques et structurales des solides à partir du premier principe du calcul quantique. Le développement dans les simulations informatiques a favorisé d'intéressantes études dans le domaine de la matière condensée. Par exemple, il est maintenant possible d'expliquer et de prévoir les propriétés des solides dont les expérimentations étaient impossibles avant.

Au cours des dernières décennies, les semi-conducteurs II-VI de type AX (A = Be, Mg, Ca, Ba, X=O, S, Se, Te), généralement connus sous le nom de chalcogénures alcalinoterreux, ont fait l'objet de nombreux travaux théoriques et expérimentaux. Leur utilité technologique, mais aussi leurs remarquables et intéressantes propriétés physiques ont motivé ces investigations. Dans des conditions normales, les chalcogénures alcalinoterreux forment un important système ionique, cristallisé dans une structure NaCl avec 6 liaisons de paires atomiques. Les seules exceptions sont les chalcogénures de béryllium BeX (X = S, Se, Te) qui se cristallisent, dans des conditions ambiantes, sous la phase de zinc-blende. Ces composés sont technologiquement importants puisque leurs applications vont de la catalyse à la microélectronique en passant par les dispositifs luminescents. Les composés BeS, BeSe et BeTe sont potentiellement favorables pour les applications technologiques photovoltaïques [1]. Suite aux expériences [2], il a été prouvé que BeS se transformerait de la phase B3 à B8 sous une pression de 69 Gpa. Les BeS, BeSe et BeTe faisaient l'objet de nombreuses études théoriques. Les calculs rapportés par Muno Z et *al.* se fondent sur les principes de base de la méthode pseudo-potentielle [3]. Les pseudo-potentiels non locaux à norme conservée s'est faite sur le schéma de Kerker [4], tandis que ceux de Van Camp et Van Doren sont basés sur l'auto-consistance de la méthode des pseudo-potentiels non locaux. Pour les mêmes composés, Okoye [5] a appliqué la méthode du potentiel total à ondes planes (FP-LAPW) [6].

Ces matériaux sont importants pour les diodes laser bleu-vert et les diodes électroluminescentes. Les méthodes ab-initio permettent de décrire le comportement énergétique des matériaux à partir des premiers principes. Il suffit en effet de connaître la composition des matériaux pour pouvoir les simuler à partir de la résolution des équations de la mécanique quantique (elles utilisent seulement les constantes atomiques comme paramètre d'entrée pour la résolution de l'équation de Schrödinger).

Parmi les méthodes ab-initio, la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT : Density Functional Theory) est une méthode appropriée à la modélisation des solides, de par la simplification drastique qu'elle apporte aux équations de la mécanique quantique. Vu la complexité des solides, résultante de l'interaction d'un grand nombre de particules, il est indispensable de recourir à des approximations. Différentes approximations sont mises en œuvre en DFT dans son application numérique [7].

Dans un premier cadre, nous discuterons en premier lieu d'une manière qualitative des semi-conducteurs de type II-VI puis en second lieu, nous illustrons une présentation théorique dans lequel a été effectué ce travail. Les fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) sont exposés, et l'accent est porté sur la partie échange et corrélation de l'énergie, qui conditionne de façon cruciale la qualité des résultats obtenus.

Le second cadre résume nos résultats, leurs interprétations ainsi qu'une comparaison avec certains travaux théoriques et expérimentaux disponibles dans la littérature. Cette partie de ce mémoire est composée de deux chapitres (étude structurale et électronique).

Nous verrons en conclusion que ce travail ouvre des perspectives intéressantes, notamment dans l'étude de la transition de phase et aussi pour étudier des alliages plus complexes tel que les ternaires et les quaternaires.

*Références*

- [1] A. Waag, F. Fischer, K. Schull, T. Baron, H. J. Lugauer, U. Zehnder, W. Ossau, T. Gerhard, M. keim, G. Reuscher, G. Landwerh, Appl. Phys. Lett 70,280 (1997).
- [2] R. Pandey, S. Sivaraman, J. Phys. Chem. Solids 52 (1991) 211.
- [3] S. Asano, N. Yamashita, Y. Nakao, Phys. Status Solidi 89(1978)663.
- [4] Y. Nakanishi, T. Ito, Y. Hatanaka, G. Shimaoka, Appl. Surf. Sci. 66 (1992) 515.
- [5] A. Waag, F. Fischer, H.J. Lugauer, T. Litz, J. Laubender, U. Lunz, U. Zhender, W. Ossau, T. Gerhardt, M. Moller, G. Landwehr, J. Appl. Phys. 80 (1996) 792.
- [6] H. Luo, K. Ghandehari, R.G. Greene, A.L. Ruoff, Phys. Rev. B 52 (1995) 7058.
- [7] K. BOUBENDIRA, Etude des propriétés structurales, électroniques, optiques et thermodynamiques des alliages ternaires  $Al_{1-x}B_xP$ ,  $Al_{1-x}B_xAs$ ,  $Al_{1-x}B_xSb$ , Université Annaba.