

Chapitre III

Résultats et Discussions

Introduction :

Les chalcogénures de béryllium étudiés dans ce chapitre appartiennent à la famille des semi-conducteurs II-VI qui cristallisent dans la structure zinc blende. Ces derniers semi-conducteurs (BeS , $BeSe$, $BeTe$) se caractérisent par une bande interdite de nature indirecte, associée à la transition Γ -X.

Au cours de ce chapitre nous allons analyser les résultats obtenus en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, appliquée aux chalcogénures de béryllium BeS , $BeSe$, $BeTe$. Bien qu'une partie des calculs présentés ont été établis indépendamment par d'autres auteurs, une étude théorique approfondie de ces composés, demeure indispensable pour être sûr de la fiabilité de notre approche avant de l'étendre à l'étude des composés ternaires. Les calculs entrepris nous ont permis d'évaluer les différentes propriétés des chalcogénures de béryllium et de les comparer aux résultats expérimentaux disponibles.

La méthode de calcul utilisée dans notre travail est la méthode FP-LMTO (Full Potentiel Linear muffin-tin orbital). Le potentiel self-consistent utilisé dans cette méthode est basé sur l'approximation de la densité locale (LDA) pour le calcul de l'énergie d'échange et de corrélation utilisé dans la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Ces approximations sont standards et sont largement utilisées comme approche pour l'étude des propriétés électriques des matériaux. L'objectif le plus important de la physique c'est la description des systèmes à plusieurs particules. Les solutions analytiques de l'équation de Schrödinger sont possibles à quelques systèmes très simples, et numériquement des solutions exactes peuvent être trouvées pour un nombre restreint d'atomes et de molécules. Cependant, la plupart des cas, tels que la réaction des surfaces, les interactions électron-électron dans les solides exigent l'utilisation du modèle Hamiltonien ou des arrangements de calcul informatique simplifiés.

Le progrès récent dans le calcul de la structure électronique des atomes, molécules et des solides a montré que nous sommes en mesure de pouvoir prévoir les propriétés physiques et chimiques des systèmes à plusieurs particules avec fiabilité et sans calcul excessif. Parmi les arrangements qui fournissent des informations utiles sur des

systèmes continus, c'est le formalisme de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT), que nous allons le décrire dans cette section. Nous précisons, en particulier, le but de simplifier la résolution de l'équation caractéristique du système à plusieurs particules. Dans ce sens, le développement de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) couplée à l'approximation de la densité locale (LDA) a été mise en évidence pour résoudre les systèmes qui peuvent contenir plusieurs atomes par cellule unitaire. Il est important de rappeler que les codes utilisés dans ce mémoire sont basés sur une théorie ab-initio [1].

III.2. Détails de calcul:

Les calculs ont été effectués avec le logiciel MStudioMindLab 5.0, ce logiciel décrit les fonctions de base, dans lequel l'espace est divisé en deux régions qui ne se chevauchent pas : des sphères atomiques (MT) entourant les sites atomiques et la région interstitielle (IR), située entre les sphères, utilise une base plus complète que d'autre programme conçu pour le même objectif. Dans les régions IR, les fonctions de base sont représentées par des séries de Fourier. L'intérieur de la sphère MT, les fonctions de base sont développées dans des combinaisons de fonctions harmoniques sphériques conduisant à une meilleure précision des valeurs propres.

Ce moyen permet de calculer la structure électronique des solides cristallins, il est conçu pour réaliser la structure de bande électronique, densité d'états, les opérations du groupe cristal, l'énergie totale d'un cristal et calcul des forces. Le processus est basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT [2] Pour déterminer le potentiel d'échange-corrélation, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale paramétrées par Perdew-Wang [3-4]. Les fonctions de bases, les densités électroniques et les potentiels sont développés en harmoniques sphériques autour des sites atomiques, c'est-à-dire, dans les sphères muffin tin, et en ondes planes dans la région interstitielle.

Dans ce chapitre, nous allons analyser les résultats obtenus en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, appliquée aux BeS , $BeSe$ et $BeTe$. Bien qu'une partie des calculs présentés ont été établis indépendamment par d'autres auteurs, une étude théorique approfondie de ces composés, demeure indispensable pour être certain de la fiabilité de notre approche avant de l'étendre à l'étude des composés ternaires. Les

calculs entrepris nous ont permis d'évaluer les différentes propriétés des binaires et de les comparer aux résultats expérimentaux disponibles.

En premier lieu, on a déterminé l'énergie de Cut-off E_C pour assurer la convergence de l'énergie totale et les paramètres constitutifs de la méthode, afin d'obtenir les données structurale de binaire étudiées dans les quartes phases Zinc blende (B3), NaCl (B1), CsCl (B2) et würtzite (B4) et en ajustant l'Energie totale en fonction du volume, pour la détermination de l'état fondamental.

Ces paramètres sont calculés après avoir effectué le fitage en utilisant l'équation de Murnaghan[5] qui est donnée par l'expression suivante :

$$V = V_0 \left(1 + \frac{B'P}{B} \right)^{1/B'} \quad (\text{III-1})$$

Où P représente la pression, V le volume, B le module de compressibilité (Bulkmodulus) et B' la première dérivée par rapport au volume du module en question.

La constante du réseau de l'équilibre est donnée par le minimum de la courbe $E_{tot}(a)$, et le module de compressibilité B est déterminé par l'application de la formule suivante.

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III-2})$$

L'énergie totale est déterminée par l'équation suivante :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (\text{III-3})$$

V_0 : le volume d'équilibre à l'état fondamental.

III.2.1. Propriétés Structurales :

III.2.1.1. Sulfure de béryllium BeS :

Le composé BeS cristallise dans quatre phases différentes : la phase NaCl (B_1), la phase CsCl (B_2), la phase Zinc-blende (B_3) et la phase würtzite (B_4). Sa structure stable est Zinc-blende (B_3), sa cellule primitive est cubique a face centre de 2 atomes.

Nous avons traité les états Be ($1s^2 2s^2$), S ($1s^2 2s^2 2p^6$) comme étant des états de cœur, et les états Be ($2s^2$) S ($3s^2 3p^4$) comme étant des états de valence.

L'énergie structurale totale a été calculée d'une façon auto-cohérente avec 22 point k dans la zone réduite de Brillouin pour la phase zinc-blende, 16 points pour la phase NaCl (rocksalt), 20 points pour la phase CsCl et 28 points pour la phase würtzite. Les valeurs des rayons des sphères muffin-tin R_{MT} , le nombre des ondes planes (PW) et le nombre des points k spéciaux de la zone irréductible de Brillouin pour les différentes structures (B_1 , B_2 , B_3 , B_4) utilisées sont donnés dans le tableau (III.1).

		NaCl (B_1)	CsCl (B_2)	Zinc-blende (B_3)	Würtzite (B_4)
Ondeplane (PW)		2974	4168	5064	11978
R_{MT}	Be	1.9939	1.1389	1.8293	1.9075
	S	2.2484	2.4424	2.1474	2.2392
Cut-off E_c (Ryd)		95.964	134.2148	120.5137	150.0576
Nombre de point k		16	20	22	28

Tableau (III.1) : paramètres constitutifs de BeS utilisés dans nos calculs effectués par la méthode FP-LMTO ($1 \text{ u.a.} = 0.529177 \text{ \AA}$ et $1 \text{ Ry} = 13.605814 \text{ eV}$) dans les quatre structure.

L'optimisation structurale dans la phase *NaCl*(B_1), *CsCl* (B_2) et würtzite (B_4) est simple car on a que le paramètre du réseau (a). Elle s'effectue en calculant l'énergie totale en fonction de volume. La structure *NaCl*(B_1), est deux cubiques à faces centrées décalés par un demi de la diagonale. Les positions des atomes dans la cellule unité seront donc *Be* (0, 0, 0) et *S* ($1/2$, $1/2$, $1/2$). La structure *CsCl* (B_2) est une cubique centrée avec deux atomes dans la cellule unité : *Be* (0, 0,0) et *S* ($1/2$, $1/2$, $1/2$). La structure würtzite (B_4) est la cellule unité contient quatre atomes positionnés à (0, 0,0) et ($2/3, 1/3, 1/2$) pour les atomes du premier type (*Be*), et (0, 0, u) et ($2/3, 1/3, 1/2+u$) pour les atomes du deuxième type (*S*), avec u le paramètre interne qui est

l'emplacement de l'anion par rapport au cation le long de l'axe c . L'optimisation structurale s'effectue en calculant l'énergie totale en fonction des trois variables u , c/a , et V . Pour la phase Zinc-blinde noté par B_3 , est cubique à face centrées avec deux atomes par cellule unité positionnés à Be (0, 0,0) et S (1/4,1/4,1/4). L'optimisation structurale s'effectue en calculant l'énergie totale en fonction de volume. La détermination des propriétés est le premier pas important précédant l'obtention par calcul des propriétés physiques d'un matériau donné à partir de sa structure à l'échelle microscopique.

Le calcul des propriétés structurales a été effectué en utilisant la *LDA*, les variations de l'énergie totale en fonction de volume pour (würtzite, zinc-blinde, Rocksalt, $CsCl$) sont données respectivement dans les figures (III.1). Les résultats sont regroupés dans le tableau (III.2) pour la structure würtzite, zinc-blinde, Rocksalt, $CsCl$. Pour la structure würtzite, nous avons estimé le paramètre de réseau a_{eq} à 6.0936Å et le rapport c/a_{eq} à 1.21053 et pour le paramètre interne u_{eq} à 0.49. Nous avons obtenu un paramètre du réseau de 4.8154 Å pour le BeS dans la structure Zinc-blinde, 4.57 Å dans la structure RocksaltNaCl, et 4.54Å pour la structure $CsCl$. Le volume d'équilibre V_0 est pris égal à $\frac{a^3}{4}$ pour la structure Zinc-blinde et $NaCl$, $\frac{a^3}{2}$ pour la structure $CsCl$, et $[a^2 \cdot c \cdot (\frac{3}{4})^{1/2}]$ pour la structure würtzite. Plusieurs études expérimentales et théoriques ont été faites sur BeS dans les phases :rocksalt et zinc-blinde en utilisant différentes méthodes. Le tableau (III.2) résume les propriétés structurales du BeS calculées avec quelques d'autres résultats théoriques et expérimentales disponibles par différents auteurs. La figure (III.2) illustre la variation de l'énergie de cohésion en fonction du volume pour les quatre principales structures connues de BeS . Nous constatons premièrement que la phase zinc Blende est la plus stable à pression ambiante. Et la phase würtzite est métastable, puisque que sa courbe ne croise jamais celle de la phase zinc Blende. L'ordre des énergies des phases prédites par la méthode FP-LMTO est $E_{B3} < E_{B1} < E_{B4} < E_{B2}$ qui tend à consolider les résultats ab-initio déjà vus. Nous notons que la *LDA* sous-estime légèrement les constantes du réseau d'environ 1.02% pour a_{eq} . La valeur du module de compressibilité obtenue par *LDA* est sous-estimée

d'environ 9.5% par rapport à la valeur expérimentale. Par ailleurs nous remarquons la bonne concordance de nos résultats avec les autres travaux théoriques.

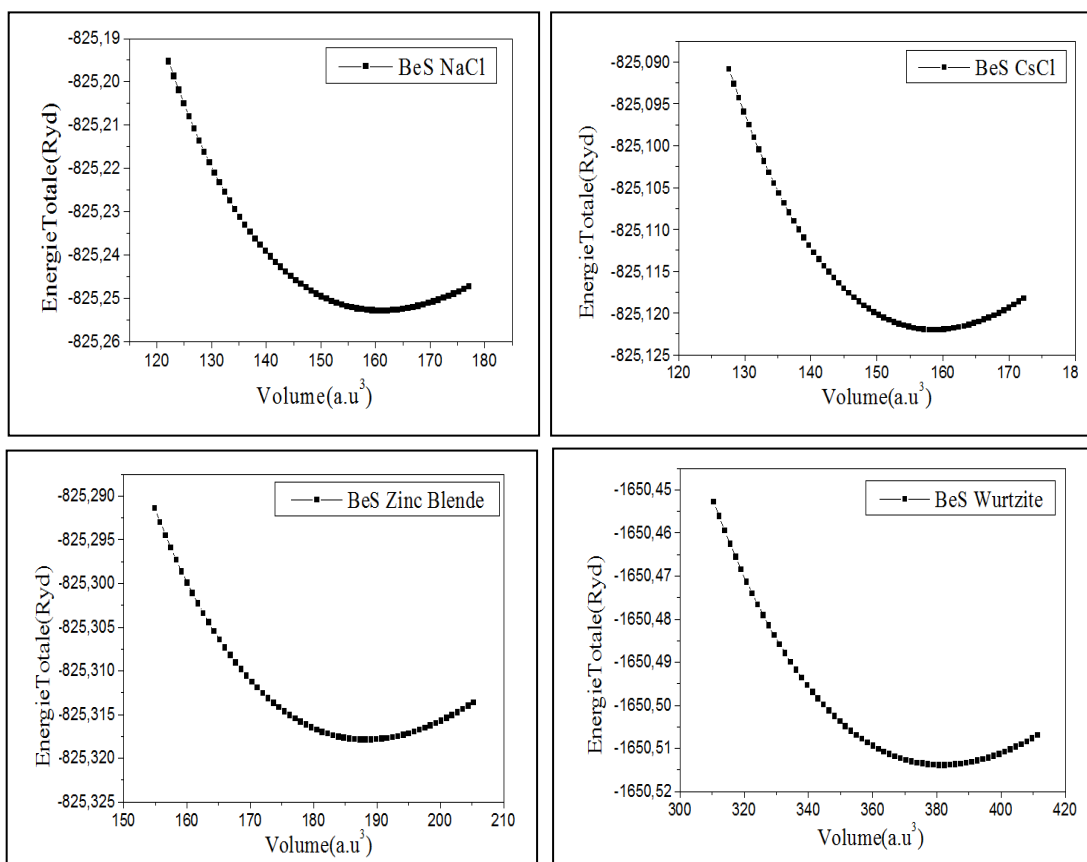


Figure (III.1) : Variation d'énergie totale en fonction de volume dans les différentes phases NaCl,CsCl,ZincBlende,Wurtzite pour composerBeS.

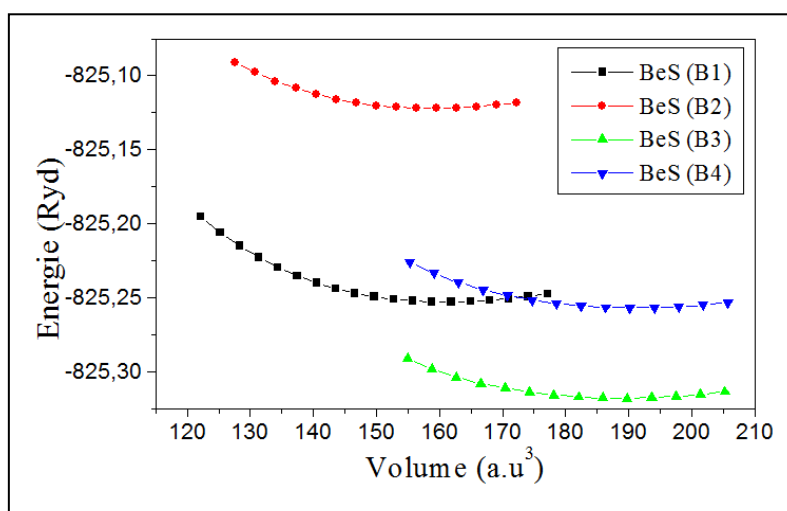


Figure (III.2) : La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les différentes structures du BeS, en utilisant la LDA.

		<i>Constante du réseau (Å)</i>				<i>B_{0eq}</i> (Mbar)	<i>B'₀</i>
		<i>a_{eq}</i> (Å)	<i>c_{eq}</i>	<i>c/a_{eq}</i>	<i>u_{eq}</i>		
Würtzite (<i>B₄</i>)	Notre calcul	6.0936	4.6	1.21053	0.49	0.9916	3.4942
	Exp						
Zinc <i>Blende</i> (<i>B₃</i>)	Autres calculs						
	Notre calcul	4.8154				0.956	3.795
	Exp	4.86 ^a , 4.87 ^b				1.05 ^b	3.5 ^b
	Autres calculs	4.7558 ^c , 4.82 ^d	,			1.16 ^c , 1.13 ^d	3.22 ^c , 3.99 ^d
CsCl (<i>B₂</i>)	Notre calcul	4.54				1.0833	3.4626
	Autres calculs	2.87 ^c				0.76 ^c	3.25 ^c
NaCl (<i>B₁</i>)	Notre calcul	4.57				1.181	3.5216
	Autres calculs	4.49 ^c				1.26 ^c	3.2 ^c

^aRef[6].^bRef[7].^cRef [8]. ^dRef[9].

Tableau (III.2) : Paramètre de maille *a*, module de compressibilité *B₀*, ainsi que sa dérivée *B'₀* par rapport à la pression pour les différentes phases étudiées pour BeS.

III.2.1.2.Séléniure de béryllium BeSe :

On établit la même interprétation précédemment pour le composé BeS à le composé BeSe qui est possède les états $Be (1s^2 2s^2)$ et $Se(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10})$ comme étant des états de cœur et les états $Be (2s^2)$, $S (4s^2 4p^4)$ comme étant des états de Valence. Le calcul de l'énergie totale est obtenu à partir de la variation du volume par l'optimisation de l'équation d'état de Murnaghandéfinie par l'équation (III.3) à fin d'obtenir le paramètre de maille, le module de compression et la dérivée de la pression. Les valeurs des rayons des sphères muffin-tin R_{MT} , le nombre des ondes planes (PW) et le nombre des points k spéciaux de la zone irréductible de Brillouin pour les différentes structures (B_1 , B_2 , B_3 , B_4) utilisées sont donnés dans le tableau (III.3).

		NaCl (B_1)	CsCl (B_2)	Zinc-blende (B_3)	Würtzite (B_4)
Ondeplane (PW)		2974	4168	5064	11978
R_{MT}	Be	2.0862	2.3537	1.8926	1.8660
	Se	2.449	2.6542	2.3132	2.2507
Cut-off E_c(Ryd)		95.9639	118.0629	120.5137	150.0576
Nombre de point k		16	20	22	28

Tableau (III.3) :paramètres constitutifs de BeS utilisés dans nos calculs effectués par la méthode FP-LMTO dans les quatre structures.

La structure zinc blende représente la structure énergétiquement la plus favorable pour la cristallisation de chalcogénure de béryllium. Dans le tableau (III.4) les résultats obtenus pour le paramètre de réseau, le module de rigidité ainsi que sa dérivée par rapport à la pression sont comparés à ceux des mesures expérimentales et d'autres résultats théoriques. Nos valeurs prédictives pour le paramètre de réseau sont

généralement en bon accord avec l'expérience (0.86%), un résultat typique de la LDA. Cette dernière sous-estime par rapport à la calculs expérimentale.

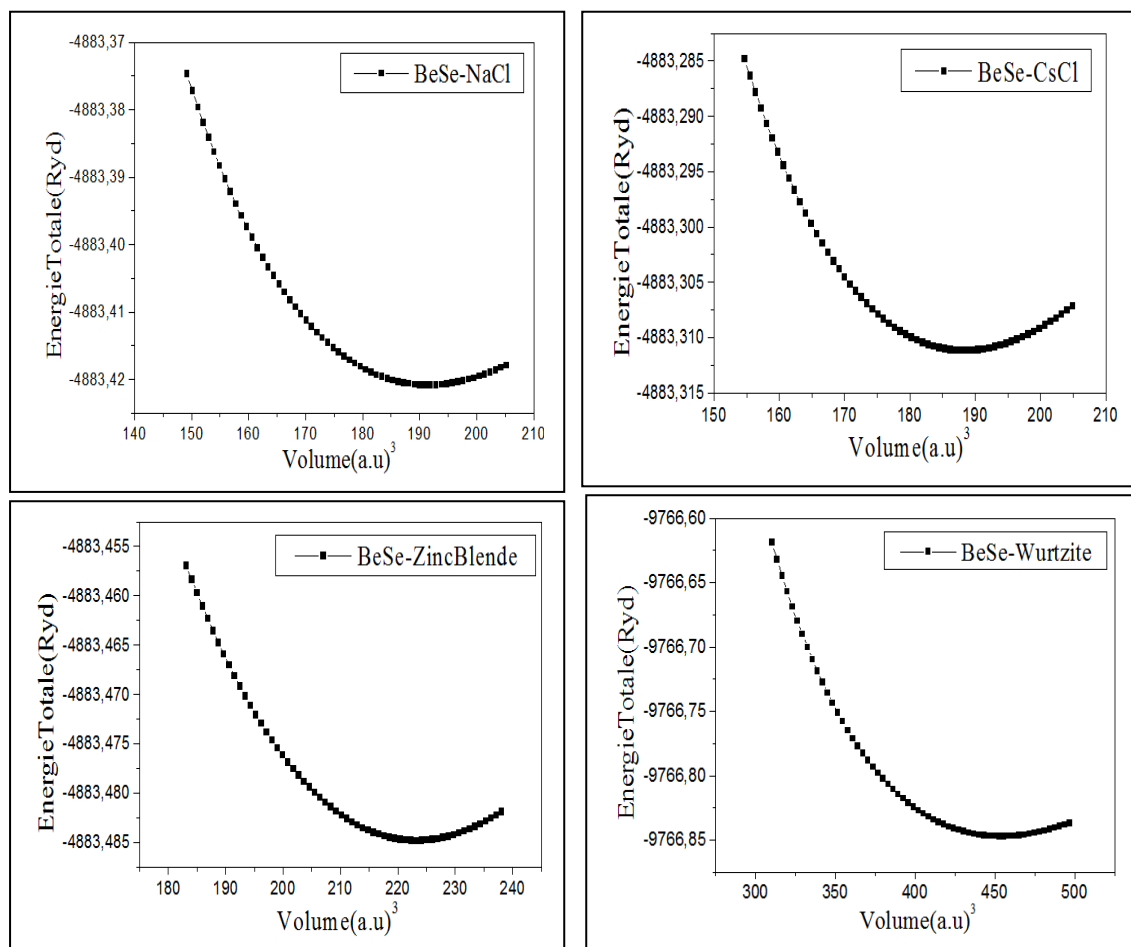


Figure (III.3) : Variation d'énergie totale en fonction de volume dans les différentes phases NaCl,CsCl,ZincBlende,Wurtzite pour BeSe

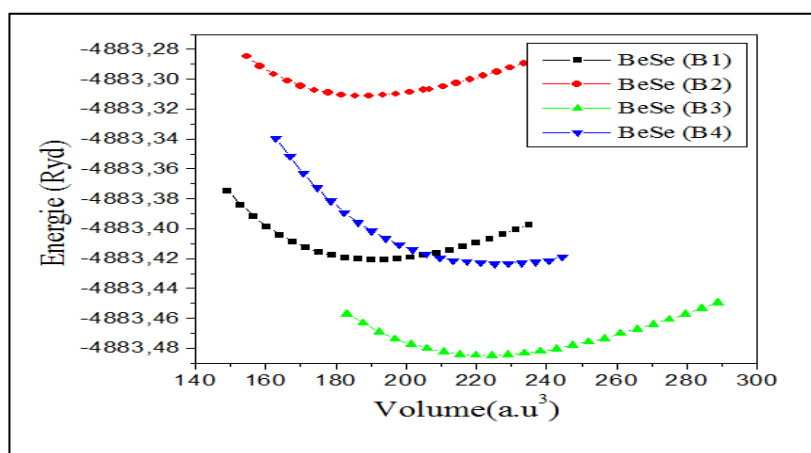


Figure (III.4) : La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les différentes structures du BeSe, en utilisant la LDA.

Cependant, La valeur du module de compressibilité obtenue par *LDA* est surestimée d'environ 2.3% par rapport à la valeur expérimentale pour *BeSe* dans la phase B3.

La figure (III.4) illustre la variation de l'énergie de cohésion en fonction du volume pour les quatre principales structures connues de *BeSe*. Nous constatons premièrement que la phase zinc blende B3 est la plus stable à pression ambiante très proche de la phase würtzite. Cette dernière est métastable, puisque que sa courbe ne croise jamais celle de la phase zinc blende. L'ordre des énergies des phases prédites par la méthode FP-LMTO est $E_{B3} < E_{B1} < E_{B4} < E_{B2}$ qui tend à consolider les résultats ab-initio déjà vus. Nos valeurs calculées pour la structure zinc-blende (B3), et par comparaison aux valeurs expérimentales d'A.Waag et F.Fischer[10].

		<i>Constante du réseau (Å)</i>				<i>B_{0eq}</i>	<i>B'₀</i>
		<i>a_{eq} (Å)</i>	<i>c_{eq}</i>	<i>c/a_{eq}</i>	<i>u_{eq}</i>	(Mbar)	
Wurtzite <i>(B₄)</i>	Notre calcul	6.4554				0.8510	3.2637
	Exp						
Zinc <i>Blende</i> <i>(B₃)</i>	Autres calculs						
	Notre calcul	5.0960				0.9412	1.9884
	Exp	5.14 ^d , 5.13 ^f				0.9200 ^f	
	Autres calculs	5.0451 ^c , 5.13 ^e				0.98 ^c , 0.80 ^e	3.56 ^c , 3.11 ^e
CsCl <i>(B₂)</i>	Notre calcul	4.8152				0.9324	3.8649
	Autres calculs	3.0600 ^c				0.7500 ^c	3.3800 ^c
NaCl <i>(B₁)</i>	Notre calcul	4.8419				0.9886	3.5792
	Autres calculs	4.0800 ^c				0.9100 ^c	4.0300 ^c

^cRef. [11]. ^dRef. [12]. ^eRef. [13]. ^fRef. [14].

Tableau (III.4) : Paramètre de maille *a*, module de compressibilité *B₀*, ainsi que sa dérivée *B'₀* par rapport à la pression pour les différentes phases étudiées pour **BeSe**.

Nous notons que la *LDA* surestime légèrement les constantes du réseau d'environ 0.87% pour a_{eq} . La valeur du module de compressibilité obtenue par *LDA* est sous-estimée d'environ 3.6% par rapport à la valeur expérimentale. Par ailleurs nous remarquons la bonne concordance de nos résultats avec les autres travaux théoriques.

III.2.1.3. Tellurure de béryllium BeTe :

Le composé BeTe se caractérise par la plus grande disparité entre les rayons de l'anion et du cation. Malgré cette différence d'encombrement entre les volumes ioniques, ce composé possède les états *Be* ($1s^2 2s^2$) et *Te* ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10}$) comme étant des états de cœur et les états *Be* ($2s^2$), *Te* ($5s^2 5p^4$) comme étant des états de Valence. Dans le présent travail nous avons utilisé l'équation de Murnaghan[15]. Pour résoudre l'équation d'état dans les différentes phases structurales, nous avons utilisé des rayons R_{MT} constants et propres à chaque type d'atome. La valeur du rayon a été fixée à 1.991, 2.534 u.a. pour *Be*, *Te*, en B_3 . L'énergie de coupure E_C (cutoff energy) utilisé, qui permet une approximation correcte des fonctions propres est de 104.1125 Ryd. Le nombre de points k est de 16, 20, 22, 28, pour les phases *NaCl*, *CsCl*, zinc-blende et würtzite respectivement tableau (III.5).

		NaCl (B ₁)	CsCl (B ₂)	Zinc-blende (B ₃)	Würtzite (B ₄)
Ondeplane (PW)		2974	3070	5064	11978
R_{MT}	Be	2.1826	2.4376	1.991	1.7417
	Te	2.7779	2.9793	2.534	2.0452
Cut-off E_c (Ryd)		80.2177	81.7316	104.1125	150.0534
Nombre de point k		16	20	22	28

Tableau (III.5) : paramètres constitutifs de BeTe utilisés dans nos calculs effectués par la méthode FP-LMTO dans les quatre structures.

Le terme d'échange-corrélation figure sous la version *LDA* dans le code *FP-LMTO*. Les figures (III.6) illustrent la variation de l'énergie totale en fonction du volume obtenue pour les différentes phases structurales étudiées pour *BeTe* dans l'approximation *LDA*. Les courbes obtenues pour ce composé permettent de confirmer que la structure zinc-blende B_3 est la plus stable comparée aux différentes phases citées auparavant.

		Constante du réseau (Å)				B_{0eq} (Mbar)	B'_0
		a_{eq} (Å)	c_{eq}	c/a_{eq}	u_{eq}		
Wurtzite (B_4)	Notre calcul	7.060	4.6	1.2105	0.49	0.62	3.38
	Exp						
Zinc Blende (B_3)	Autres calculs						
	Notre calcul	5.56				0.62	4.97
	Exp	5.62 ^d ; 5.617 ^f				0.67 ^f	
	Autres calculs	5.53 ^c ; 5.58 ^e				0.71 ^c 0.60 ^e	3.38 ^c 3.72 ^e
$CsCl$ (B_2)	Notre calcul	5.22				0.72	4.56
	Autres calculs	3.31 ^c				0.7 ^c	3.54 ^c
$NaCl$ (B_1)	Notre calcul	5.27				0.75	3.99
	Autres calculs	5.25 ^c				0.79 ^c	3.75 ^c

^cRef. [11]. ^dRef. [12]. ^eRef. [13]. ^fRef. [14].

Tableau (III.6) : Paramètre de maille a , module de compressibilité B_0 , ainsi que sa dérivée B'_0 par rapport à la pression pour les différentes phases étudiées pour *BeTe*.

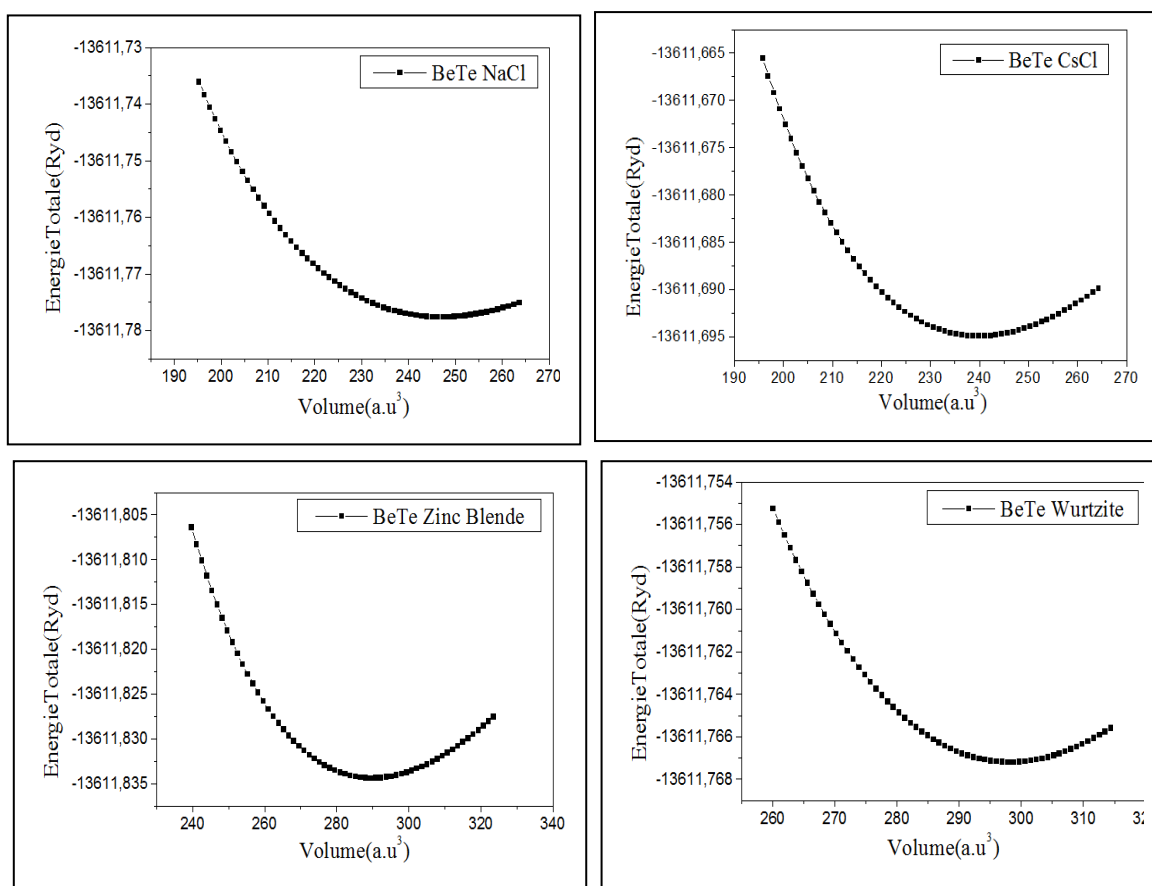


Figure (III.5) : Variation d'énergie totale en fonction de volume dans les différentes phases *NaCl*, *CsCl*, *Zinc Blende*, *Wurtzite* pour *BeTe*.

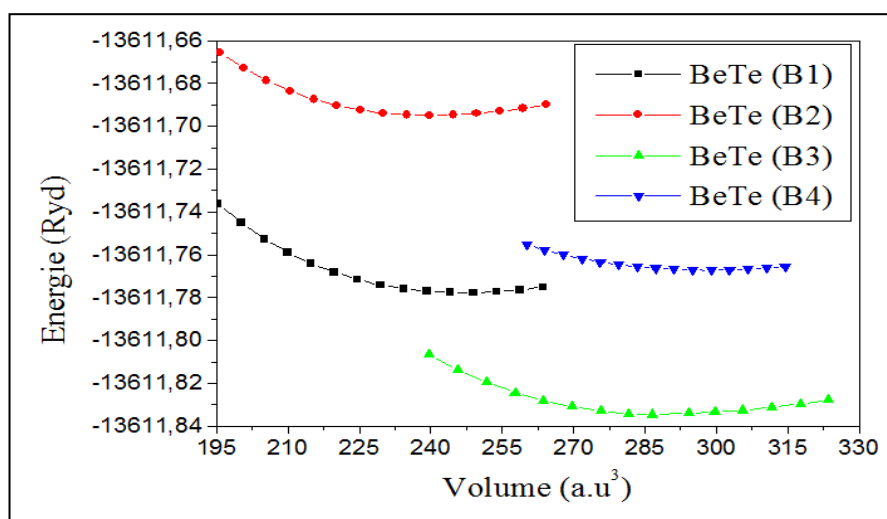


Figure (III.6): La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les différentes structures du *BeTe*, en utilisant la LDA.

Nous reportons au tableau (III.6) un récapitulatif des différentes valeurs du paramètre de réseau, du module de compressibilité ainsi que de sa dérivée par rapport à la pression, quantités extraites de l'équation d'état des systèmes étudiés. Dans ce même tableau une comparaison est faite entre les résultats expérimentaux et théoriques provenant de travaux disponibles en bibliographie.

D'après la figure (III.6), nous remarquons que la structure zinc-blende (B_3) est la plus stable de paramètre estimé $a=5.56\text{Å}$. L'ordre des énergies des phases prédites est : $E_{B_3} < E_{B_1} < E_{B_4} < E_{B_2}$. Par comparaison, nous notons que l'approximation *LDA* sous-estime la constante de réseau, d'environ 1.07% pour le paramètre d'équilibre par rapport à celles trouvées expérimentales [16]. Les valeurs du module de compressibilité obtenues par notre calcul sont comparées à d'autres valeurs expérimentales et théoriques. Le résultat trouvé est sous-estimé d'environ 7.46% par rapport à la valeur expérimentale [16].

III.2.2. Les propriétés électroniques :

III.2.2.1. Structure de bandes électroniques :

Les structures de bandes des composés étudiés dans ce chapitre ont été calculées avec les paramètres de maille théoriques plutôt que ceux fournis par l'expérience. Cette démarche est logique dans le contexte d'un calcul premier principe auto cohérent et permet de comparer les résultats théoriques à l'expérience. Les figures (III.7), (III.8) et (III.9) sont représentées les structures de bandes électroniques selon les directions de haute symétrie de la zone de Brillouin associée à la structure zinc blende. Les figures sont complétées avec les densités d'états correspondantes obtenues par la résolution des équations de Kohn-Sham (avec LDA) au moyen de la méthode FP-LMTO pour BeS, BeSe et BeTe respectivement. Une première comparaison entre les structures de bandes révèle une topologie similaire pour l'ensemble des trois semi-conducteurs étudiés. Comme pour tous les semi-conducteurs, ils se caractérisent par leur bande interdite (gap), qui sépare les derniers états occupés de la bande de valence et les états libres de la bande de conduction. Comme l'énergie maximale de la bande de valence se situe au point Γ et l'énergie minimale de la bande de conduction au point X ces composés sont des semi-conducteurs à gap indirect. Ce gap a été estimé à 2.96

eV, 2.50eV et 1.83eV respectivement. Ces calculs dès les largeurs de la bande interdite (gap fondamental) sont sous-estimés comparées à la valeur expérimentale. Cependant, nos résultats restent de qualité satisfaisante en les comparant aux résultats théoriques [17] obtenus avec la même approximation d'échange corrélation (LDA).

	$E_{\Gamma}^{\Gamma}(\text{eV})$			$E_{\Gamma}^{\text{X}}(\text{eV})$		
	Notre calcul	Exp	Autres calculs	Notre calcul	Exp	Autres calculs
BeS	5.47		5.51 ^a 5.67 ^b 5.40 ^c	2.96	5.5 ^d	2.75 ^a 2.98 ^b 2.82 ^c
BeSe	4.27		4.72 ^a 4.04 ^b	2.5	4-4.5 ^d	2.39 ^a , 2.31 ^b
BeTe	3.59	4.2 ^e	3.68 ^a 3.28 ^b	1.83	2.7 ^d , 2.8 ^f	1.8 ^a , 1.6 ^b

^aRef. [6]. ^bRef. [7]. ^cRef. [11]. ^dRef. [12]. ^eRef. [13]. ^fRef. [14].

Tableau (III.7) : Valeur des énergies des bandes interdites de la phase Zinc Blende (B_3) calculées avec la LDA aux points spéciaux de composée BeS, BeSe et BeTe.

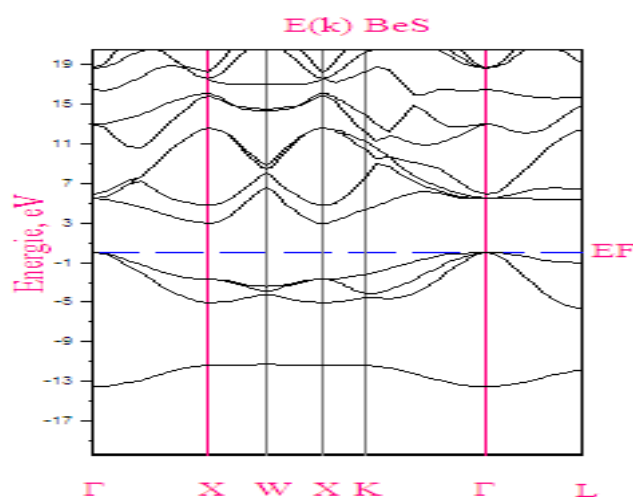


Figure (III.7) : La structure de bande électronique de BeS dans la structure Zinc Blende (B_3) calculée par la LDA.

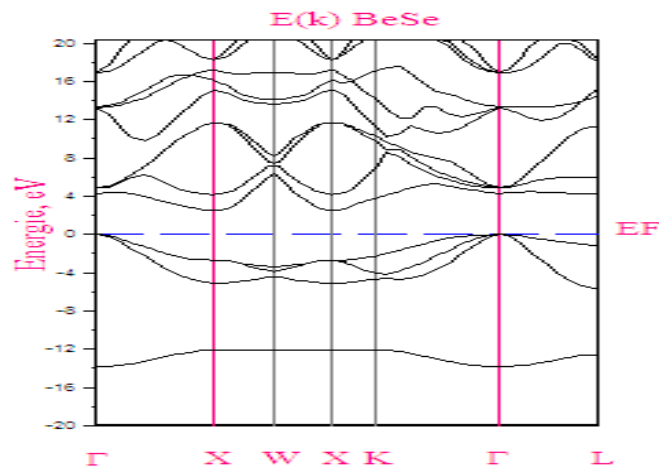


Figure (III.8) : La structure de bande électronique de *BeSe* dans la structure Zinc Blende (B3) calculé par la LDA.

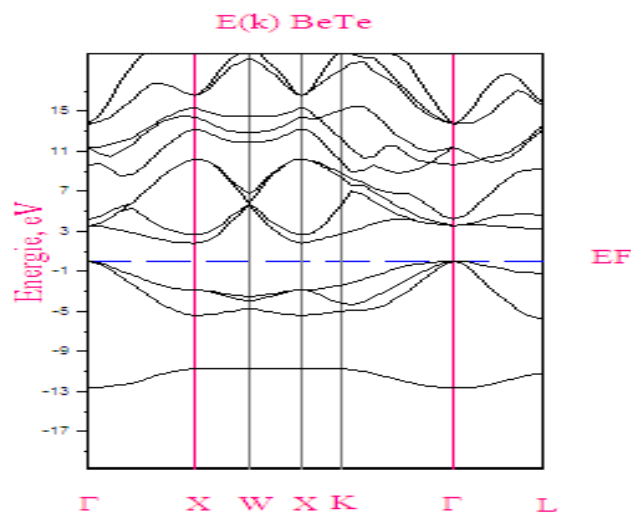
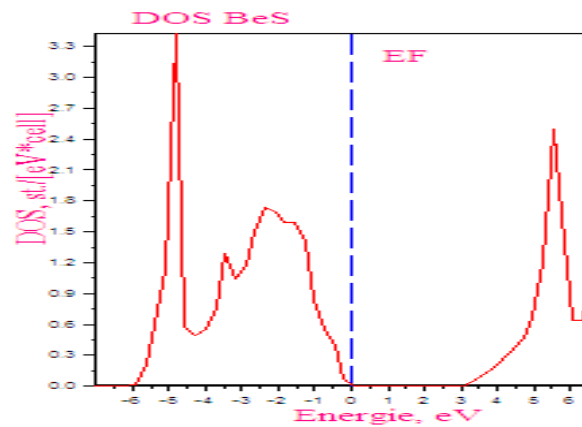


Figure (III.9): La structure de bande électronique de *BeTe* dans la structure Zinc Blende (B3) calculé par la LDA.

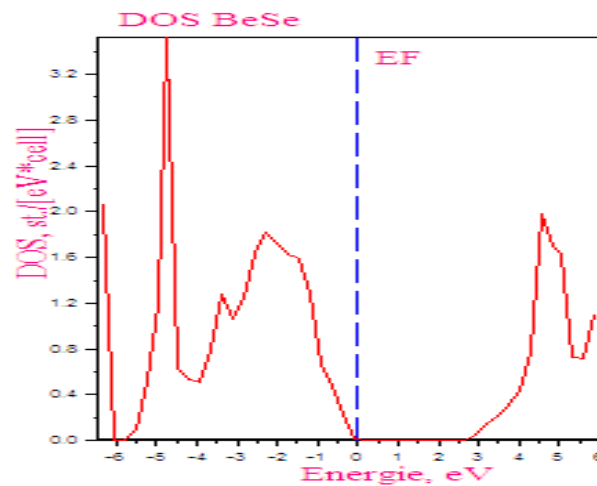
III.2.2.2. Densité d'états électroniques totale (DOS) :

La densité d'état comptabilise le nombre d'états électroniques ayant une énergie donnée. La densité d'état totale permet, par exemple, d'avoir accès aux propriétés de conduction électronique d'un matériau. De plus, pour chaque atome, on définit une sphère de rayon donné à l'intérieur de laquelle on projette la densité électronique sur des harmoniques sphériques de type S , P , d ou f .

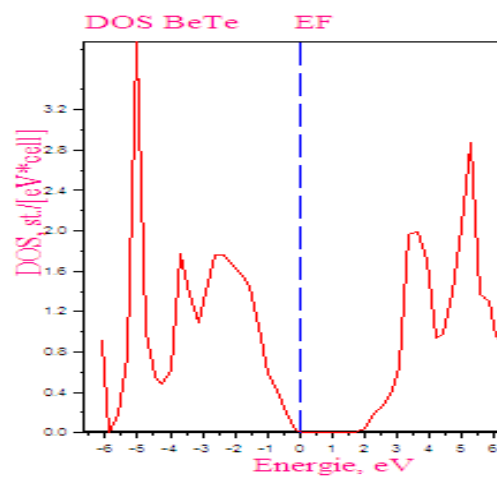
Dans les figures (III.10), (III.11) et (III.12), on présente les différentes contributions à la densité d'états totale des systèmes BeS , $BeSe$ et $BeTe$ respectivement. Les contributions qualifiées de densité d'états totale des différentes orbitales atomiques. Il apparaît que pour chaque composé, le caractère p de l'anion (S, Se, Te) et du cation (Be) prédomine dans les bandes anti-liantes au-dessus du zéro en énergie (bandes de conduction). On compte également dans ces mêmes bandes une présence non négligeable d'orbitale d des chalcogènes (S, Se et Te) et une faible participation de l'état s de l'anion ainsi que du cation. La bande de valence est formée essentiellement d'orbitales p des chalcogènes ($3p$, $4p$ et $5p$ pour S, Se et Te respectivement) avec une faible participation de caractère p du béryllium au sommet de la bande et une faible contribution des états s du béryllium au bas de la bande. La faible hybridation entre les états de l'anion et du cation observée pour la bande de valence est en faveur du caractère ionique du composé. L'énergie de gap est de 0 à 3 pour les premiers composés BeS et $BeSe$, sauf la composée $BeTe$ est de 0 à 2.



Figures (III.10) : Densités d'états du *BeS* (totale) en phase Zinc Blende (B3) avec la LDA.



Figures (III.11) : Densités d'états du *BeSe* (totale) en phase Zinc Blende (B3) avec la LDA.



Figures (III.12) : Densités d'états du *BeTe* (totale) en phase Zinc Blende (B3) avec la LDA.

Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons étudié les différentes propriétés physiques des chalcogénures de béryllium BeX ($X = S, Se, Te$). Nous avons présenté les propriétés structurales en utilisant l'approximation de la densité locale (LDA). En générale, on remarque que les résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres calculs ab-initio. Nous avons calculés les propriétés électroniques pour les trois composés, pour mieux d'écrire les propriétés électroniques de ce système près du maximum de la bande de valence [18], suite à laquelle nous avons obtenue, des résultats que nous avons comparé avec d'autres résultats issus de la bibliographie et de l'expérience.

Références

- [1] C. Chauvet, E. Tournié, and J.-P. Faurie, Phys. Rev. B61: 5332, 2000
- [2] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864; W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. 140 (1965) A1133
- [3] J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865.
- [4] J.P. Perdew, Y. Wang, Phys. Rev. B 45 (1992) 13244.
- [5] F. D. Murnaghan, The Compressibility of Media under extreme Pressures in Proceeding of the National Academy of Sciences, Vol 30: 244-247, 1944.
- [6] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70 thed, edited by R.C. Weast, D.R. Lide, M.J. Astle, and W.H. Beyen, (Chemical Rubber, Boca Raton, 1990), pp. E -106 and E -110
- [7] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B14: 556, 1976.
- [8] M. W. Cho, J. H. Chang, D. M. Bagnall, K. W.Koh, S. Saeki, K. T. Park, Z. Zhu, K. Higara and T. Yao, J. Appl. Phys. 85: 512, 1999.
- [9] M.-H. Tsai, F. C. Peiris, S. Lee, and J. K. Furdyna, Phys. Rev. B65: 235202, 2002.
- [10] A. Waag, F. Fischer, H. J. Lugauer, Th. Litz, J. Laubender, U. Lunz, U. Zehnder, W. Ossau, T. Gerhardt, M. Möller, and G. Landwehr, J. Appl. Phys. 80: 792, 1996.
- [11] M. W. Cho, J. H. Chang, D. M. Bagnall, K. W.Koh, S. Saeki, K. T. Park, Z. Zhu, K. Higara and T. Yao, J. Appl. Phys. 85: 512, 1999.
- [12] M.-H. Tsai, F. C. Peiris, S. Lee, and J. K. Furdyna, Phys. Rev. B65: 235202, 2002.
- [13] A. Waag, F. Fischer, H. J. Lugauer, Th. Litz, J. Laubender, U. Lunz, U. Zehnder, W. Ossau, T. Gerhardt, M. Möller, and G. Landwehr, J. Appl. Phys. 80: 792, 1996.
- [14] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70 thed, edited by R.C. Weast, D.R. Lide, M.J. Astle, and W.H. Beyen, (Chemical Rubber, Boca Raton, 1990), pp. E -106 and E -110
- [15] F. D. Murnaghan, The Compressibility of Media under extreme Pressures in Proceeding of the National Academy of Sciences, Vol 30: 244-247, 1944.
- [14] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70 thed, edited by R.C. Weast, D.R. Lide, M.J. Astle, and W.H. Beyen, (Chemical Rubber, Boca Raton, 1990), pp. E -106 and E -110
- [16] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70 thed, edited by R.C. Weast, D.R. Lide, M.J. Astle, and W.H. Beyen, (Chemical Rubber, Boca Raton, 1990), pp. E -106 and E -110.
- [17] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70 thed, edited by R.C. Weast, D.R. Lide, M.J. Astle, and W.H. Beyen, (Chemical Rubber, Boca Raton, 1990), pp. E -106 and E -110
- [18] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B14: 556, 1976.

