

## Sommaire

|  |    |
|--|----|
| Liste des figures .....  | V  |
| Liste des tableaux .....   | VI |
| Introduction générale .....  | 2  |
| <b>Chapitre I : les semi-conducteurs II-VI BeX (X=S, Se et Te)</b>     |    |
| I-1) Introduction.....   | 5  |
| I-2-1) Semi-conducteur intrinsèque .....                               | 6  |
| I-2-2) Semi-conducteur extrinsèque .....                               | 6  |
| I-3) Applications des semi-conducteurs .....                           | 9  |
| I-4) Les semi-conducteurs II-VI .....                                  | 10 |
| I-5) Les propriétés structurales d'un semi-conducteur II-VI .....      | 11 |
| I-5-1) Structure Cristalline .....                                     | 12 |
| I-5-1-1) Structure zinc blende.....                                    | 13 |
| I-5-1-2) Structure wurtzite.....                                       | 13 |
| I-6) Les propriétés électroniques .....                                | 14 |
| I-7) Les Propriétés optiques.....                                      | 15 |
| I-8) L'intérêt de l'introduction du béryllium Be.....                  | 16 |
| Conclusion.....  | 18 |
| Référence.....   | 19 |
| <b>CHAPITR II : LA THEORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE (DFT)</b> |    |
| II-1) Introduction .....   | 22 |
| II-2) Approximation de Born-Oppenheimer .....                          | 23 |
| II-3) Approximation de Hartree .....                                   | 23 |
| II-4) La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) .....         | 23 |

|   |    |
|---|----|
| II-4-1) Théorèmes de Hohenberg et Kohn .....                | 24 |
| II-4-2) Les équation de Kohn et Sham .....                  | 25 |
| II-4-3) Résolution des équations de Kohn et Sham .....      | 26 |
| II-4-4) La fonctionnelle d'échange-corrélation.....         | 27 |
| II-4-4-1)Approximation de la densité locale (LDA).....      | 28 |
| II-4-4-2)Approximation du gradient généralisé (GGA) .....   | 29 |
| II-5) Introduction à la méthode FP-LMTO.....                | 31 |
| II-5-1) Avantage et inconvénient de la méthode FP-LMTO..... | 32 |
| Conclusion .....  | 35 |
| Référence.....  | 36 |

### CHAPITR III : RESULTATS ET DISCUSSIONS

|   |    |
|---|----|
| III-1) Introduction.....                                  | 38 |
| III-2) Détails de calcul.....                             | 39 |
| III-2-1) Propriétés structurales.....                     | 40 |
| III-2-1-1) Sulfure de béryllium BeS.....                  | 40 |
| III-2-1-2) Sélénium de béryllium BeSe.....                | 45 |
| III-2-1-3) Tellure de béryllium BeTe.....                 | 49 |
| III-2-2) Les propriétés électronique.....                 | 52 |
| III-2-2-1) Structure de bande électronique .....          | 52 |
| III-2-2-2) Densité d'états électronique totale (DOS)..... | 55 |
| Conclusion.....   | 57 |
| Référence.....  | 58 |
| Conclusion générale.....                                  | 60 |

