



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi – Tébessa



الجامعة الجزائرية للعلوم والتكنولوجيا  
FSESUV  
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES  
ET DES SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature  
et de la Vie

Département des Sciences de la matière

MEMOIRE DE MASTER

Domaine: Sciences de la matière

Filière: Physique

Option: Physique de la matière condensée

*Thème:*

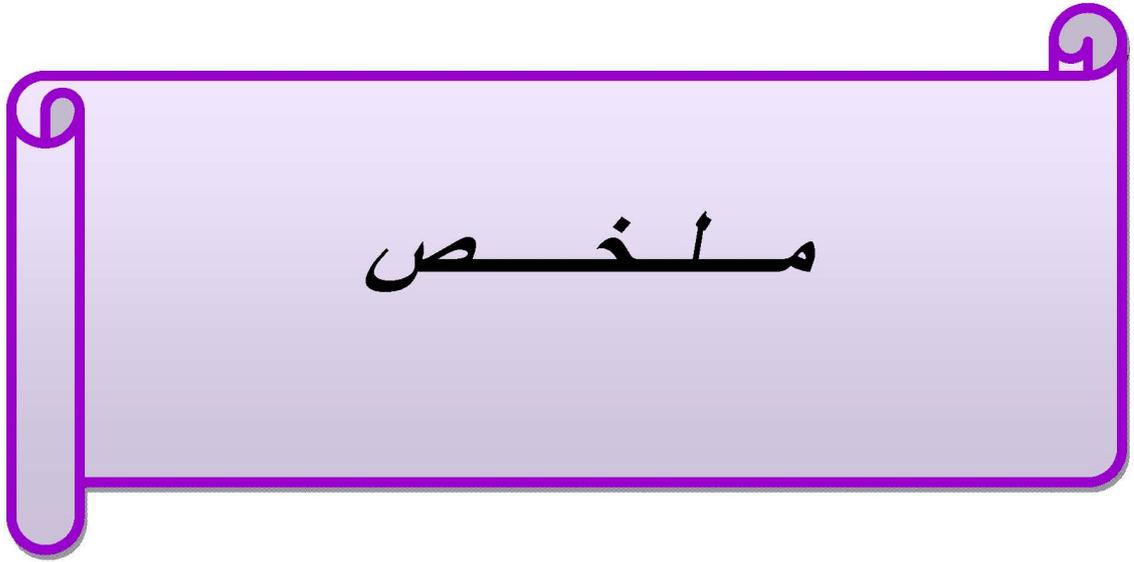
**Effet de Béryllium sur la densité de charge  
électronique des composés BeTe, CdTe  
et leurs alliages au bord de la bande de conduction**

*Fatma Zahra Lamri et Bouthaina Toumi*

Devant le jury:

Abid Boudiar	MCA	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Med El Hadi Mansour	MCB	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le dimanche 04 juin 2023 à 10:00



ملخص

## الملخص:

الهدف من هذا العمل البحثي هو دراسة كثافة الشحنة الإلكترونية لمركبات أشباه الموصلات الثنائية BeTe و CdTe و سبائكما المتبلورة في بنية زنك بلاند .

في هذه الدراسة، استخدمنا طريقة شبه الكمون التجريبي مقترنة بتقريب البلورة الافتراضية. لقد درسنا مساهمة عصابات التكافؤ. بالإضافة إلى مجموع عصابات التكافؤ الأربعة. درسنا أيضا عصابة النقل الاولى عند نقطة التناظر العالي  $\Gamma$ .

إهتمام خاص تم تركيزه على تأثير العشوائية و تأثير التركيب الستوكيومتري للبيريليوم على كثافة الشحنة الإلكترونية.

بصفة عامة يوجد توافق بين النتائج التي تحصلنا عليها و اعمال البحوث المتوفرة .

**الكلمات المفتاحية:** طريقة شبه الكمون التجريبي، تقريب البلورة الافتراضية، BeTe ، CdTe، كثافة الشحنة الإلكترونية، تأثير العشوائية.



*Résumé*

***Résumé :***

L'objectif de ce travail de recherche est d'étudier la densité de charge électronique des composés binaires semiconducteurs BeTe , CdTe et leurs alliages qui se cristallisent dans la structure zinc-blende.

Dans cette étude, nous avons utilisé la méthode du pseudopotentielle empirique couplée avec l'approximation du cristal virtuelle. Nous avons étudié la contribution des bandes de valences. Ainsi que la somme des quatre bandes de valence. Nous avons également étudié la première bande de conduction au point de haute symétrie  $\Gamma$ .

Une attention particulière a été accentuée sur l'effet de désordre et de la composition stoechiométrique de Béryllium sur la densité de charge électronique.

Dans l'ensemble, Nos résultats concordent mieux avec d'autres travaux disponibles.

***Mot clés :*** *méthode du pseudopotentielle empirique, approximation du cristal virtuelle, BeTe et CdTe, densité de charge électronique, effet de désordre.*



*Abstract*

***Abstract :***

The aim of this research work is to study the electronic charge density of binary semiconductor compounds BeTe, CdTe and their alloys crystallizing in the zinc-blende structure.

In this study, we used the empirical pseudopotential method coupled with the virtual crystal approximation. We have studied the contribution of the valence bands. As well as the sum of the four valence bands. We have also studied the first conduction band at the high symmetry point  $\Gamma$ .

Particular attention was accentuated on the disorder effect and the Beryllium stoichiometric composition on the electronic charge density.

Generally, our results agree better with other available works.

***Keywords:*** *empirical pseudopotential method, the virtual crystal approximation, CdTe, BeTe, electronic charge density, disorder effect.*

# Remerciements

*Nous remercierons avant tout **ALLAH** le tout Puissant qui nous a offert la volonté et la santé et nous a aidé à réaliser et accomplir ce travail.*

*En premier lieu, nous remercierons notre directeur de mémoire, Docteur **Abderrachid Bechiri**, Professeur à l'Université de Tébessa, d'avoir accepté d'encadrer ce mémoire. Nous le remercions pour ses conseils et ses qualités humaines, ses discussions scientifiques et fructueuses. Nous le remercions également pour sa disponibilité permanente et son soutien durant cette période du travail.*

*Nous exprimons nos sincères remerciements au Dr **Abid Boudiar**, maître conférences A, à l'Université de Tébessa, pour avoir accepté de présider le jury de cette mémoire.*

*Nous remercions sincèrement le Dr **Mohamed El Hadi Mansour**, maître conférences A, à l'Université de Tébessa, d'avoir accepté de faire partie du jury.*

*Nous adressons un vif remerciement à l'ensemble des enseignants qui ont assuré notre formation le long de toutes nos années d'études.*

*Nous remercions également tous nos enseignants pour leur générosité et la grande patience dont ils ont fait preuve malgré leur charge de travail académique et professionnelle.*

*Nos sincères remerciements vont à toutes les personnes qui nous ont aidés et soutenus de près ou de loin.*

**Fatma Zahra & Bouthaina**



# *Sommaire*

## Sommaire

المُلخَص	
Résumé	
Abstract	
Remerciements	
Sommaire	
Liste des tableaux.....	<i>i</i>
Liste des figures.....	<i>ii</i>
Liste des symboles.....	<i>iv</i>
Introduction générale.....	1
▪ Références.....	3

## Chapitre I

## Méthode des pseudopotentiels

I-1-Introduction .....	4
I-2- Définition du pseudopotentiel .....	4
I-3- Méthode du pseudopotentiel .....	5
I-4- Formalisme mathématique de la méthode du pseudopotentiel .....	5
I-5- Caractéristiques du pseudopotentiel .....	7
I-6- Modèles des pseudopotentiels .....	7
I-6-1-Modèle local .....	7
I-6-1-a-Premier modèle (Modèle de Coulomb) .....	8
I-6-1-b-Deuxième modèle (modèle d'Aschcroft) .....	8
I-6-1-c-Troisième modèle (Appelé modèle Heine et Abarenkov) .....	8
I-6-2- Modèle non local .....	8
I-6-2- a-Fonction de Heine-Abarenkov .....	9
I-6-2- b-Fonction de Gauss .....	9
I-6-2- c-Fonction d'Aschcroft .....	10
I-7-Méthode du pseudopotentiel empirique .....	10
I-8- Approximation du cristal virtuel (V.C.A) .....	11
I-9-. Approximation du cristal virtuel amélioré (V. C. A. A) .....	12
I-10-Méthode de calcul .....	13
▪ Références .....	15

## Chapitre II

### Liaisons cristallines

II-1- Introduction .....	17
II-2- Structure de la matière .....	17
II-2-1-Définition .....	17
II-2-2-Type de la structure .....	17
II-2-2-a-Structure amorphe .....	17
II-2-2-b- Structure cristalline .....	18
II-2-3-Systèmes cristallins .....	18
II-3- Liaisons cristallines .....	18
II-4-Types de liaisons cristallines .....	19
II-4-1-Liaisons fortes .....	19
II-4-1-1-Liaisons covalentes .....	19
II-4-1-1- a- Liaison covalente pure .....	19
II-4-1-1- b- Liaison covalente polaire .....	19
II-4-1-2- Liaisons ioniques .....	20
II-4-1-3-Liaisons métalliques .....	21
II-4-2-Liaisons faibles .....	21
II-4-2-1-Liaisons hydrogènes .....	21
II-4-2-2-Liaisons de Van der Waals .....	22
II-4-2-3-Liaisons moléculaires .....	22
II -5- Structure Zinc- blende .....	22
II-6- Première zone de Brillouin .....	23
II-6-1-Points de haute symétrie .....	24
II -6-2-Lignes de haute symétrie .....	24
▪ Références .....	25

## Chapitre III

### Résultats et discussion

III-1-Introduction .....	26
III-2-Densité de charge électronique .....	27
III-3-Densité de charge pour chaque bande de valence au point $\Gamma$ .....	28
III-3-1-Première bande de valence .....	29
III-3-2-Deuxième bande de valence .....	29
III-3-3-Troisième bande de valence .....	34

---

III-3-4-Quatrième bande de valence .....	34
III-4-Somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ des composés binaires .....	39
III-5-Profil des quatre bandes de valence et la somme des composés binaires BeTe et CdTe .....	42
III- 6-Effet de désordre.....	44
III- 6- 1- Première bande de valence .....	44
III-6-2- Deuxième bande de valence .....	44
III- 6- 3-Troisième bande de valence .....	46
III- 6- 4-Quatrième bande de valence .....	48
III- 6- 5-Somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ .....	50
III- 7-Densité de charge pour la première bande de conduction au point $\Gamma$ .....	52
III- 7-1-Effet de désordre .....	52
III-7-2-Effet de la composition stœchiométrique .....	58
▪ Références .....	60
Conclusion .....	61



*Liste des Tableaux*

*Liste des tableaux*

<b>Tableau</b>	<b>Titre</b>	<b>page</b>
<i>Tableau III-1</i>	<i>Les facteurs de forme symétrique et antisymétrique ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs BeTe et CdTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau en (Å).</i>	<b>27</b>
<i>Tableau III-2</i>	<i>Les facteurs d'ionocité.</i>	<b>42</b>



*Liste des figures*

### Liste des figures

<b>Figure</b>	<b>Titre</b>	<b>Page</b>
Figure I-1	<i>Fonction de Heine-Abarenkov.</i>	<b>9</b>
Figure I-2	<i>Fonction de Gauss.</i>	<b>10</b>
Figure I-3	<i>Fonction d'Ashcroft.</i>	<b>10</b>
Figure I-4	<i>Organigramme de la procédure de calcul par E.P.M.</i>	<b>14</b>
Figure II-1	<i>Liaison cristalline type covalente.</i>	<b>20</b>
Figure II-2	<i>Liaison cristalline type métallique.</i>	<b>21</b>
Figure II-3	<i>Structure cubique Zinc blende (Sphalérite)</i>	<b>23</b>
Figure II-4	<i>Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries.</i>	<b>23</b>
Figure III-1	<i>Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point <math>\Gamma</math> du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>30</b>
Figure III-2	<i>Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point <math>\Gamma</math> du composé BeTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>31</b>
Figure III-3	<i>Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point <math>\Gamma</math> du composé CdTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>32</b>
Figure III-4	<i>Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point <math>\Gamma</math> du composé BeTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>33</b>
Figure III-5	<i>Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point <math>\Gamma</math> du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>35</b>
Figure III-6	<i>Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point <math>\Gamma</math> du composé BeTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>36</b>
Figure III-7	<i>Densité de charges électroniques de la quatrième bandes de valence au point <math>\Gamma</math> du composé CdTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>37</b>
Figure III-8	<i>de charges électroniques de la quatrième bande de valence au point <math>\Gamma</math> du composé BeTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>38</b>
Figure III-9	<i>Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point <math>\Gamma</math> du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>40</b>
Figure III-10	<i>Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point <math>\Gamma</math> du composé BeTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.</i>	<b>41</b>
Figure III-11	<i>Profil de la densité de charges électroniques des quatre bandes de valence et la somme au point <math>\Gamma</math> des composés binaires CdTe et BeTe suivant la direction [111].</i>	<b>43</b>
Figure III-12	<i>Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point <math>\Gamma</math> de l'alliage <math>Be_{0.5}Cd_{0.5}Te</math> (a) profil suivant la direction [111] sans désordre et avec désordre, (b) contour dans le plan (110) sans désordre et (c) avec désordre.</i>	<b>45</b>

Figure III-13	Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.5}Cd_{0.5}Te$ (a) profil suivant la direction $[111]$ sans désordre et avec désordre, (b) contour dans le plan $(110)$ sans désordre et (c) avec désordre.	46
Figure III-14	Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.5}Cd_{0.5}Te$ (a) profil suivant la direction $[111]$ sans désordre et avec désordre, (b) contour dans le plan $(110)$ sans désordre et (c) avec désordre.	47
Figure III-15	Densité de charges électroniques de la quatrième bande de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.5}Cd_{0.5}Te$ (a) profil suivant la direction $[111]$ sans désordre et avec désordre, (b) contour dans le plan $(110)$ sans désordre et (c) avec désordre.	48
Figure III-16	Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.5}Cd_{0.5}Te$ (a) profil suivant la direction $[111]$ sans désordre et avec désordre, (b) contour dans le plan $(110)$ sans désordre et (c) avec désordre.	49
Figure III-17	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ profil suivant la direction $[111]$ et contour dans le plan $(110)$ des composés binaires : (a) $CdTe$ , (b) $BeTe$ .	51
Figure III-18	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.1}Cd_{0.9}Te$ , (a) profil suivant la direction $[111]$ , sans désordre et avec désordre, et contour dans le plan $(110)$ sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).	53
Figure III-19	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.3}Cd_{0.7}Te$ , (a) profil suivant la direction $[111]$ , sans désordre et avec désordre, et contour dans le plan $(110)$ sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).	54
Figure III-20	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.5}Cd_{0.5}Te$ , (a) profil suivant la direction $[111]$ , sans désordre et avec désordre, et contour dans le plan $(110)$ sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).	55
Figure III-21	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.7}Cd_{0.3}Te$ , (a) profil suivant la direction $[111]$ , sans désordre et avec désordre et contour dans le plan $(110)$ sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).	56
Figure III-22	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_{0.9}Cd_{0.1}Te$ , (a) profil suivant la direction $[111]$ , sans désordre et avec désordre et contour dans le plan $(110)$ sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).	57
Figure III-23	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Te$ , profil suivant la direction $[111]$ , sans désordre (VCA).	58
Figure III-24	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Te$ , profil suivant la direction $[111]$ , sans désordre (VCAA).	59



*Liste des symboles*

**Liste des symboles**

<b>Symboles</b>	<b>Sens physique</b>
H	<i>Hamiltonien.</i>
$\Psi$	<i>Fonction d'onde du système.</i>
$\Phi$	<i>Ondes planes.</i>
$\Phi_c$	<i>Etat atomique qui occupe le cœur</i>
W	<i>Point qui se trouve sur l'un des sommets des faces carrées.</i>
$E_c$	<i>Energie du cœur.</i>
E	<i>Energie de valence.</i>
$\hbar$	<i>Constante réduite de Planck.</i>
Z	<i>Nombre des électrons de valence atomique.</i>
A	<i>Potentiel constant dans la région du cœur.</i>
$A_1(E)$	<i>Energie des états profonds.</i>
$f_1(r)$	<i>Fonction simulant l'effet du cœur.</i>
$\rho_1$	<i>Opérateur de projection.</i>
$V_a(\vec{G})$	<i>Facteur de forme.</i>
$S(\vec{G})$	<i>Facteur de structure.</i>
$\Delta$	<i>Ligne qui représente la direction 100 . Elle relie le centre <math>\Gamma</math> au point X.</i>
$r_c$	<i>Rayon du cœur.</i>
V	<i>Volume de la maille.</i>
$\Gamma$	<i>Point de centre de la première zone de Brillouin.</i>
$\Sigma$	<i>Point appartenant au plan de symétrie.</i>
$V_{NL}(r)$	<i>Potentiel non locale.</i>
$V_L(r)$	<i>Potentiel locale.</i>
X	<i>Point de centre d'une face carrée de l'octaèdre</i>
L	<i>Point de centre d'une face hexagonale de l'octaèdre.</i>
$V_p$	<i>Représente le pseudo potentiel</i>
$V_R$	<i>Potentiel répulsive positif.</i>
$V_C$	<i>Potentiel attractif du cœur négatif.</i>
$\vec{R}$	<i>Vecteur du réseau direct.</i>
$\vec{\tau}$	<i>Vecteur de la translation réseau direct.</i>



*Introduction générale*

## **Introduction Générale**

La science des matériaux joue un rôle très important dans les développements technologiques et son rôle ne cesse de progresser dans beaucoup de domaines, dans le domaine des semi-conducteurs. Ces dernières années ont été marquées par un effort soutenu dans la croissance et la maîtrise de nouveaux matériaux à fortes potentialités technologiques.

Les semi-conducteurs appartenant à la famille des éléments II-VI sont caractérisés par un large bande interdite (gap énergétique) et ils se cristallisent dans la phase zinc blende. Ces matériaux jouent un rôle de plus en plus important dans la réalisation des dispositifs électroniques et optoélectronique. En combinant des composés binaires semi-conducteurs II-VI, nous obtenons de nouveaux alliages permettant de diversifier les propriétés physiques telles que la bande interdite, les indices de réfractions et les constantes diélectriques....etc; afin de répondre à la nécessité des applications des dispositifs de la nouvelle génération [1, 2].

Ces semi-conducteurs sont particulièrement importants pour permettre aux dispositifs à large bande interdite de fonctionner à des températures beaucoup plus élevées de l'ordre de 300°C. Cette caractéristique les rend très attrayants pour les applications militaires, et permet également à ces dispositifs de fonctionner à des niveaux de puissance beaucoup plus élevés dans des conditions normales. De plus, la plupart de ces matériaux à large bande interdite ont également une densité de charge électrique critique beaucoup plus élevée [3].

Les matériaux semi-conducteurs ont été découverts par M. Faraday la même année que l'effet photoélectrique a été découvert par E. Becquerel en constatant la différence de potentiel par l'éclairement d'un point de contact entre un électrolyte et un conducteur [4, 5]. Mais ce n'est qu'en 1931 que les bases de la théorie moderne de la physique des matériaux semi-conducteurs ont été élaborées par A. H. Wilson, qui considéra ces matériaux comme des isolants à faible bande interdite et introduisit la notion trou [4, 6].

Les chalcogénures diatomiques à large bande interdite IIB – VIA sulfure de cadmium (CdS), sélénure de cadmium (CdSe) et tellure de cadmium (CdTe) sont des matériaux semi-conducteurs bien connus dans le domaine de la microélectronique et de l'optoélectronique depuis plusieurs décennies [7, 8].

Le composé CdTe et son alliage ternaire  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  sont des matériaux semi-conducteurs importants utilisés dans les cellules solaires, les détecteurs de rayons X et autres dispositifs optoélectroniques [9–12].

Les composés BeS, BeSe et BeTe ont des caractéristiques particulières en font des candidats appropriés pour des applications technologiques dans la fabrication des diodes laser bleu-vert et de

diodes à émission laser [13-16]. Les composés BeS, BeSe et BeTe sont très hautement toxique de nature et la préparation de leurs monocristaux ou couches épitaxiales est extrêmement difficile.

Waag et *al.* révèlent que les composés BeSe et BeTe sont des candidats extrêmement prometteurs comme matériaux de base pour les diodes laser émettant de la lumière bleue et verte [14]. Wilmers et ses collaborateurs ont déterminé les bandes interdites électroniques et les fonctions diélectriques de BeSe [15] et BeTe au-dessus du bord d'absorption fondamental en utilisant la technique d'ellipsométrie spectroscopique (SE) dans la gamme des ultraviolets (UV) et des ultraviolets sous vide (VUV) [16]. Wagner et *al.* ont rapporté les propriétés des phonons et les constantes diélectriques de BeSe et BeTe par réflectance dans l'infrarouge lointain et moyen et par spectroscopie Raman [17].

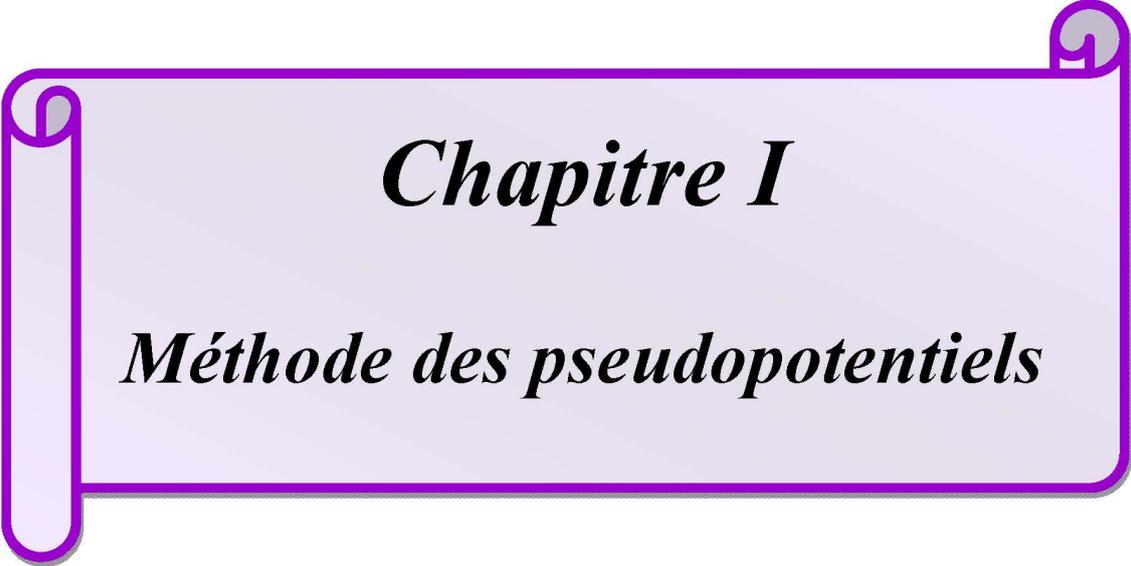
Le but de notre travail est l'étude de la densité de charge électronique de l'alliage ternaire (Be,Cd)Te. Nos calculs sont basés sur la méthode du pseudo-potentiel empirique E.P.M couplée avec l'approximation du cristal virtuel VCA qui inclut l'effet du désordre comme un potentiel effectif. Le travail de ce mémoire est organisé comme suit :

- Le premier chapitre est concentré sur la méthode de pseudo potentiel utilisé dans la présente étude.
- Le deuxième chapitre est consacré à la présentation des différents types de liaisons chimiques existant dans les cristaux.
- Le troisième chapitre expose les résultats obtenus dans notre étude, ainsi que leurs interprétations et leurs comparaisons avec d'autres travaux disponibles.

En fin une conclusion générale est présentée à la fin de cette étude.

**Références :**

- [1] A. S. Dissanayake, S. X. Huang, H. X. Jiang, J. Y. Lin, *Phys. Rev. B* **44**, 13343 (1991).
- [2] H. X. Jiang, G. Brown, J.Y. Lin, *J. Appl. Phys.* **69**, 6701 (1991).
- [3] A. Bali, thèse de doctorat, université Mohamed Kheider, Biskra (Algérie), 2013.
- [4] B. Salamé, thèse de doctorat, université Pierre et Marie Curie, Paris (France), 2015.
- [5] R. Williams, *the journal of chemical physics* **32**, 1505 (1960).
- [6] A. H. Wilson, *the theory of electronic semi-conductors*, Peoceedings of the royal society of london A, **133**, 458 (1931).
- [7] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, John Wiley & Sons Ltd. (2005).
- [8] Surya Chattopadhyaya, Utpal Sarkar, Bimal Debnath, Manish Debbarma, Debankita Ghosh, Sayantika Chanda, Rahul Bhattacharjee, *Physica B: Physics of Condensed Matter* **563**, 1 (2019).
- [9] R. K. Willardson and A. C. Beer (ed), *Semiconductors and Semimetals vol 13* (New York: Academic) 1978.
- [10] T. E. Schlesinger and R. B. James (ed) *Semiconductors and Semimetals vol 43* (San Diego: Academic) 1995.
- [11] Z. Q. Shi, C. M. Stahle and P. Shu, *Proc. SPIE* **3553**, 90 (1998).
- [12] S. Mnasri, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, N. Bouarissa and M. Said, *Semicond. Sci. Technol.* **24**, 095008 (2009).
- [13] W. M. Yim, J. P. Dismukes, E. J. Stofko, R. J. Paff, *J. Phys. Chem. Solids* **33**, 501 (1972).
- [14] A. Waag, F. Fischer, H. J. Lugauer, T. Litz, J. Laubender, U. Lunz, U. Zhender, W. Ossau, T. Gerhardt, M. Moller, and G. Landwehr, *J. Appl. Phys.* **80**, 792 (1996).
- [15] K. Wilmers, T. Wethkamp, N. Esser, C. Cobet, W. Richter, M. Cardona, V. Wagner, H. Lugauer, F. Fischer, T. Gerhard, M. Keim, *Phys. Rev. B* **59**, 10071 (1999).
- [16] K. Wilmers, T. Wethkamp, N. Esser, C. Cobet, W. Richter, V. Wagner, H. Lugauer, F. Fischer, T. Gerhard, M. Keim, M. Cardona, *J. Electron. Matr.* **28**, 670 (1999).
- [17] V. Wagner, J. J. Liang, R. Kruse, S. Gundel, M. Kleim, A. Waag, J. Geurts, *Phys. Status Solidi B* **215**, 87 (1999).



# *Chapitre I*

## *Méthode des pseudopotentiels*

---

## Chapitre I

### Méthode des pseudopotentiels

#### I-1-Introduction :

Les physiciens ont mis au point une technique de calcul efficace, précise et rapide, qui est la méthode des pseudopotentiels.

Le principe de base de cette dernière est d'obtenir les états de valence d'un système (atome, molécule, cristal) sans calculer les états du cœur qui ne sont pas nécessaires à la description des propriétés physiques qui suppose que les états électroniques des électrons du cœur sont insensibles à la configuration électronique voisine [1].

La base physique et chimique de cette heureuse approximation est double. Premièrement, la plupart des électrons d'un atome sont liés à son noyau, tandis que certains électrons forment des liaisons chimiques avec d'autres atomes. Le rôle du pseudopotentiel est d'éliminer les électrons internes sans importance et le potentiel nucléaire responsable de leur association. Deuxièmement, la nature quantique et les statistiques de Fermi des électrons sont telles que la combinaison de répulsion et d'attraction dues aux électrons internes et au noyau entraîne des annulations substantielles, et peut être efficacement remplacée par un pseudo potentiel ionique relativement lisse, qui n'agit que sur les quelques électrons importants [2].

#### I-2- Définition du pseudopotentiel :

C'est un ensemble de méthodes qui visent la substitution du potentiel d'interaction coulombien du noyau et les effets des électrons dits « de cœur », fortement liés, par un potentiel effectif interagissant uniquement avec les électrons dits « de valence » [3].

La méthode du pseudopotentiel de Phillips-Kleinman-Antoncik (PKA) est la première à montrer que la condition d'orthogonalité dans la région de cœur entre les états de cœur et de valence agit comme un potentiel répulsif qui tend à s'opposer au potentiel nucléaire attractif ressenti par les électrons de valence.

L'approche du pseudopotentiel est considérée comme une révolution dans le calcul théorique de la structure électronique de la matière, Au vu de ses succès dans la description et la prédiction des propriétés des matériaux [4].

La technique du pseudopotentiel [5-6] s'est avérée, depuis son introduction, très efficace dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides.

La plus importante amélioration qui a été faite dans cette dernière décennie, consiste à utiliser les pseudopotentiels *a-b* initio [7] où cette méthode ne demande que le nombre atomique et le paramètre de maille pour générer son pseudopotentiel.

**I-3- Méthode du pseudopotentiel :**

En 1934, la méthode du pseudopotentiel a été introduite par Fermi pour étudier les états atomiques des couches minces.

Ensuite, Hellman [8] a proposé une approximation du pseudopotentiel qui puisse être utilisée dans la détermination du pseudopotentiel énergétique dans les métaux alcalins [9].

La théorie du pseudopotentiel a débuté comme une extension de la méthode des (OPW) [9]. Mise à part la possibilité qu'elle fournit de raffiner les calculs, et c'est là que réside la relation entre les deux méthodes [10].

En 1959, Phillip et Kleinman ont développé une méthode de pseudopotentiel qui est largement utilisée pour calculer la structure de bande des minéraux.

Méthode du pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies et d'autres propriétés des semiconducteurs [10].

Avantage de la méthode du pseudopotentiel est que seuls les électrons de valence sont pris en compte, ou l'on suppose que les électrons de cœur sont gelés et que seuls les électrons de valence se déplacent. [11].

Méthode du pseudopotentiel est basée principalement sur des données expérimentales telles que l'analyse des paramètres cristallins au rayon X, la réflexion et l'absorption des cristaux [12].

**I-4- Formalisme mathématique de la méthode du pseudopotentiel :**

La fonction d'onde  $\psi$  est donnée par la somme d'ondes planes  $\phi$  et des états atomiques occupés du cœur  $\phi_c$  [13]:

$$\psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (\text{I-1})$$

$\psi$  : Fonction d'ondes planes orthogonalisées (O.P.W).

$\phi$  : Est la pseudofonction d'onde.

$\phi_c$  : Les états atomiques occupés du cœur.

La fonction d'onde  $\psi$  doit être orthogonale aux états du cœur  $\phi_c$  :

$$\langle \phi_c | \psi \rangle = 0 \quad (\text{I-2})$$

Alors la solution pour  $b_c$  rapporte :

$$\psi = \phi - \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c \quad (\text{I-3})$$

À partir de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{I-4})$$

En remplaçant la fonction d'onde par son expression dans l'équation de Schrödinger on obtient :

$$H\psi = H\left(\phi - \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c\right) = E\left(\phi - \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c\right) \quad (I-5)$$

$$H\phi - H \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c = E\phi - E \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c \quad (I-6)$$

$$H\phi + \sum_c (E - E_c) \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c = E\phi \quad (I-7)$$

Philips et Kleinman ont noté que l'orthogonalization des ondes planes aux états du cœur est formellement équivalente à l'introduction d'un terme répulsive  $V_R$ , donc on peut réécrire l'équation (I-7) d'une façon condensée comme suit [14, 15]:

$$H\phi + \sum_c (E - E_c) \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c = (H + V_R)\phi = E\phi \quad (I-8)$$

$V_R$ : représente le potentiel répulsif défini comme suit :

$$V_R \phi = \sum_c (E - E_c) \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c \quad (I-9)$$

Donc :

$$(H + V_R)\phi = E\phi \quad (I-10)$$

La valeur propre de l'énergie  $E$  n'est pas un pseudo énergie mais la vraie énergie somme du potentiel cristallin et le potentiel  $V_R$

$$H + V_R = T + V_c + V_R = T + V_p \quad (I-11)$$

Si l'énergie est séparée en énergie cinétique  $T$  et en potentiel attractif  $V_c$  :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_c \quad (I-12)$$

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + V_c + V_R \right] \phi = E\phi \quad (I-13)$$

Ou :

$$p^2 = -\hbar^2 \Delta \quad (I-14)$$

Donc :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_c + V_R \right) \phi = E\phi \quad (I-15)$$

Alors

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p \right) \phi = E\phi \quad (I-16)$$

Ou :

$$V_p = V_R + V_c \quad (I-17)$$

$V_p$  : représente le pseudo potentiel car c'est la somme d'un potentiel attractif  $V_R$  et  $V_c$  un potentiel répulsif et devient faiblement attractif dans la région du cœur faiblement répulsif dans la région des électrons de valence [16, 17].

$V_p$  : Est le pseudopotentiel faible

$V_R$  : Est les potentiel répulsif (positif)

$V_c$  : Est les potentiel attractif (négatif) du cœur

### I-5- Caractéristiques du pseudopotentiel :

L'opérateur pseudopotentiel  $V_p$  qui n'a pas d'expression locale  $V_p(r)$ , pour le connaître et l'introduire dans les calculs, il suffit de disposer de ses éléments matriciels déterminés sur une base complète de fonctions [18].

$$\Psi V_R \Psi = \sum (E_v - E_c) \left| \int dr \Psi^* \Psi \right|^2 \quad (I-18)$$

Où :

Etant donné que  $E_v$  est légèrement supérieure à  $E_c$  donc  $E_v$  est toujours positif ainsi  $V_R$  est très faible d'où l'utilisation de la théorie des électrons presque libres pour le calcul des niveaux de valences.

Lorsque l'effet du cœur est négligé, le pseudo potentiel devient local et dépend explicitement de la position  $r$  il peut être le suivant [19]:

$$V_R = V(r; r_0) = \sum (E_v - E_c) |\phi_c(r)\rangle \langle \phi_c(r)| \phi_v(r)\rangle \quad (I-19)$$

Où la fonction  $\phi$  dépend de  $r$ .

Si on tient compte de l'effet du cœur, le potentiel devient non local [20].

### I-6- Modèles des pseudopotentiels :

Le principe du pseudopotentiel est principalement basé sur des modèles expérimentaux et les capacités sont utilisées pour "améliorer" les propriétés constatées des semi-conducteurs et de leurs alliages, pour ensuite calculer la structure de bande d'un solide [11, 21].

Il existe deux sortes de pseudopotentiel : le pseudopotentiel local (EPM local) et le pseudopotentiel non local (EPM non local) dont le développement sera donné ci-après.

#### I-6-1- Modèle local :

Ce modèle est le plus utilisé dans le calcul de la structure de bandes des semi-conducteurs, il dépend de la variable  $r$ . Donc le pseudopotentiel indépendant de l'effet du cœur est négligeable [22]. Dans cette approche, il ya plusieurs formes des potentiels ont été proposées :

**I-6-1-a- Premier modèle (Modèle de Coulomb) :**

Celui-ci est formé par un potentiel de Coulomb à large spectre et un potentiel stable dans la région centrale.

Dans ce modèle, Le potentiel  $V(r)$  est sous la forme [23]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & \text{si } r > r_c \\ -\frac{Ze}{r_c} & \text{si } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-20})$$

Où :

$Z$  : la valence atomique.

$r_c$  : le potentiel utilisé pour ajuster les données atomique.

**I-6-1-b- Deuxième modèle (modèle d'Aschkroft) :**

Le modèle d'Aschkroft suggère que le potentiel est toujours similaire et souvent utilisé, ce qu'on appelle aussi "the empty core potential " [24] étant le potentiel des cœurs inoccupés présenté sous la forme suivante [18, 25]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & \text{si } r > r_c \\ 0 & \text{si } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-21})$$

**I-6-1-c- Troisième modèle (Appelé modèle Heine et Abarenkov) :**

Ce modèle introduit plus de flexibilité pour « fitter » les données atomiques [21] en utilisant un potentiel  $A$  considéré comme constant dans la région du cœur, dans ce cas la forme du potentiel sera [26]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & \text{si } r > r_c \\ A & \text{si } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-22})$$

**I-6-2- Modèle non local :**

Le but de l'approche non-locale est de combler les insuffisances de l'approche précédente.

Des expériences utilisant les rayons X ont prouvé que la technique du pseudopotentiel local ne donne pas de bons résultats concernant la densité de charge de quelques composés [27, 28].

Chaque matériau possède une correction qui dépend de la configuration des électrons par rapport au cœur ionique. Cette correction non locale est introduite pour évaluer l'influence du cœur ionique sur les électrons de valence. Elle est déterminée pour chaque moment angulaire ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) et, par conséquent, est donnée par la relation suivante :

$$V_{nl}(r, E) = \sum_{l=1}^{\infty} A_l(E) F_l(r) P_l \quad (\text{I-23})$$

- $A_1(E)$  : est la profondeur du puits de potentiel.
- $F_1(r)$  : est une fonction simulant l'effet du cœur.
- $P_1$  : est la projection de la l-IIème composante du moment angulaire.

#### I-6-2-a- Fonction de Heine-Abarenkov :

Cette fonction très simple exprime l'effet du cœur avec une certaine pondération unitaire [19]. Sa forme est carrée, elle est illustrée dans (Figure I-1) avec l'expression suivante [18]:

$$F(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > r_c \\ 1 & \text{si } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-24})$$



Figure I-1: Fonction de Heine-Abarenkov

#### I-6-2- b- Fonction de Gauss :

C'est une fonction plus réaliste, car ses résultats sont proches et conformes aux résultats expérimentaux [29]. Cette forme gaussienne tient compte de l'effet du cœur [19].

La forme gaussienne illustrée dans (Figure I-2) se donne par l'expression suivante :

$$F(r) = \exp\left(\frac{-r^2}{r_c^2}\right) \quad (\text{I-25})$$

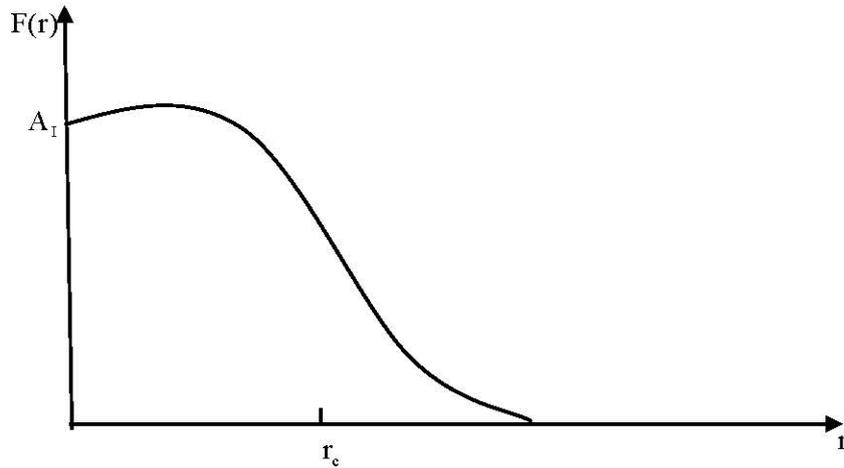


Figure I-2 : Fonction de Gauss.

### I-6-2- c- Fonction d'Ashcroft:

Cette fonction prend la forme carrée dans la région du cœur où elle est la plus simple et l'effet du cœur est pris en compte. Cet effet est atténué jusqu'à l'annulation lorsque on s'éloigne du cœur (figure I-3) [30].

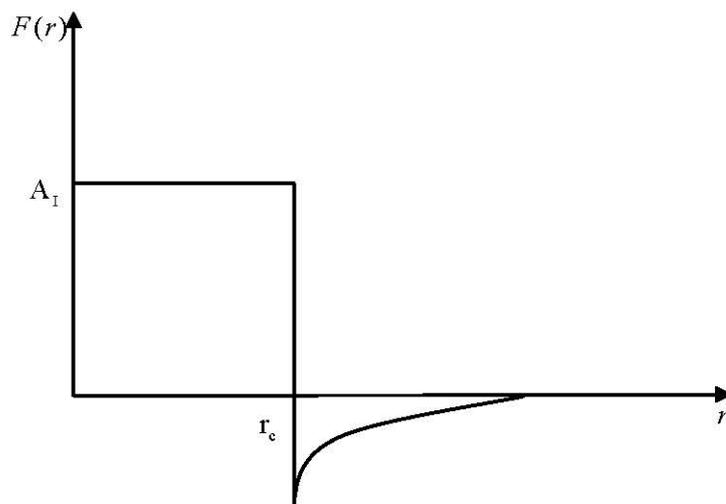


Figure I-3: Fonction d'Ashcroft

### I-7- Méthode du pseudopotentiel empirique :

Le concept de pseudopotentiel a été introduit dans les années 1930 par Fermi. Par la suite, Hellmann utilise cette notion pour le calcul des niveaux énergétique de métaux alcalins. Ces premiers pseudopotentiels sont qualifiés d'empiriques ; ce qui signifie qu'ils ne sont pas obtenus par calcul mais paramétrés pour reproduire au mieux des référence.

L'utilisation d'un tel type de pseudopotentiel se fonde sur deux constatations. Tout d'abord, sil était certain à cette époque que l'on pouvait obtenir de manière exacte et par calcul des apseudopotentiels cela passait par la résolution de calcul complexe (impliquant les fonctions d'onde

atomiques) impossible à résoudre sans ressources informatiques. L'utilisation d'une méthode empirique bien plus simple allait par conséquent de soi. Ensuite, on peut constater qu'un certain nombre d'éléments peuvent être décrit par des pseudopotentiels paramétrés tout en fournissant une approximation acceptable de l'interaction électron de valence - ion de cœur. Cela était vrai surtout pour les métaux alcalins, les métaux "simples" tels que l'aluminium ainsi que les semi-conducteurs [31].

Dans cette technique, le pseudopotentiel cristallin  $V_p(\mathbf{r})$  est une combinaison linéaire de potentiels atomiques  $V_a$  qui peut être exprimée comme une somme sur les vecteurs de translation du réseau  $\mathbf{R}$  et les vecteurs de base atomique  $\boldsymbol{\tau}$  pour obtenir l'expression suivante [32]:

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}, \boldsymbol{\tau}} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}) \quad (\text{I-26})$$

$\mathbf{R}$  : est un vecteur du réseau direct.

$\boldsymbol{\tau}$  : est un vecteur de la translation réseau direct.

Lorsque nous étendons le potentiel du réseau réciproque, cela prend la forme suivante :

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) V_a(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{I-27})$$

$V_a(\mathbf{G})$  : est le facteur de forme.

$S(\mathbf{G})$  : est le facteur de structure donné par [13, 33]:

$$S(\mathbf{G}) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{r}} \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{I-28})$$

Où  $N$  : est le nombre des atomes de base.

La fonction d'onde  $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  et les valeurs des bandes d'énergie  $E_n(\mathbf{k})$  sont les solutions de l'équation [34] :

$$\left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} V_p(\mathbf{r}) \right] \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{k}) \quad (\text{I-29})$$

$n$  : L'indice de la bande.

$V_p(\mathbf{r})$  : est la fonction de pseudopotentiel.

$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  : Sont les fonctions d'ondes de Bloch qui peuvent être développées en une série d'ondes planes [24].

### I-8- Approximation du cristal virtuel (V.C.A):

Nous considérerons que l'alliage est représenté par un réseau périodique hypothétique avec un potentiel atomique moyen qui conduit à une nouvelle définition de constante de réseau et à un nouveau potentiel cristallin moyen. Cela maintient la structure à partir d'un cristal parfait. En général, les déformations sont suffisamment faibles. Il s'agit d'obtenir une approximation du cristal virtuel. [35].

Le cristal ternaire est  $A_xB_{1-x}$  composé des molécules AC avec une fraction molaire  $x$  et des molécules BC avec une fraction  $(1-x)$ . Ainsi, la propriété physique  $V(x)$  peut être représentée comme une simple interpolation analytique des propriétés de ses composés binaires AC et BC [35]. La valeur moyenne de la propriété physique  $V$  étant [9]:

$$V(x) = xV_{AC} + (1-x)V_{BC} \quad (I-30)$$

Pour l'alliage ternaire  $Be_xCd_{1-x}Te$ :

$$V(x) = xV_{BeTe} + (1-x)V_{CdTe} \quad (I-31)$$

Le potentiel de l'alliage doit être construit en fonction de la composition en tenant compte de l'effet de turbulence, afin de déterminer le calcul de la structure de bande. [24].

L'hamiltonien considéré dans la VCA est donné par :

$$H(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (I-32)$$

### I-9-. Approximation du cristal virtuel amélioré (V. C. A. A)

On ajoute un potentiel du désordre compositionnel au potentiel périodique du cristal, l'Hamiltonien total du cristal par l'approche E.P.M combiné avec la V.C.A en tenant compte du désordre V.C.A.A est donné par [18]:

$$V_p(r) = V_{VCA}(r) + V_{dés}(r) \quad (I-33)$$

$$V_{dés} = -p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (I-34)$$

Ou :

$p$  : Est le paramètre d'ajustement.

$V_p(r)$  : Est le pseudopotentiel du cristal.

$V_{VCA}$  : Le potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}$  : Le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel

$$V_p(r) = V_{VCA} - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (I-35)$$

L'équation (I-42) peut être écrite sous une forme plus étendue

$$V_p(r) = xV_{AC}(r) + (1-x)V_{BC}(r) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{AC}(r) - V_{BC}(r)] \quad (I-36)$$

Sous une forme plus condensée, en termes de séries de Fourier,  $V(r)$  p devient [18]:

$$V_p(r) = xV_{AC}(r) + (1-x)V_{BC}(r) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{AC}(r) - V_{BC}(r)] \quad (I-37)$$

Avec  $V(G)$  est le facteur de forme donné par :

$$V(G) = xV_{BeTe}(G) + (1-x)V_{CdTe}(G) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{BeTe}(G) - V_{CdTe}(G)] \quad (I-38)$$

**I-10- Méthode de calcul :**

L'approximation du pseudopotentiel empirique local se base sur le bon choix des facteurs de forme  $V(G)$  de la structure Zinc-blende à étudier et dont on connaît le paramètre de réseau. On injecte ces paramètres  $V(G)$  dans l'équation de Schrödinger, les potentiels construits et après la résolution de l'équation séculaire par la méthode des électrons presque libres on obtient les valeurs propres des énergies  $E(k)$  et les fonctions d'ondes  $\psi(k)$ . Ces valeurs sont comparées avec ceux de l'expérience si un grand écart se présente, les facteurs de forme sont modifiés et le processus est répété jusqu'à la convergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées [11].

D'autres méthodes des pseudopotentiels ont été développées pour le calcul de la structures de bandes, notamment la méthode self-consistante qui utilise la fonction d'onde obtenue par l'EPM adoptée surtout pour le calcul des fonctions diélectriques et la méthode Ab-initio appelée aussi pseudopotentiel du premier principe, utilisée dans le calcul de l'énergie totale et les propriétés structurales des solides [19].

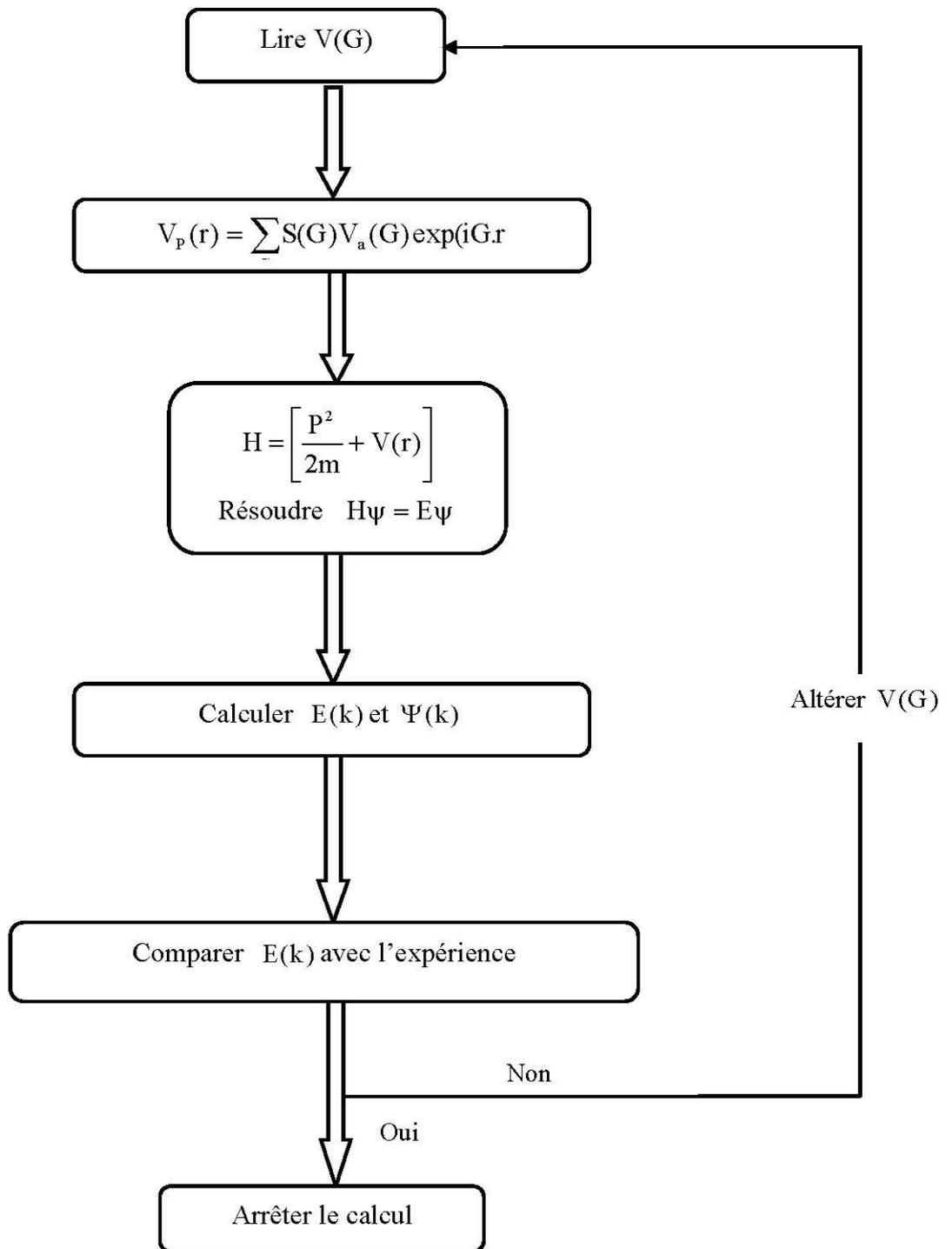


Figure I-4: Organigramme de la procédure de calcul par E.P.M.

**Références :**

- [1] U. Von Barth, C. D. Gelatt, Phys. Rev. B **21**, 2222 (1980).
- [2] A. Filippetti, "Pseudopotential Method", in encyclopedia of condensed matter physics ed. F. Bassani, G. L. Liedl and P. Wyder, Elsevier (2005).
- [3] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Pseudo-potentiel>
- [4] W. A. Harrison, Solid State Theory (Mc-Graw-Hill, New York), 1970.
- [5] P. Y. Yu and M. Cardona Fundamentals of Semiconductors and Materials Properties, Springer Verlag (2001).
- [6] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **14**, 552 (1976).
- [7] W. Pickett, Computer Phys. Reports **9**, 115 (1989).
- [8] H. Hellmann, W. Kassatotschkin, Acta Physicochim. U.R.S.S. **5**, 23 (1936).
- [9] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [10] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Physique des solides, EDP Sciences, Paris (France) 2002.
- [11] L. Hannachi, thèse de doctorat, Université de Sétif, (Algérie) 2010.
- [12] D. Brust, Phys. Rev. **134**, A1337 (1963);  
D. Brust and J. C. Phillips, Phys. Rev. Lett. **9**, 94 (1962).
- [13] H. Zenasni, Mémoire de magister, Université de Tlemcen, Algérie (2008).
- [14] F. D. Murnaghan, Proc. Natl.Acad.Sci.USA.**30**, 244 (1944).
- [15] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot, D.Wolf, Phys. Rev. B **52**, 12627 (1995).
- [16] N. Bouarissa, J. Phys. Chem. Solids **61**, 109 (2000).
- [17] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. **72**, 387. (2001).
- [18] S. Bacha, thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba, (Algérie) 2014.
- [19] W. Kara Mohamed, thèse de doctorat, Université Mohamed khider-Biskra, (Algérie) 2012.
- [20] G. Böhan, K. Unger, Physics State Solide (b) **216**, 961 (1999).
- [21] R. Mouici, mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie) 2012.
- [22] H. Saheb, mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie) 2012.
- [23] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences, Ed. Springer, New York (1989).
- [24] J. C. Phillips. Phys. Rev. **112**, 685 (1958);  
F. Bassani and V. Celli, J. Phys. Chem. Solid **20**, 64 (1961);  
M. L. Cohen and V. Heine, Phys. Rev. **122**, 1821 (1961);  
B. I. Austin, V. Heine and L. Ashen, Phys. Rev. **127**, 276 (1962).
- [25] A. Outline, memoires de magister, University Mohamed Boudiaf-Oran, (Algérie) 2010.

- [26] V. Heine, I. Abarankov, *Phil. Mag. J. Phys.* **9**, 451 (1964).
- [27] J. C. Phillips and K. C. Pandey, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 787 (1973).
- [28] J. C. Phillips and L. Kleinman, *Phys. Rev.* **116**, 287 (1959).
- [29] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie) 2006.
- [30] N. W. Ashcroft, *Phys. Lett.* **23**, 48 (1966).
- [31] <http://www.physique-quantique.wikibis.com/pseudo-potentiel.php>
- [32] J. Chelikowsky and M. L. Cohen *Phys. Rev. B* **14**, 556 (1976).
- [33] N. Y. Aouina, mémoire de magister, Université de M'sila, (Algérie) 2003.
- [34] N. Bouras, mémoire de master, Université de Tébessa, (Algérie) 2022.
- [35] M. A. Monir, thèse de doctorat, Université de Mascara (Algérie) 2016.



## *Chapitre II*

### *Les liaisons cristallines*

## Chapitre II

*Liaisons cristallines***II-1- Introduction :**

Nous avons trois états différents dans lesquels la matière peut exister : l'état gazeux, l'état liquide et l'état solide. Les interactions entre les particules qui composent une substance déterminent la forme de la substance.

Les liquides et les gaz se déforment facilement tandis que les solides nécessitent une grande force pour leur déformation.

Les solides peuvent exister sous deux états différents :

- l'état désordonné caractérisé par une structure non ordonnée c'est le cas des systèmes amorphes, par exemple les verres.
- l'état ordonné caractérisé par une structure ordonnée correspond aux solides cristallins [1].

**II-2- Structure de la matière :**

**II-2-1-Définition :** En minéralogie, le terme structure de la matière fait référence à l'arrangement unique des atomes dans une substance elle-même. Il consiste en un groupe d'atomes disposés d'une certaine manière dans le réseau, formant ce qu'on appelle des cellules qui peuvent être aléatoires ou cristallines, c'est-à-dire un problème de formes géométrique bien connu, et renvoient cette différence aux liaisons entre les atomes [2].

**II-2-2-Type de la structure :**

Il existe deux types de base dans la structure de la matière

**II-2-2-a-Structure amorphe :**

Les matériaux amorphes ont des structures atomiques ou moléculaires relativement complexes et difficiles à les classer. Ils sont généralement préparés par refroidissement rapide du matériau fondu (re-refroidissement). La distribution des atomes ne présente aucun ordre défini qui ne concerne qu'un nombre fini d'atomes. C'est donc un arrangement aléatoire des atomes, de l'ordre de quelques dizaines d'Angströms [3].

La structure d'un solide amorphe se forme lorsqu'un liquide visqueux est rapidement refroidi, exsudant ainsi rapidement une structure solide avant que les molécules n'aient le temps de s'orienter de manière ordonnée. Ces matériaux sont appelés solides amorphes ou solides vitreux. Les solides amorphes se caractérisent par l'absence de point de fusion aigu. Un exemple typique d'un solide de ce type est le verre, qui est obtenu par solidification de silice fondue. De nombreux polymères à l'état solide conduisent à la formation de solides amorphes [4].

**II-2-2-b- Structure cristalline :**

Les atomes d'un solide cristallin sont disposés les uns par rapport aux autres dans une position géométrique régulière. Ces atomes se répètent périodiquement dans l'espace sous l'action des opérations de symétrie du groupe d'espace et forment ainsi la structure cristalline. Il est possible de déterminer expérimentalement la position des atomes, ions ou molécule dans un solide cristallin en dirigeant des rayons X sur le cristal. Les électrons de la matière qui reçoivent ces ondes électromagnétiques émettent une autre fois des ondes et le signal reçu par l'observateur contient des informations exploitables qui permettent de déterminer la position des atomes dans le solide [4].

**II-2-3-Systèmes cristallins:** il existe sept (07) systèmes cristallins :

- ✓ Système cristallin cubique.
- ✓ Système à quatre cristaux.
- ✓ Système de cristal hexagonal.
- ✓ Système triple cristal.
- ✓ Système cristallin rhombique droit.
- ✓ Système cristallin monoclinique.
- ✓ Système cristallin triclinique.

**II-3- Liaisons cristallines:**

Une liaison cristalline est une interaction permanente entre des atomes, des ions ou des molécules. Où les électrons chargés négativement sont attirés autour d'un noyau composé de protons chargés positivement. Les deux corps s'attirent à cause de la force électrostatique qui agit entre les électrons et les protons. C'est cette attraction qui forme la liaison cristalline [5].

Il faut se tourner vers la structure électronique, pour savoir comment les atomes se combinent entre eux et pourquoi leur nombre est limité dans une molécule ou un ion poly-atomique. L'attraction que certains atomes exercent sur les électrons de leurs voisins. Si l'attraction est forte, les électrons quittent leurs atomes d'origine et viennent compléter les couches des atomes récepteurs ; mais si cette attraction n'est pas très forte, alors les électrons sont partagés par les atomes sous forme de liaisons cristallines. C'est l'électronégativité d'un élément qui indique la force qu'il exerce sur les électrons. En général, les atomes captent, cèdent ou partagent des électrons afin d'acquérir la structure électronique stable des atomes des gaz rares les plus rapprochés dans le tableau périodique [6].

## II-4-Types de liaisons cristallines

La différence entre les structures cristallines et de leur composition dépend de plusieurs facteurs, dont plus importantes sont les liaisons cristallines qui aident à former une structure et à maintenir sa solidité.

Les liaisons cristallines peuvent être divisées en deux types de base:

### II-4-1- Liaisons fortes

C'est un type de liaison également appelé liaison intramoléculaire, dépend de la différence d'électronégativité, plus l'attraction d'un électron vers l'atome est grande et plus la liaison à un caractère ionique. On peut dire que, si l'électronégativité est faible la liaison est covalente [7].

Pour briser les liaisons fortes, il faut fournir des énergies de dissociation de l'ordre de 200 à 500 kJ par mole de liaison diatomique (soit environ 50 à 100 kcal par mole; ou environ 2 à 5 eV par liaison) [8].

#### II-4-1-1- Liaisons covalentes :

Une liaison covalente est une liaison cristalline dans laquelle deux atome se partagent deux électrons en plus de leurs couches externes afin de former un doublet (triplet ou quadruplet) d'électrons liant les forces qui produisent l'attraction mutuelle entre atomes.

La liaison covalente double implique généralement le partage équitable d'une seule paire d'électrons de chaque atome, appelé simple liaison. Chaque atome fournissant un électron, la paire d'électrons est délocalisée entre les deux atomes. Le partage deux, trois paires ou quatre paires d'électrons s'appelle respectivement liaison double, triple ou quadruple [9].

Type des liaisons covalentes en termes de polarité :

#### II-4-1-1-a-Liaison covalente pure

Ce type de liaison se forme lorsque la taille des deux atomes est proche, et lorsque les valeurs d'électronégativité sont également proches, et elle se forme entre des atomes identiques que Cl-Cl, et ce type de liaison est très fort [10].

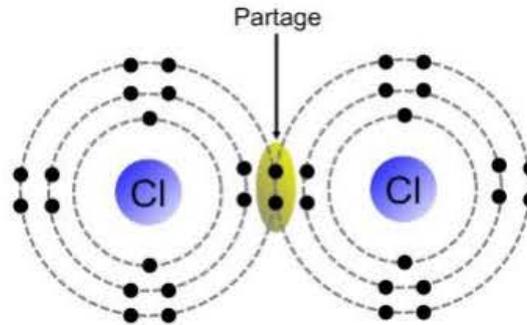
#### II-4-1-1-b- Liaison covalente polaire:

C'est une liaison qui naît entre deux atomes dont les valeurs d'électronégativités différentes participent à des liaisons covalentes, et parmi les composés dans lesquels la liaison covalente polaire est présente se trouve la molécule de chlorure d'hydrogène HCl et les molécules d'eau H<sub>2</sub>O et le fluorure d'hydrogène HF [10]. Cette liaison est caractérisée par les propriétés physiques suivantes [11]:

- Les électrons sont localisés sur les bras de liaison entre atomes.
- Cette liaison impose une géométrie, avec des angles précis.

- La structure est ouverte

Exemple : le  $\text{Cl}_2$



*Figure II-1: Liaison cristalline type covalente [12].*

#### II-4-1-2- Liaisons ioniques :

Dans les liaisons ioniques il y a transfert d'électrons entre atomes d'où formation d'anions et de cations. On obtient la construction d'un solide régulier et ordonné ou cristal en raison d'un équilibre entre les forces attractives entre ions de signes opposés et les forces répulsives de non interpénétration des cortèges électroniques. Elle n'est pas dirigée ; c'est une liaison très forte correspondant à des températures de fusion élevés. Les solides ioniques purs dissolvent dans des solvants polaires à forte constante diélectrique sous forme d'ions séparés qui se solvates. Elle est considérée comme la limite de la liaison covalente entre deux atomes différents: certaines molécules sont à la fois ioniques et covalente [13].

La liaison ionique se rencontre entre des éléments chimiques ayant une différence d'électronégativité importante. Un atome possède une valeur de X (une grandeur qui représente l'aptitude d'un élément à attirer vers lui les électrons de la liaison cristalline) élevée et l'autre très faible. Il y a ionisation plus ou moins totale de la liaison. Dans ce cas les interactions sont purement électrostatiques, les ions de charges opposées ont tendance à être liés par l'attraction [14]

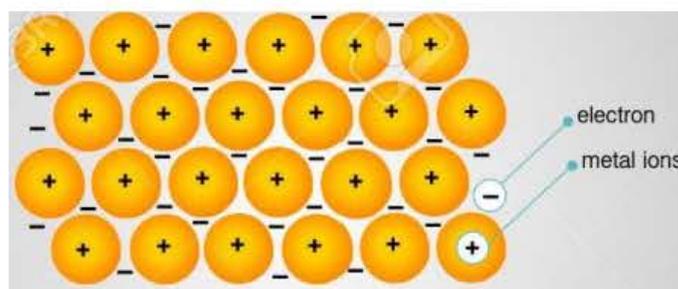
La liaison ionique est caractérisée par les propriétés physiques suivantes [11]:

- Les ions mis en jeu ont des charges contraires.
- Les électrons sont serrés autour de ces ions.
- C'est une liaison non dirigée.
- Donne lieu à des structures compactes mais qui doivent respecter.
- L'alternance spatiale des signes des ions.

### II-4-1-3- Liasons métalliques :

Une liaison métallique est une liaison cristalline résultant de l'action d'un fluide d'électrons délocalisés unissant des atomes ionisés positivement. Les matériaux métalliques purs ou alliés sont caractérisés par un continuum de niveaux d'énergie entre la bande de valence, et la bande de conduction, occupé par les électrons libres, de sorte que ces derniers sont injectés thermiquement depuis la bande de valence par-delà le niveau de Fermi, assurant la formation d'une liaison métallique délocalisée dans tout le volume du métal [15].

La force d'une liaison métallique dépend notamment du nombre d'électrons libres par atome métallique. Elle est la plus élevée parmi les métaux de transition : cette liaison subsiste dans un métal liquide, alors que les autres liaisons interatomiques sont rompues, de sorte que la température d'ébullition d'un métal est un meilleur indicateur de la force de sa liaison métallique que sa température de fusion [15].



*Figure II-2: Liaison cristalline type métallique [16].*

### II-4-2- Liasons faibles

Les liaisons physiques sont des interactions qui ont lieu pour des distances plus élevées que les liaisons cristallines. Pour la plupart d'entre elles, elles ont une intensité moindre que les liaisons cristallines, mais leur portée est bien plus grande [17]. Ces liaisons sont dues à des forces de cohésion qui s'exercent entre atomes incapables de former des liaisons de valence ou entre molécules où les possibilités de liaisons fortes sont déjà saturées [8].

#### II-4-2-1- Liasons hydrogènes :

Les liaisons hydrogène sont en fait des interactions électrostatique de type Dipôle permanent/dipôle induit [18]. L'énergie totale d'une liaison hydrogène est en fait décomposée en plusieurs contributions de nature différente : électrostatique, polarisation, transfert de charge, dispersion, .... [19], mais est dominée par sa contribution électrostatique à longue distance. Ainsi, un atome d'hydrogène porté par un atome fortement électronégatif va porter une fraction de charge positive qui polarisera fortement une autre molécule possédant un doublet non liant. L'interaction

forte entre le dipôle permanent et le dipôle induit entraînera leur alignement et une grande proximité des atomes considérés par rapport aux interactions typiques de Van der Waals. La liaison hydrogène est donc fortement dirigée et d'énergie supérieure aux liaisons de Van der Waals. Néanmoins toutes les liaisons hydrogène ne présentent pas les mêmes caractéristiques. Nous distinguons en général trois types de liaisons hydrogène (faible, modérée et forte) [20].

#### II-4-2-2- Liaisons de Van der Waals :

Les forces de Van der Waals sont des interactions électriques de faible intensité. Pouvant exister entre des atomes ou des molécules. Les forces de Van der Waals peuvent être classées selon leur origine: Les forces de Keesom, ou effet d'orientation, sont des interactions résultant d'une interaction intermoléculaire entre deux dipôles permanents. Elles trouvent leur origine dans la différence d'électronégativité entre deux atomes au sein d'une molécule, et donc à la dissymétrie permanente de répartition de la charge électrique dans une molécule pouvant être électriquement neutre. Ce type d'interaction représente une part importante des interactions de Van der Waals dans le cas de molécules polaires. Les forces de Debye, ou effet d'induction, résultent de l'interaction entre dipôle permanent et un dipôle induit. Une molécule polaire est en effet capable d'induire un dipôle dans une molécule non polaire mais polarisable, ou dans une autre molécule polaire. Les forces de London, ou effet de dispersion, se manifestent entre tout type de molécules, mais sont les seules existant entre des molécules ne présentant pas de moment dipolaire permanent. Bien que leur moment dipolaire soit nul en moyenne, les fluctuations de leur densité électrique engendrent des dipôles instantanés non nuls qui induisent des dipôles dans les molécules voisines [21].

La liaison Van der Waals caractérisé par les prospérités suivantes

- Toujours potentiellement présente.
- C'est la seule liaison possible pour les gaz rares ( $N=8$ ).
- C'est une liaison non dirigée. Donne lieu à des structures compactes [15].

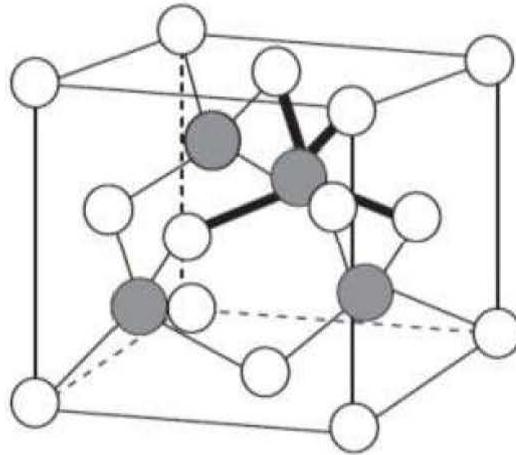
#### II-4-2-3- Liaisons moléculaires :

Comme leur nom l'indique, sont bâtis sur une unité de base qui n'est plus l'atome mais la molécule, les forces de liaison sont à l'intérieur de la molécule mais du type Van der Waals entre molécules et par conséquent faibles. Ces matériaux sont peu résistants et fondent à basse température [22].

#### II -5- Structure Zinc- blende :

C'est une structure cubique qui comporte deux réseaux cubiques à faces centrées décalées l'une par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale du cube, donc la structure Zinc-blende du groupe II-VI est obtenue en remplaçant les deux atomes identiques dans la maille unitaire d'une structure

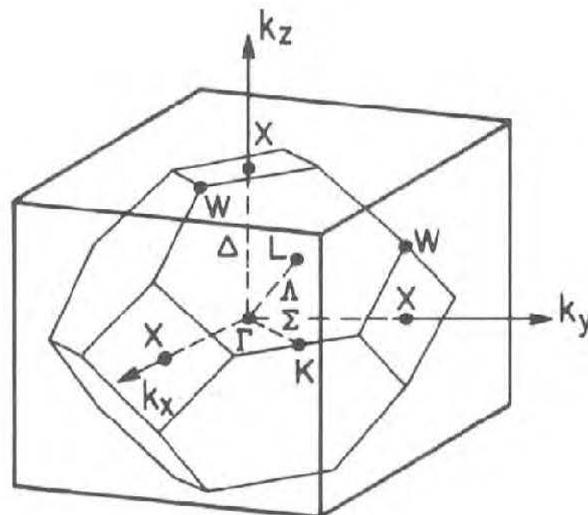
diamant par deux atomes différents, l'un appartenant au groupe II et l'autre au groupe VI [23]; comme indique dans la (figure II-3). Ces atomes occupent des positions bien déterminées, définies par les coordonnées suivantes: Quatre atomes du groupe II dans les positions:  $(0, 0, 0)$ ;  $(0, 1/2, 1/2)$ ;  $(1/2, 0, 1/2)$ ;  $(1/2, 1/2, 0)$ . Quatre atomes du groupe VI dans les positions:  $(1/4, 1/4, 1/4)$ ;  $(1/4, 3/4, 3/4)$ ;  $(3/4, 1/4, 3/4)$ ;  $(3/4, 3/4, 1/4)$ . On note que la structure zinc-blende présente un taux de compacité de l'ordre de 0.34: c'est le taux de remplissage. Elle est donc considérée comme une structure ouverte : d'où la possibilité d'insertion d'atomes légers [24].



*Figure II-3: Structure cubique Zinc blende (Sphalérite) [25].*

#### II-6- Première zone de Brillouin :

La première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre tronqué (figure II-4).



*Figure II-4: Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries [26].*

**II-6-1- Points de haute symétrie :**

$\Gamma$  : Ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées  $k_{\Gamma}(0,0,0)$ .

$X$  : Ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'un des axes  $k_x, k_y$  ou  $k_z$  avec l'une des faces carrées. Nous avons donc :

$$k_x = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, 0, 0)$$

$$k_y = \frac{2\pi}{a}(0, \pm 1, 0)$$

$$k_z = \frac{2\pi}{a}(0, 0, \pm 1)$$

$L$  : ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont

$$\text{Les coordonnées sont: } k_L = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1)$$

$W$  : ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées.

$$\text{Les coordonnées sont : } k_W = \frac{2\pi}{a}\left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$$

$Z$  : ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre avec les coordonnées :  $k_Z = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{1}{2}, \pm 1\right)$

**II -6-2- Lignes de haute symétrie :**

$\Delta$  : Cette ligne représente la direction  $\langle 100 \rangle$ . Elle relie le centre  $\Gamma$  au point  $X$ .

$\Sigma$  : C'est un point appartenant au plan de symétrie  $k_x = k_y$  ou  $k_y = k_z$  ou  $k_x = k_z$ .

$\Lambda$  : Cette ligne est la direction  $\langle 100 \rangle$ . Elle relie le centre de la zone ( $\Gamma$ ) au centre d'une face hexagonale qui est le point  $L$  de l'octaèdre [26].

**Références :**

- [1] A. Belfar, Cours et Exercices de Cristallographie, Université d'Oran-Mohamed Boudiaf, (Algérie), 2015.
- [2] <https://ar.m.wikipedia.org/wiki/>
- [3] J. L. Teyssire, H. Brunet, introduction à la physique des matériaux conducteur et semi-conducteur, Ed. Dunod, Paris, 1992.
- [4] B. Fosset, J.-B. Baudin, F. Lahitète, chimie tout-en-un, Dounod, (Paris), 2013.
- [5] Linus Pauling, the nature of the Chemical Bond, Cornell University Press, 1960.
- [6] J. Stratton, S. Madras, J. Gravel, G.Hall. Éléments de chimie moderne, (1981).
- [7] K. Kouachi, Cours de chimie avec exercices, Université de Béjaia - Abderahmane Mira, (Algérie), 2001.
- [8] M. Guymont, Structure de la matière, Ed. Belin, 2003.
- [9] <https://fr.m.wikipedia.org/wiki/liaison>.
- [10] <https://arabian-chemistry.com>.
- [11] M. Eric, Cours sur la physique des matériaux, 2006.
- [12] C. BOUCHAMENI MENHANE, support de cours, INSTITUT DES SCIENCES VÉTÉRINAIRES, UNIVERSITÉ MENTOURI 1, constantine (Algerie) 2020.
- [13] F. Hlawka, A. Cornet, Propriétés et comportements des matériaux, Ed. Ellipses, 2010.
- [14] N. Laidouï, Cours de Chimie organique, Université d'Oran-Mohamed Boudiaf, (Algérie), 2016.
- [15] <https://fr.m.wikipedia.org/wiki/liaison-métallique>.
- [16] I. Kaabi, support de cours, Département des Sciences de la Terre, Université Ferhat ABBAS - Sétif 1 (Algerie) 2021.
- [17] R. Guillaume, Thèse de doctorat, Université Toulouse, 2010.
- [18] T. Steiner, W. Ange, Chem, **114**, 50 (2002).
- [19] B.T. Holland, L. Abrams, A. Stein, J. Am. Chem. Soc. **121**, 4308 (1999).
- [20] G.A. Jeffrey, Oxford University Press, (USA), 1997.
- [21] A. Bertrand, thèse de doctorat, école doctorale matériaux de Lyon, (France), 2011.
- [22] H. Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, 4<sup>ème</sup> éd. Masson, (Paris), 1998.
- [23] K. Zanon, Semiconductors and Semimetals, R. K. Willardson and C. Beer, Academic Press, (1967).
- [24] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [25] S. Sehaïlia et H. Saadallah, mémoire de master, Université de Larbi Tébessi – Tébessa (Algérie), 2021.
- [26] A. Bechiri, thèse de doctorat, université Mentouri- Constantine (Algérie), 2006.



# *Chapitre III*

## *Résultats et discussion*

## Chapitre III

### Résultats et discussion

#### III-1-Introduction :

La densité électronique est une mesure de la probabilité de trouver un électron dans une région donnée de l'espace, soit autour d'un noyau atomique, soit dans les « voisinages » au sein des structures moléculaires. Plus la concentration d'électrons en un point particulier est élevée, plus la densité électronique est élevée. Par conséquent, elle se distinguera de son environnement et elle présentera certaines propriétés qui expliquent la réaction chimique [1].

La méthode la plus simple qui donne des résultats les plus cohérents avec l'expérience, c'est la méthode du pseudopotentiel empirique.

Le pseudo-potentiel empirique est défini comme étant la superposition des pseudo-potentiels atomiques de la forme :

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) + V_{NL}(\mathbf{r}) \quad (\text{III-1})$$

Où

$V_L(\mathbf{r})$  et  $V_{NL}(\mathbf{r})$  sont respectivement les parties locale et non locale.

Dans notre cas nous n'avons considéré que la partie locale.

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) = \sum_G v(G)S(G)\exp(iGr) \quad (\text{III-2})$$

Où

$S(G)$  est le facteur de structure et  $V(G)$  sont les paramètres du pseudo-potentiel ou facteurs de formes. Ces derniers ont été au départ tirés de la littérature, ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [2] dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie défini par :

$$\delta = \left[ \sum_{ij}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m - N} \right]^{1/2} \quad (\text{III-3})$$

Où

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}} \quad (\text{III-4})$$

sont respectivement les énergies observées et calculées entre l'état :

l'état  $i$  avec  $k = k_i$  et l'état  $j$  avec  $k = k_j$ , du  $m^{\text{ème}}$  paire ( $i ; j$ ) et  $N$  est le nombre de paramètres du pseudopotentiel empirique. Les valeurs des facteurs de formes sont modifiées par itération jusqu'à minimiser le  $\delta$ .

Les facteurs de formes symétriques ( $V_s$ ) et antisymétriques ( $V_a$ ) ajustés en (Ryd) ainsi que leurs paramètres du réseau des semi-conducteurs étudiés dans la Phase zinc-blende sont présentés dans le tableau III-1.

**Tableau III-1** : les facteurs de forme symétrique et antisymétrique ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs BeTe et CdTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau en ( $\text{Å}^\circ$ ).

Composés	a( $\text{Å}^\circ$ )	Facteurs de formes (Ryd)					
		$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
BeTe	5.6250	- 0.428823	- 0.021065	0.254048	- 0.221772	0.120	0.259592
CdTe	6.48	- 0.396388	0.198275	0.459548	0.1311	0.28	0.708145

Nous utilisons les paramètres listés dans le tableau III-1 pour calculer la densité de charge que nous considérons comme des outils efficaces pour prédire les liaisons de matériaux.

### III-2- Densité de charge électronique :

Pour décrire l'état du système nous résolvons l'équation de Schrödinger pour résoudre les fonctions d'onde  $\psi(r)$  :

$$H\psi_{n,k}(r) = E\psi_{n,k}(r) \quad (\text{III-5})$$

On peut évaluer la densité de charge électronique dans une certaine région spatiale.

$$\rho(r) = e|\psi(r)|^2 \quad (\text{III-6})$$

Nous obtenons la densité de charge totale dans le cas d'un solide en additionnant tous les k états des n bandes du cristal.

$$\rho(r) = 2e \sum_{n,k} |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad (\text{III-7})$$

La densité de charge correspondante peut être obtenue par sommation dans tous les k instances de cette plage, pour un ensemble donné d'indice n

$$\rho_n(r) = 2e \sum_{n,k} |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad (\text{III-8})$$

La densité de charges, dans ce cas est :

$$\rho(r) = \sum_n \rho_n(r) \quad (\text{III-9})$$

Pour calculer la densité de charge totale, nous devons connaître les fonctions d'onde dans toute la région de Brillouin. Afin de réduire le temps de calcul, de nombreuses méthodes d'approximation ont été développées. A partir de la, les densités de charge de certains semi-conducteurs ont été calculées par J. P. Walter et *al.* [3]. Ils ont pu utiliser un modèle de coordonnées à 360 points pour calculer la densité de charge

$$1/16(2s+1, 2m+1, 2n+1)$$

Unités de  $2\pi/a$

Où : s, m, n : sont des entiers.

Baldereschi a utilisé [4] les mêmes fonctions d'onde pour calculer la densité de charges des bandes de valence du Ge le long de la direction de la liaison, en utilisant la technique du point moyen. Il atteint presque les mêmes résultats obtenus par J. P. Walter et *al.* avec une différence de 10%. Pour la structure zinc-blende, ce point moyen contient les coordonnées suivant :

$$2\pi/a(0.6223, 0.239, 0.0)$$

Chadi et Cohen ont développé le modèle des points spéciaux [5], ils sont arrivés à calculer la densité de charges totale avec deux points seulement. Des résultats similaires ont été obtenus en utilisant les points de Chadi et Cohen et le point de Baldereschi pour le calcul de la densité de charges totale des composés binaires [6].

Ces derniers calculs sont de 1% différents de ceux utilisant un schéma de 71 points.

Les points spéciaux de Chadi et Cohen ont les coordonnées suivantes :

$$\frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \quad \frac{2\pi}{a}\left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$$

### III- 3- Densité de charge pour chaque bande de valence au point $\Gamma$ :

Les fonctions d'onde telles qu'elles ont été obtenues à partir du calcul de la structure de bande électronique. Densité de charge pour chaque bande de valence peut s'écrire :

$$\rho_n(r) = e \sum_k |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad (\text{III-10})$$

Avec :

$$K = \frac{2\pi}{a}(0,0,0) \text{ représente le point de haute symétrie } \Gamma \text{ (a est la constante de réseau) et n est le}$$

numéro de la bande de valence.

**III-3-1- Première bande de valence :**

Les figures III-1 et III-2 présentent la densité de charge électronique dans la première bande de valence suivant la direction [111] et dans le plan (110) ou point  $\Gamma$  des deux composés CdTe et BeTe.

On peut noter que la distribution de la densité de charge est localisée au site anionique Te par rapport au site cationique Cd (figures III-1). Le déplacement du maximum de la densité de charges vers le côté de l'anion est dû à une différence de potentiel du cation et de l'anion dans le cas du composé binaire CdTe, ainsi le transfert important de charge du cation, vers l'anion indique que l'anion possède un potentiel plus fort que celui du cation. Cette différence de potentiel est responsable du caractère de l'ionicté présent dans la liaison du composé CdTe. La densité de charge aux sites interstitiels n'est pas importante côté anionique Te et aucune charge côté cationique (figures III-1).

Pour la figure III-2 la densité de charge est asymétrique autour du centre de la liaison pour le composé binaire BeTe et que la plus part de la densité est localisée au site anionique Te par rapport au site cationique Be, ainsi la densité de charge dans les sites interstitiels est faible côté anionique Te.

On peut dire que le composé CdTe est plus ionique que BeTe.

**III-3-2- Deuxième bande de valence :**

Les figures III-3 et III-4 présentent la densité de charge électronique dans la deuxième bande de valence suivant la direction [111] et dans le plan (110) ou point  $\Gamma$  des deux composés CdTe et BeTe structure zinc-blende.

Dans la deuxième bande de valence la distribution de la densité de charge est asymétrique autour du centre de la liaison pour les deux composés binaires. Et que la plus part de la densité est localisée au site anionique Te par rapport au site cationique (Be, Cd). Mais la densité de charge du composé binaire CdTe est plus importante que celle du composé binaire BeTe qui est faible. La densité de charge électronique dans les sites interstitiels est nulle.

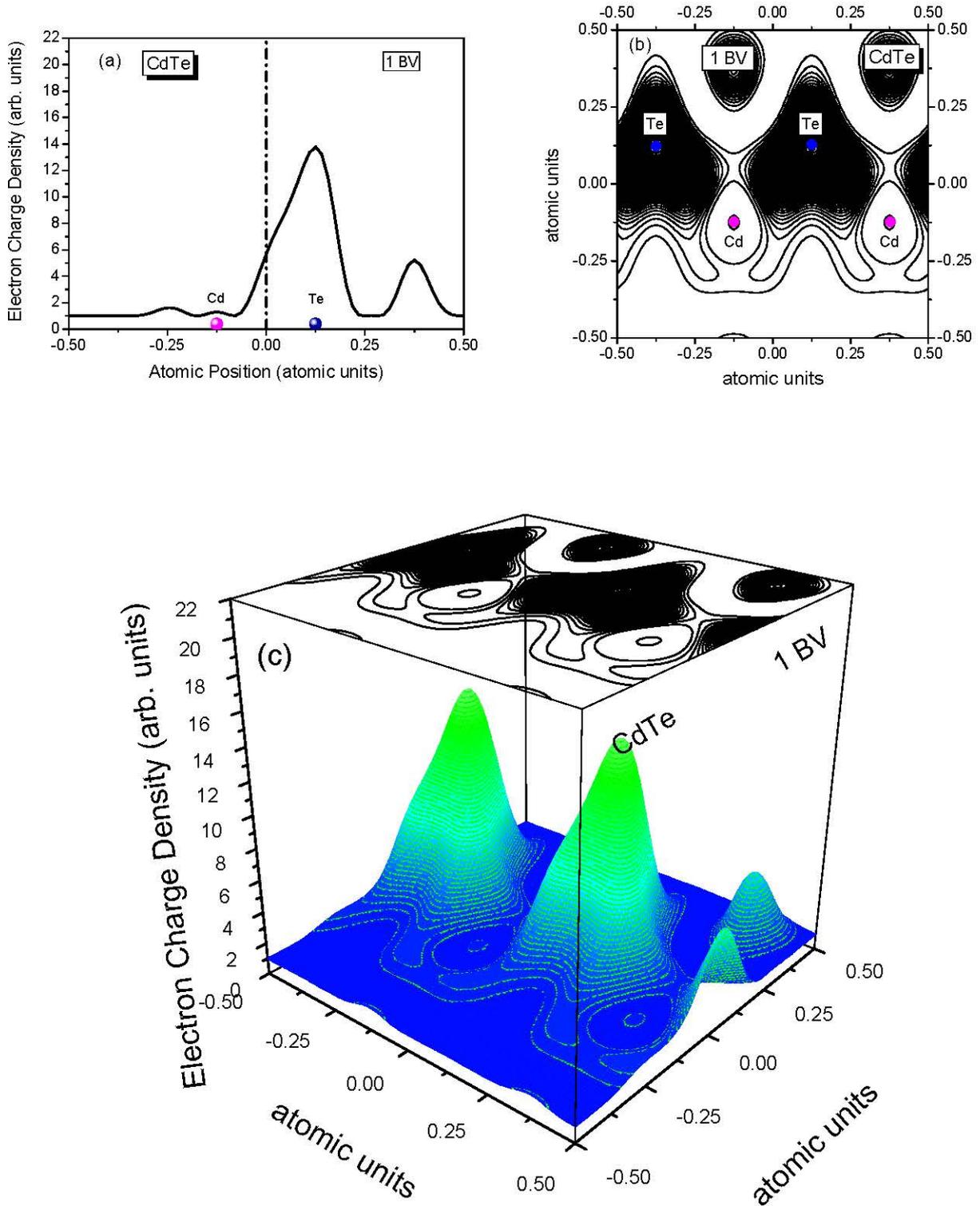
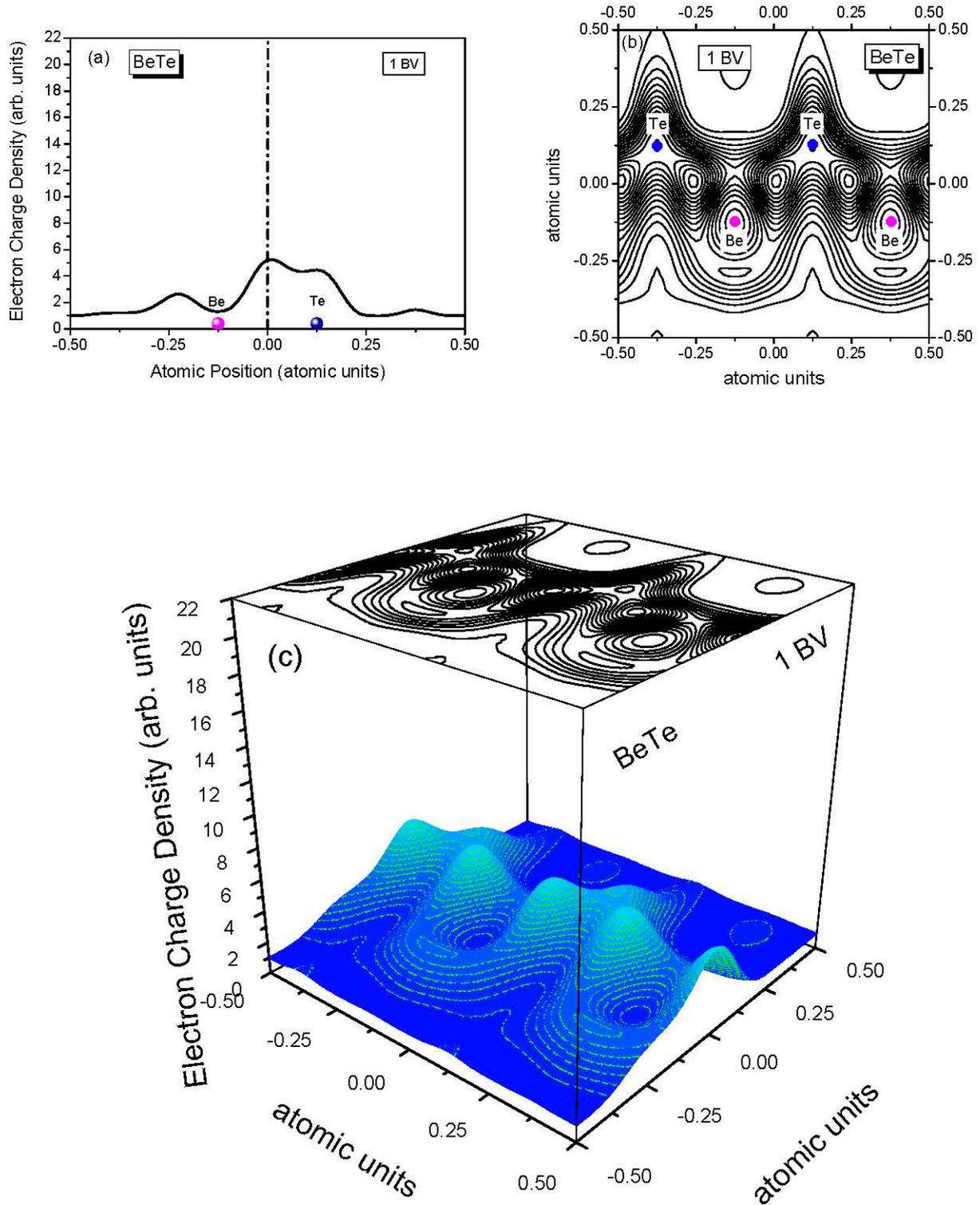
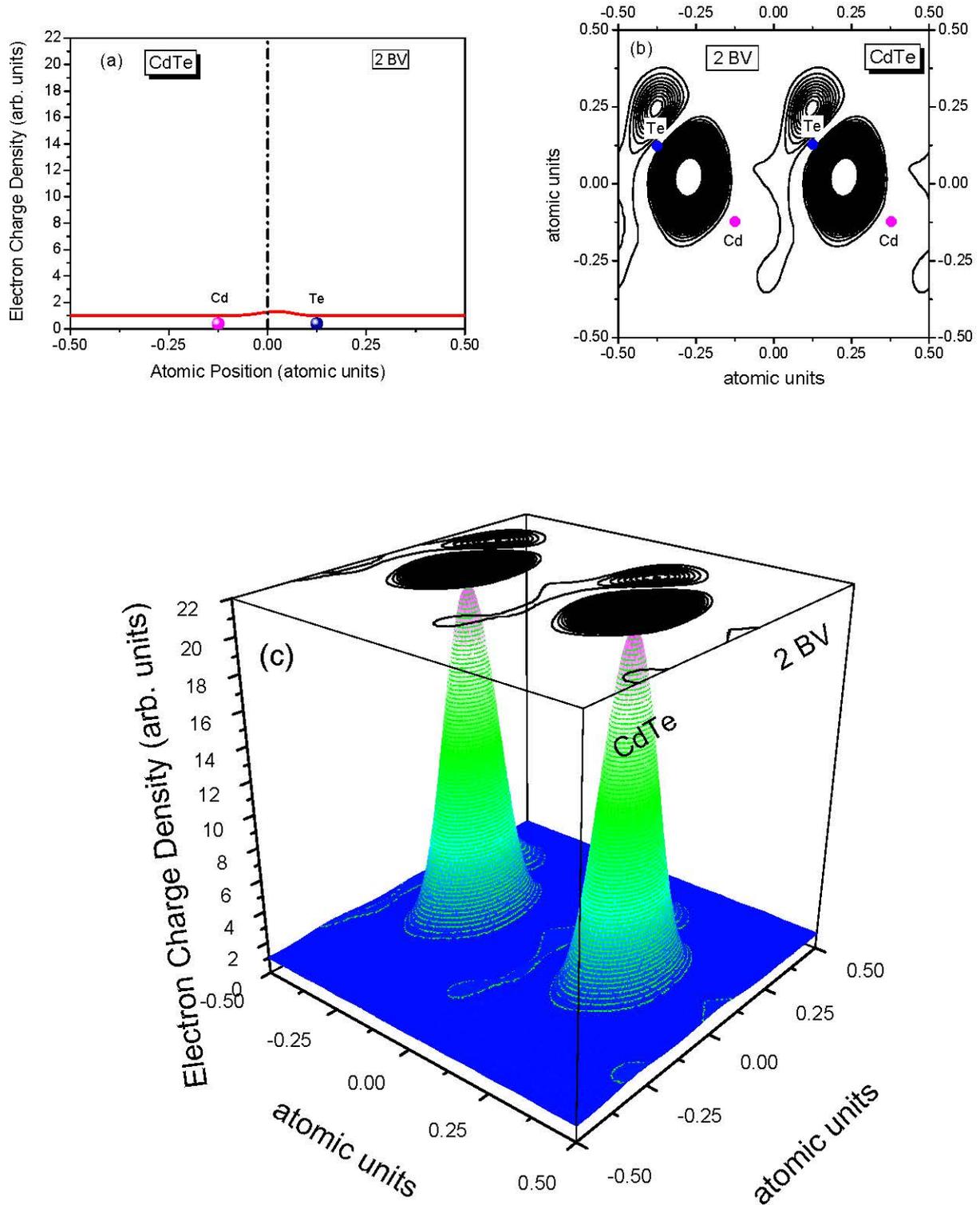


Figure III-1 : Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point  $\Gamma$  du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.



**Figure III-2 :** Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point  $\Gamma$  du composé BeTe (a) profil suivant la direction  $[111]$ , (b) contour dans le plan  $(110)$  et (c) 3D.



**Figure III-3 :** Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point  $\Gamma$  du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.

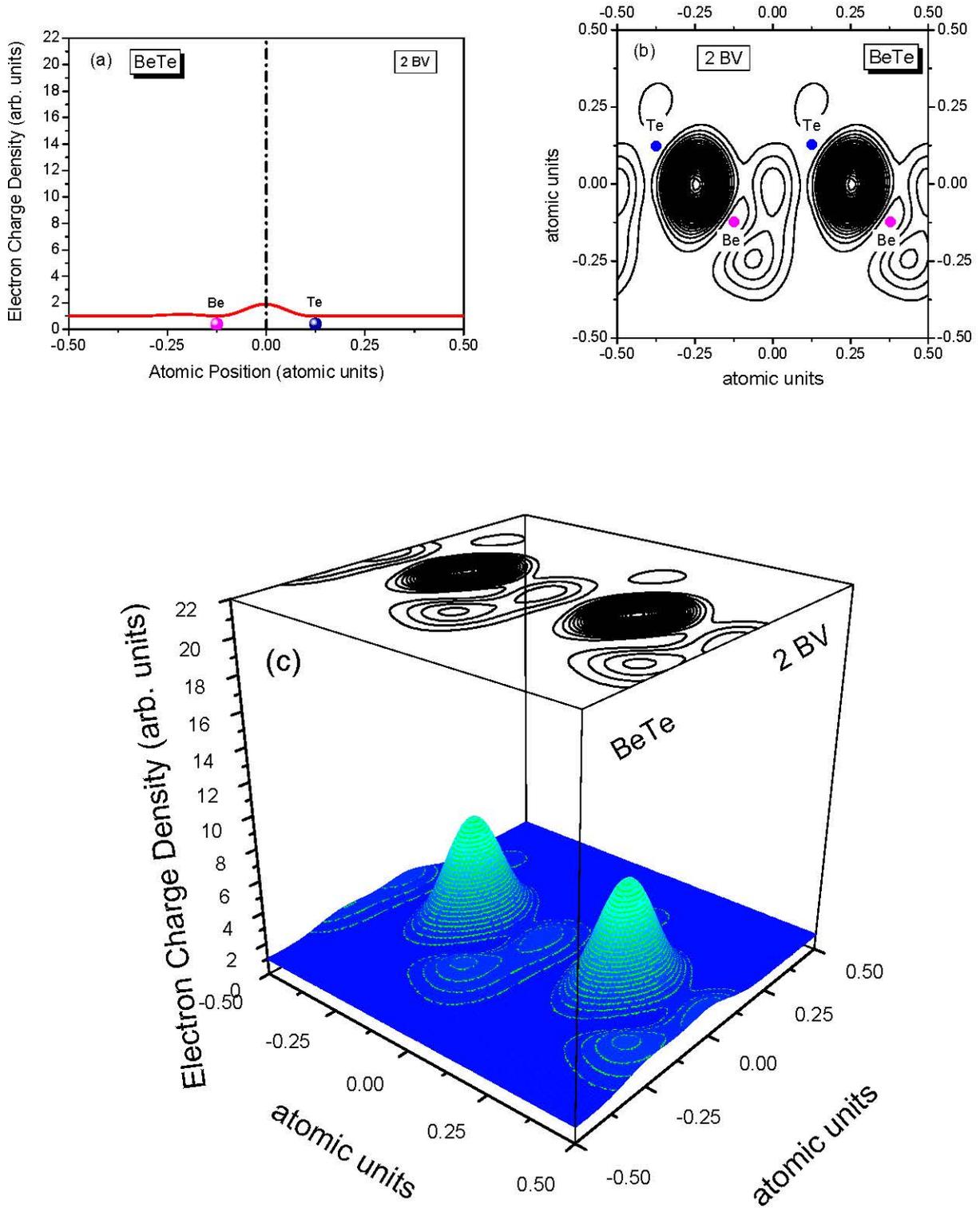


Figure III-4 : Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point  $\Gamma$  du composé BeTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.

**III-3-3- Troisième bande de valence :**

Les figures III-5 et III-6 présentent la densité de charge électronique de la troisième bande de valence suivant la direction [111] et dans le plan (110) au point  $\Gamma$  des deux composés CdTe et BeTe.

On remarque que la distribution de la densité de charge est localisée au centre de la liaison et que la plus part de la densité est décalée vers le site anionique Te par rapport au site cationique (Be, Cd) ; mais la densité de charge du composé binaire BeTe est plus importante par rapport à celle du composé binaire CdTe.

**III-3-4- Quatrième bande de valence :**

Les figures III-7 et III-8 présentent la densité de charge électronique dans la quatrième bande de valence selon les directions [111] et dans le plan (110) ou point  $\Gamma$  des deux composés CdTe et BeTe.

Presque la même constatation a été faite pour les deux figures et que la distribution de la densité de charge est localisée au centre de la liaison et que la plus part de la densité est décalée vers le site anionique Te par rapport au site cationique (Be, Cd) ; mais la densité de charge du composé binaire CdTe est plus importante par rapport à celle du composé binaire BeTe.

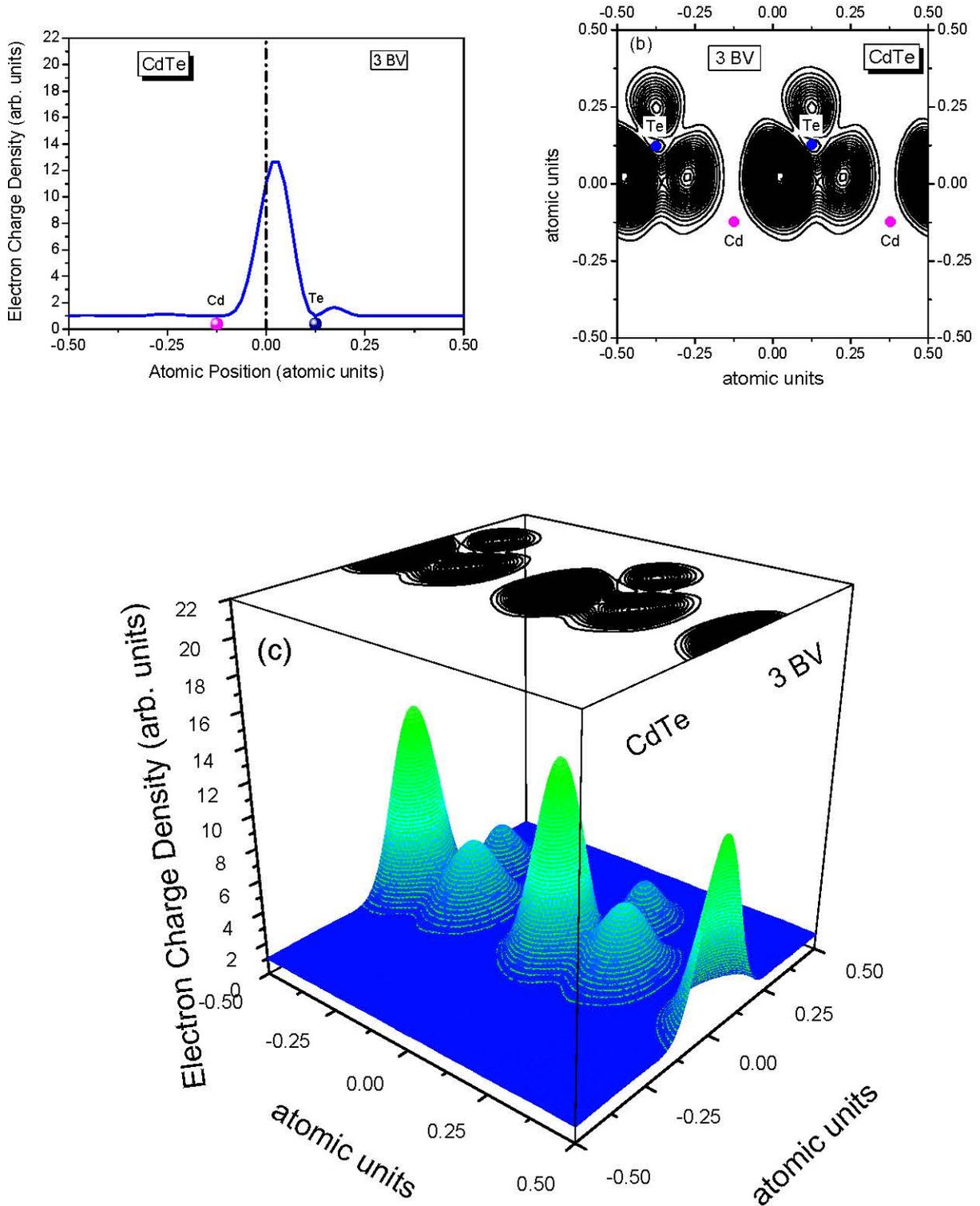


Figure III-5 : Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point  $\Gamma$  du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.

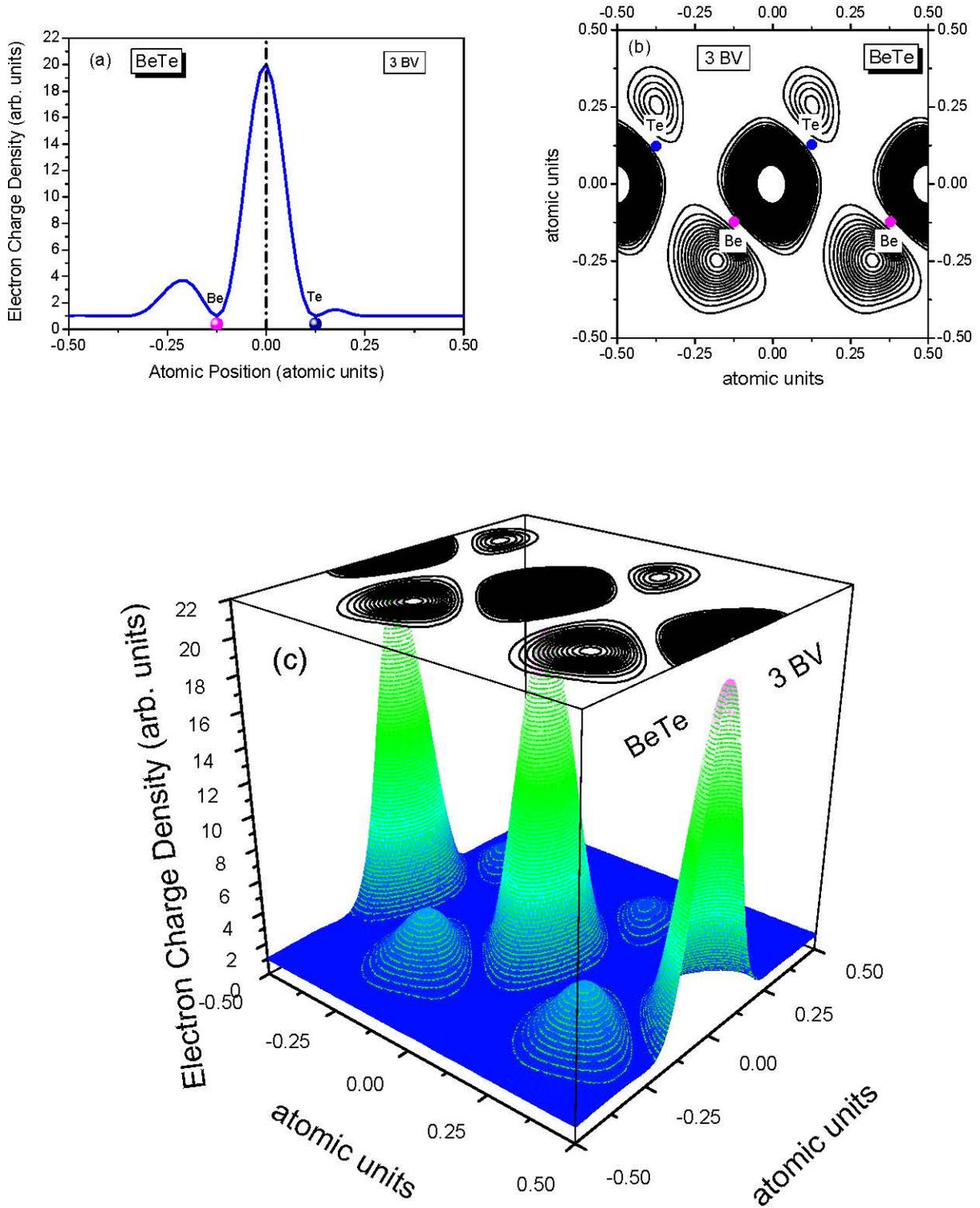


Figure III-6 : Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point  $\Gamma$  du composé BeTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.

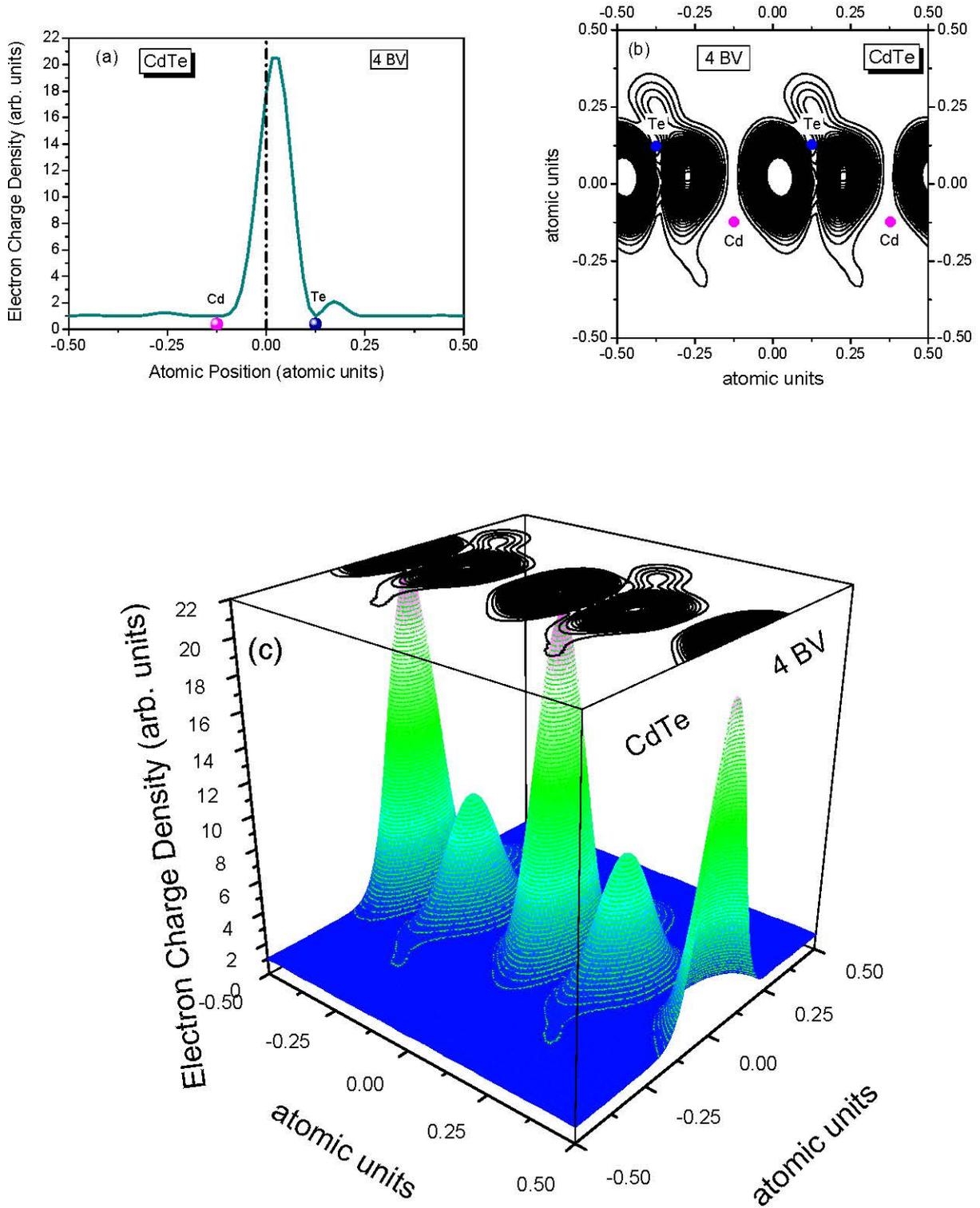


Figure III-7 : Densité de charges électroniques de la quatrième bandes de valence au point  $\Gamma$  du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.

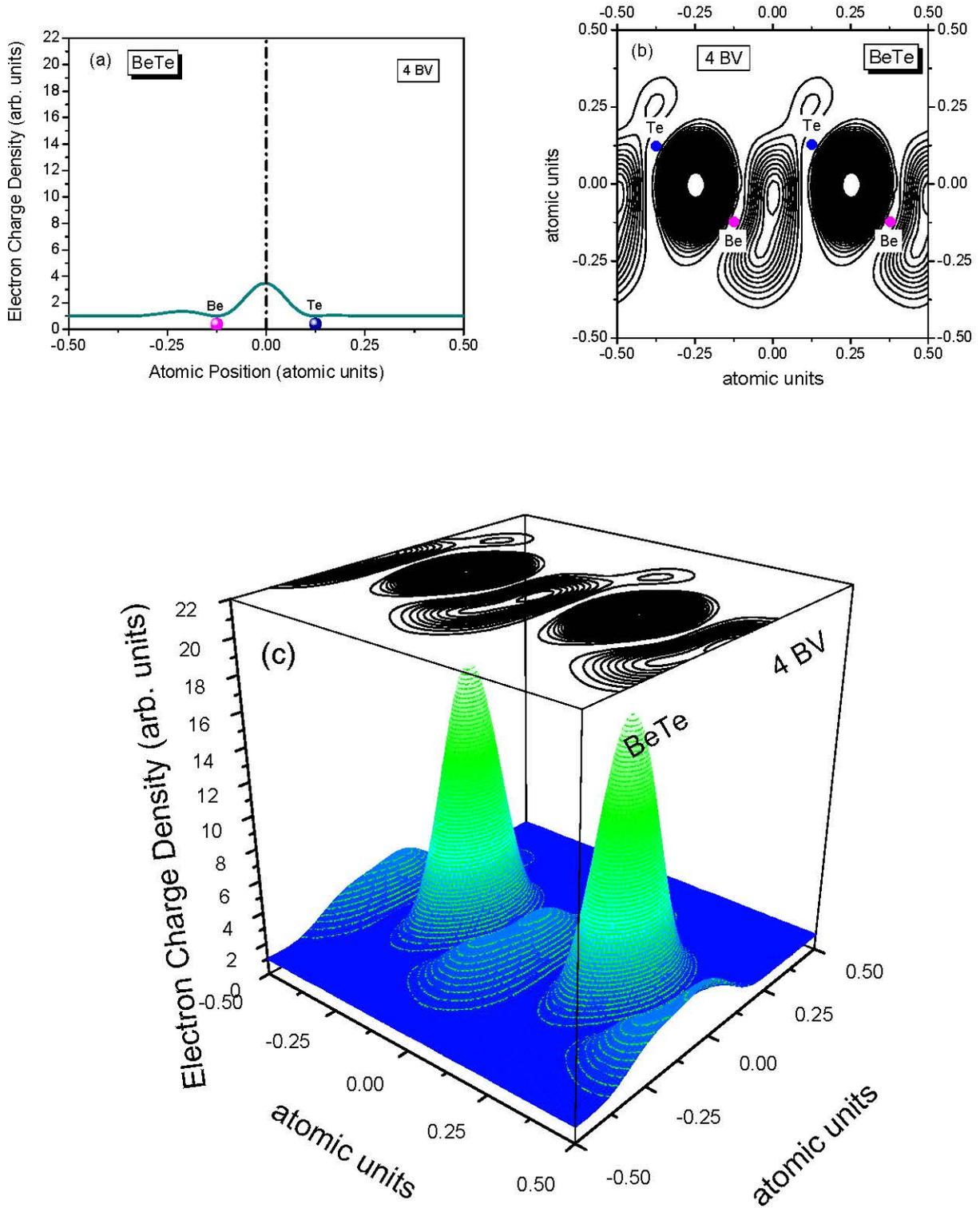


Figure III-8 : Densité de charges électroniques de la quatrième bande de valence au point  $\Gamma$  du composé BeTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D

**III-4- Somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  des composés binaires :**

La sommation est sur tous les états dans la zone de Brillouin pour une bande donnée  $n$ . Dans ce travail, nous sommes intéressés seulement par un point de haute symétrie  $\Gamma$  dans la zone de Brillouin pour la bande considérée.

Dans les figures III-9 et III-10 nous montrons la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  calculée suivant la direction [111] et dans le plan (110) pour les composés binaires CdTe et BeTe :

On remarque que les densités de charge des composés sont quasiment différentes. Le composé CdTe (figures III-9) se caractérise par un maximum de charges légèrement décalées vers le côté anionique (Te). Le transfert de charge est important du cation vers l'anion indique que l'anion (Te) a un potentiel plus fort que le cation (Cd). Cela indique la présence de liaisons mixtes ionique et covalente pour le composé CdTe.

Cependant, la densité de charge électronique est presque symétrique autour du centre de liaison du composé binaire BeTe (figures III-10). La Présence de la densité de charge au milieu des deux sites atomiques (Be et Te) indique la liaison covalente est plus prononcée que la liaison ionique pour le composé BeTe.

En remarque aussi, qu'il y a une quantité de charge électronique dans les régions interstitielles anioniques (Te) dans le composé CdTe. Par contre, il y a une légère densité de charge dans les régions interstitielles cationiques (Be) dans le composé BeTe.

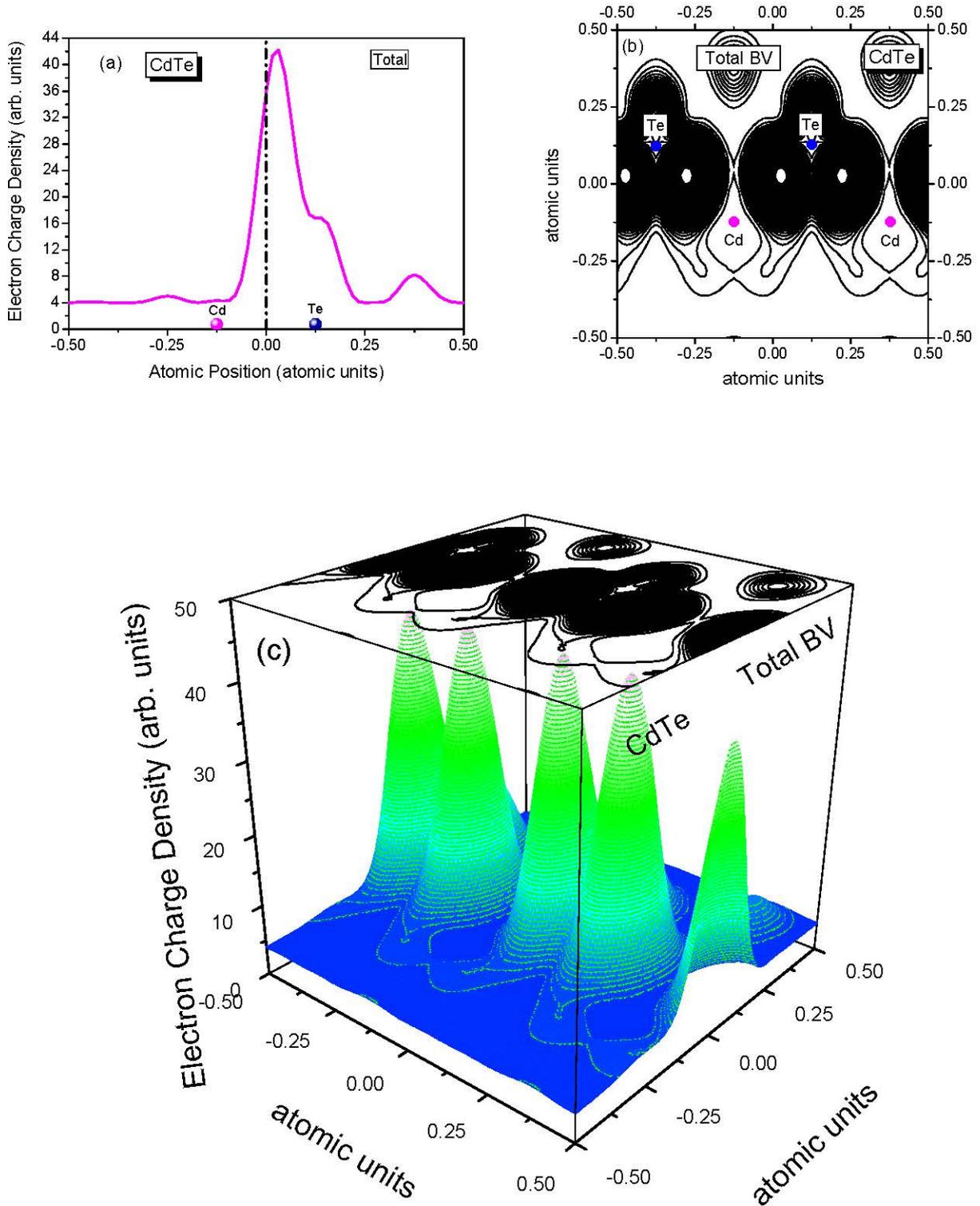


Figure III-9 : Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  du composé CdTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.

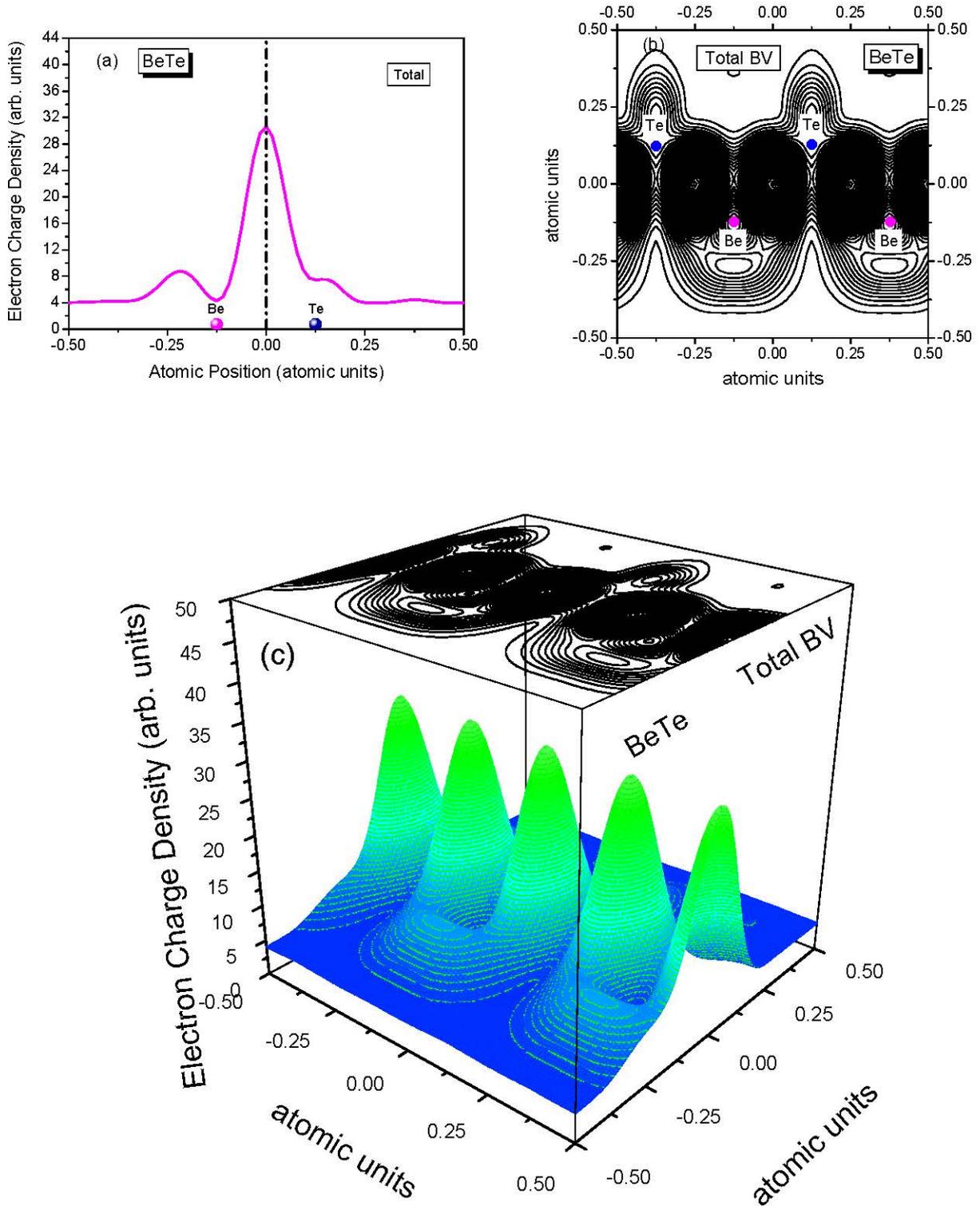


Figure III-10: Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  du composé BeTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110) et (c) 3D.

### III-5-Profil des quatre bandes de valence et la somme des composés binaires BeTe et CdTe :

Dans la figure 11, le maximum de la densité de charge est localisé du côté anionique pour le composé CdTe. Par contre la densité de charge électronique est presque symétrique autour du centre de liaison du composé binaire BeTe. Cette situation est similaire de celle trouvée dans les semi-conducteurs avec la structure du diamant [7-9] où la densité de charge est concentrée à mi-chemin entre les deux atomes [10]. Il y a une faible charge dans les régions interstitielles.

On note que le décalage de la densité de charge vers l'anion (Te) est plus important pour le composé CdTe que pour le composé BeTe. Cela le signifie que le composé CdTe est plus ionique que le composé BeTe; voir l'ionicité établi par les auteurs, Phillips [11], Adachi [12] Christensen [13] Kumar [14] dans le tableau III-2.

Dans les composés CdTe et BeTe seulement la plus basse bande (1<sup>ère</sup> bande de valence) a une grande partie un caractère type S, vu clairement au site de l'anion donnant alors le caractère ionique à cette bande.

Pour le composé CdTe, la 2<sup>ème</sup>, la 3<sup>ème</sup> et la 4<sup>ème</sup> bande de valence ont un caractère type P (la densité de charge est concentrée à mi-chemin entre les deux atomes) donnant alors le caractère covalent à ces bandes.

Même constatation a été faite pour le composé BeTe. Cette remarque concerne la 2<sup>ème</sup>, la 3<sup>ème</sup> et la 4<sup>ème</sup> bande de valence. Mais la contribution de la 3<sup>ème</sup> bande de valence est plus importante que la contribution de la 4<sup>ème</sup> bande de valence pour le composé BeTe. La situation est inversée pour le composé CdTe.

**Tableau III-2 : Les facteurs d'ionicité**

Composés	$f_i$
BeTe	0.169 [11,12]
	0.222 [13]
	0.672 [14]
CdTe	0.717 [11,12]
	0.739 [13]
	0.684 [14]

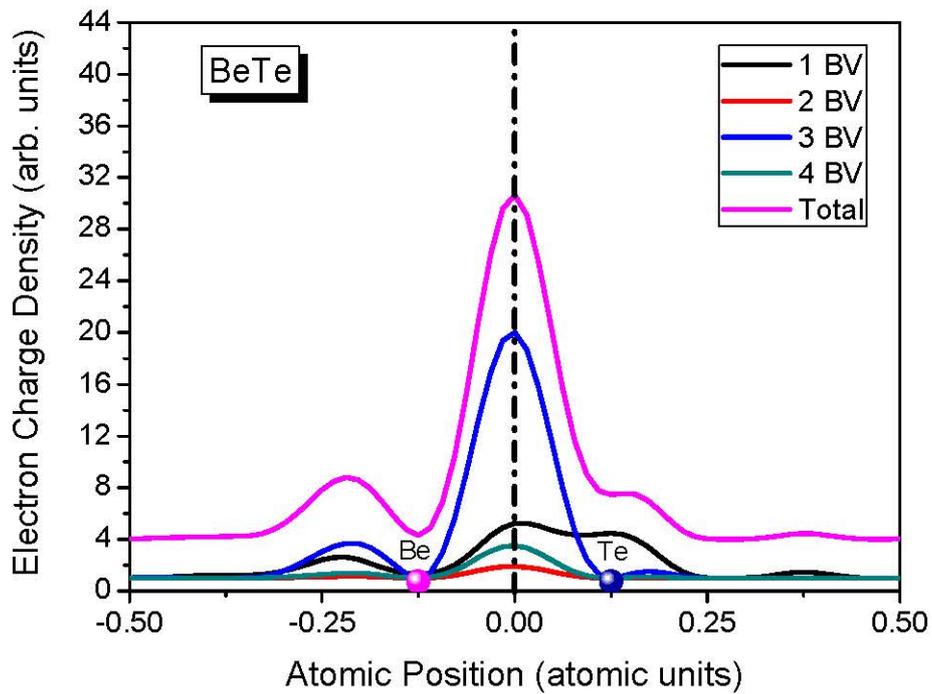
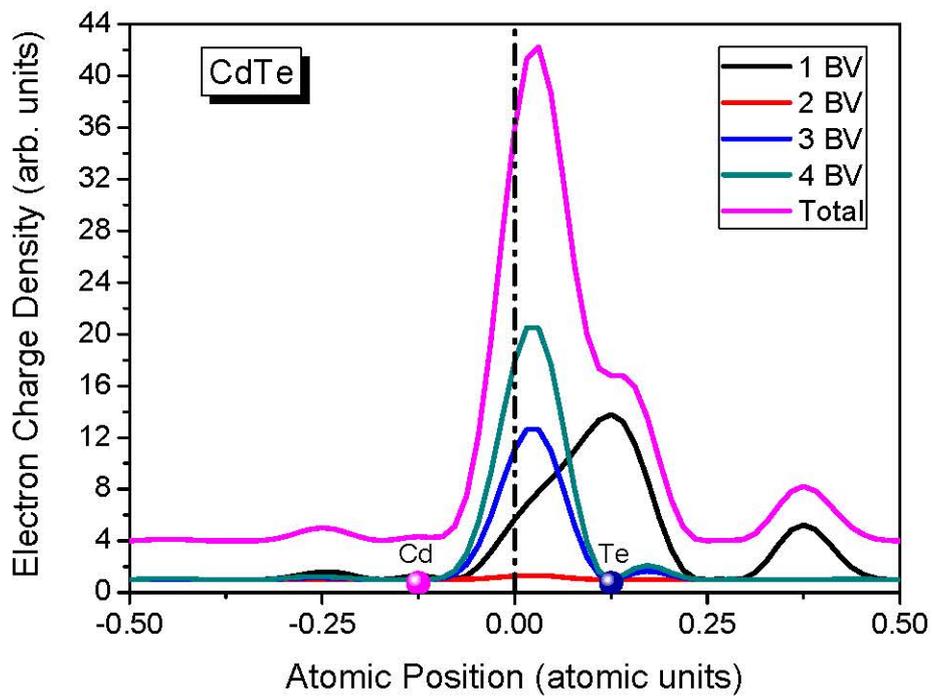


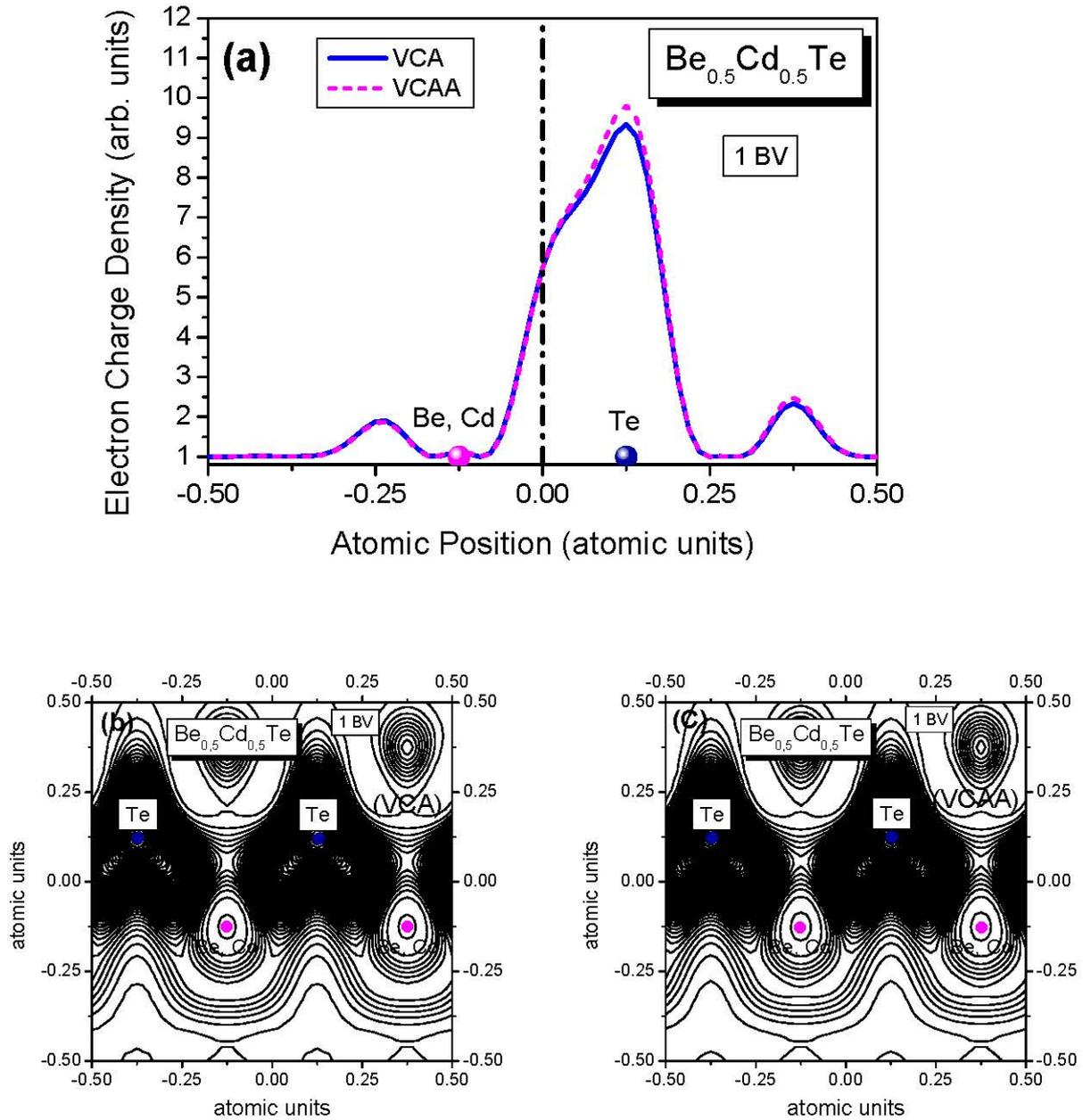
Figure III-11 : Profil de la densité de charges électroniques des quatre bandes de valence et la somme au point  $\Gamma$  des composés binaires CdTe et BeTe suivant la direction [111].

**III- 6- Effet de désordre :****III- 6- 1- Première bande de valence :**

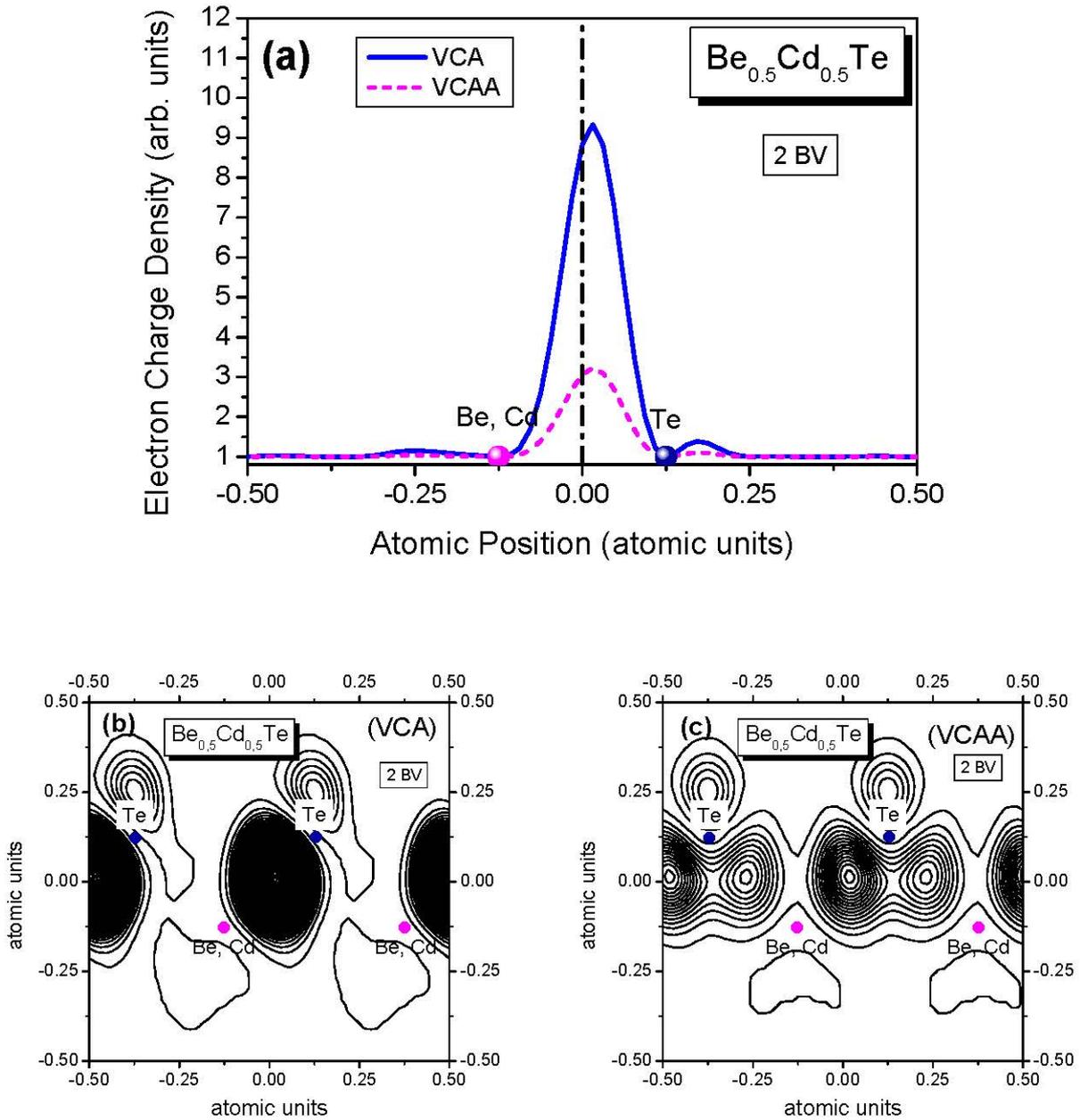
La figure (III-12) présente la densité de charge électronique de la première bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  pour  $x=0.5$ , profil suivant la direction [111] et contour dans le plan (110) sans désordre et avec désordre. On peut noter que la densité de charge électronique est asymétrique autour du centre de la liaison, mais la distribution des charges est localisée au site anionique (Te) par rapport au site cationique (Be, Cd). On constate aussi, que la densité de charge dans les sites interstitiels est remarquable dans les régions des sites anioniques (Te). L'effet de désordre compositionnel affecte légèrement la forme de la densité de charge électronique de la première bande de valence.

**III-6-2- Deuxième bande de valence :**

La figure (III-13) présente la densité de charge électronique de la deuxième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  pour  $x=0.5$ , profil suivant la direction [111] et contour dans le plan (110) sans désordre et avec désordre. Nous remarquons que la distribution de la densité de charge est centrée au centre de la liaison entre les deux sites atomiques et que la plus part de la densité est localisée au voisinage de site anionique (Te) par rapport au site cationique (Be, Cd). La densité de charge dans les sites interstitiels est presque négligeable. L'effet de désordre compositionnel est remarquable par ce qu'il y a une diminution importante de la densité de charge.



**Figure III-12 :** Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  (a) profil suivant la direction  $[111]$  sans désordre (—) et avec désordre (---), (b) contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et (c) avec désordre.

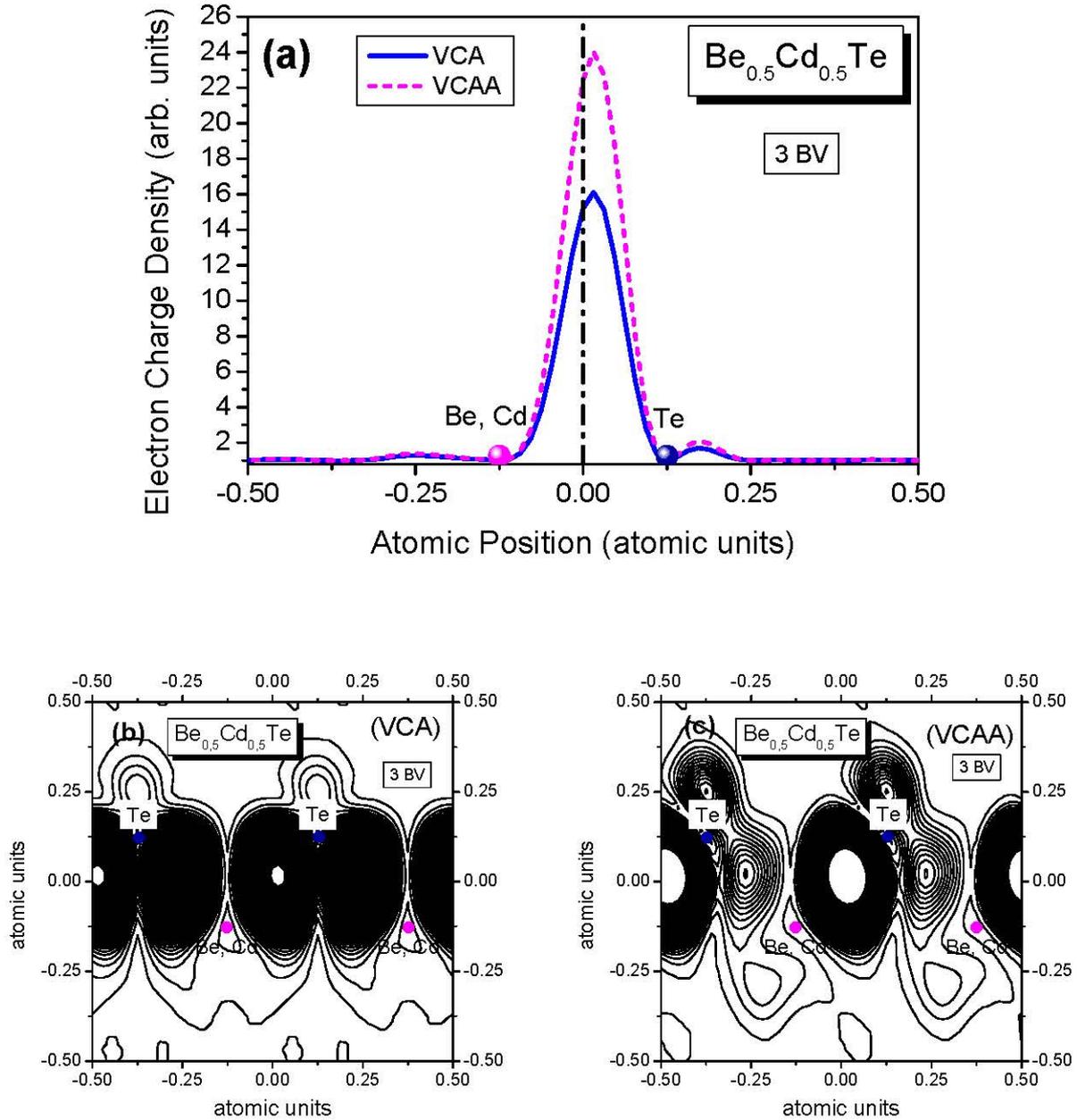


**Figure III-13 :** Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  (a) profil suivant la direction  $[111]$  sans désordre (—) et avec désordre (---), (b) contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et (c) avec désordre.

**III- 6- 3- Troisième bande de valence :**

La figure (III-14) présente la densité de charge électronique de la troisième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  pour  $x=0.5$ , profil suivant la direction  $[111]$  et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et avec désordre. Nous constatons que la distribution de la densité de charge électronique est centrée au centre de la liaison et que la plus part de la densité est décalée un petit peu

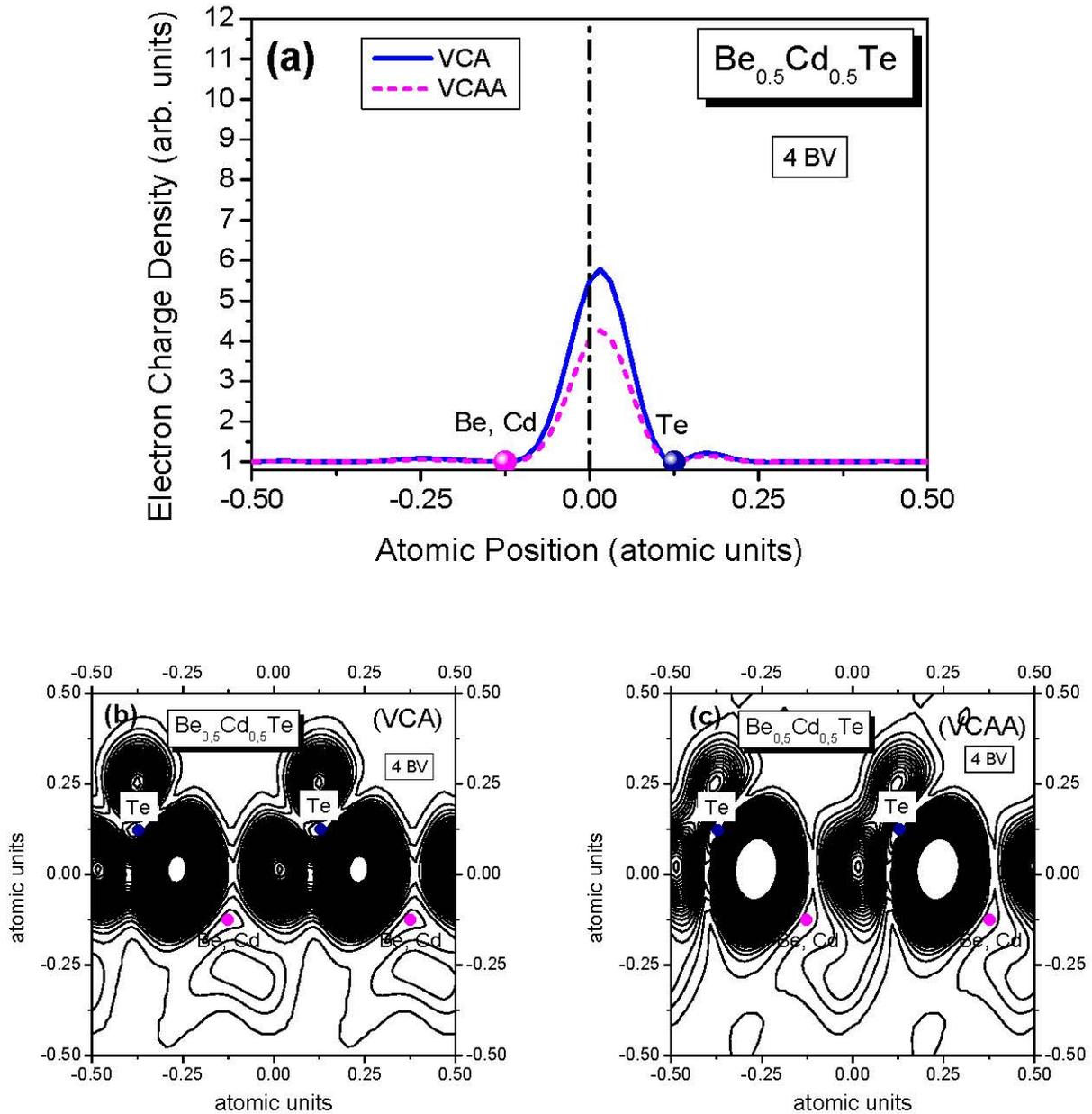
côté site anionique (Te) par rapport au site cationique (Be, Cd), mais avec une intensité plus importante. La densité de charge dans les sites interstitiels est presque nulle. L'effet de désordre compositionnel est très important, on observe une augmentation considérable de la densité de charge électronique.



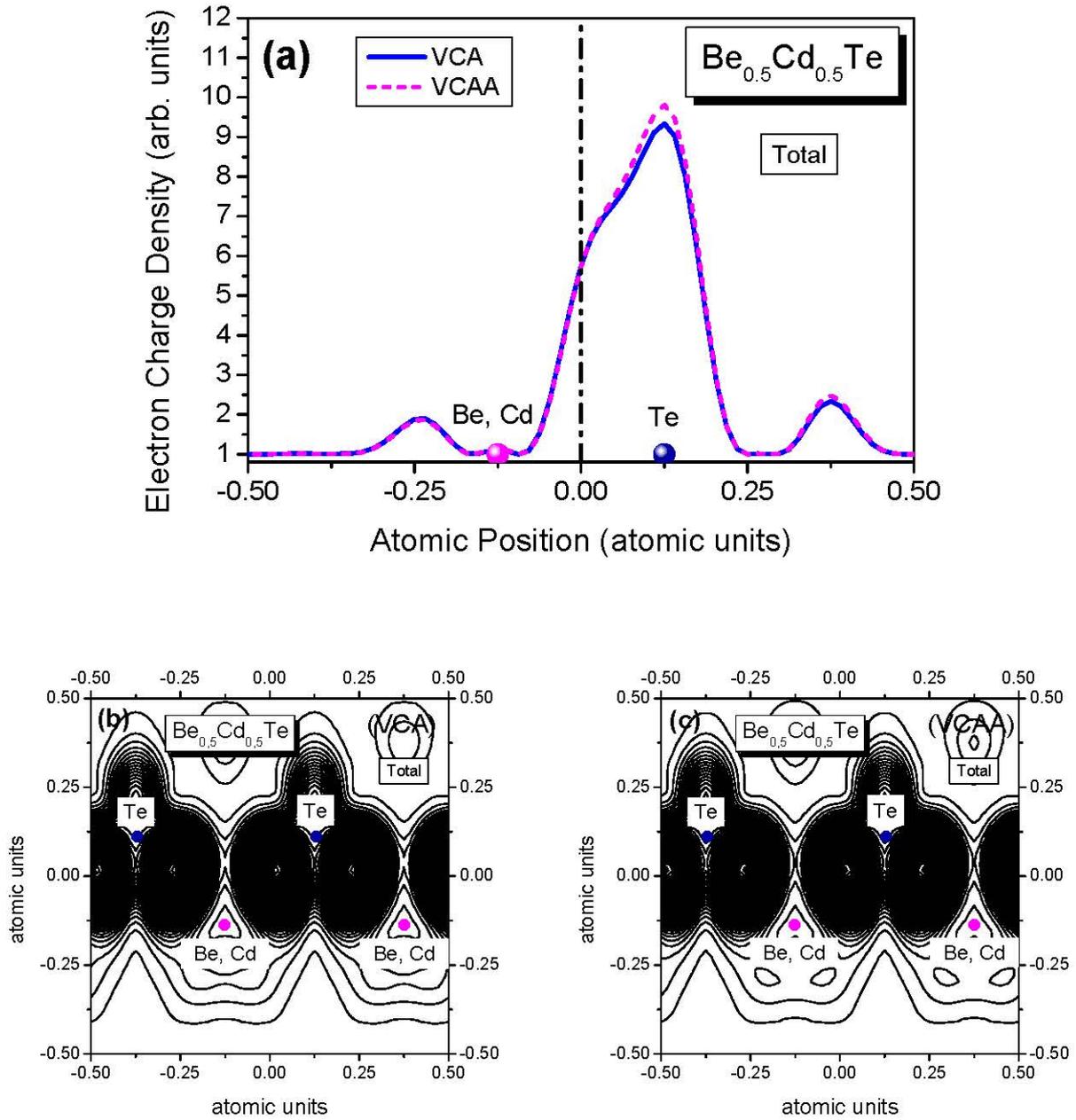
**Figure III-14 :** Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  (a) profil suivant la direction  $[111]$  sans désordre (—) et avec désordre (---), (b) contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et (c) avec désordre.

### III- 6- 4- Quatrième bande de valence :

La figure III-15 présente la densité de charge électronique de la quatrième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  pour  $x=0.5$ , profil suivant la direction  $[111]$  sans désordre et avec désordre. Dans cette bande, la situation est presque similaire à la deuxième bande de valence (figure III-13) mais l'intensité de la densité de charge électronique est moins intense.



**Figure III-15 :** Densité de charges électroniques de la quatrième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  (a) profil suivant la direction  $[111]$  sans désordre (—) et avec désordre (- - -), (b) contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et (c) avec désordre.



**Figure III-16 :** Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  (a) profil suivant la direction  $[111]$  sans désordre (—) et avec désordre (- - -), (b) contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et (c) avec désordre.

**III- 6- 5- Somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  :**

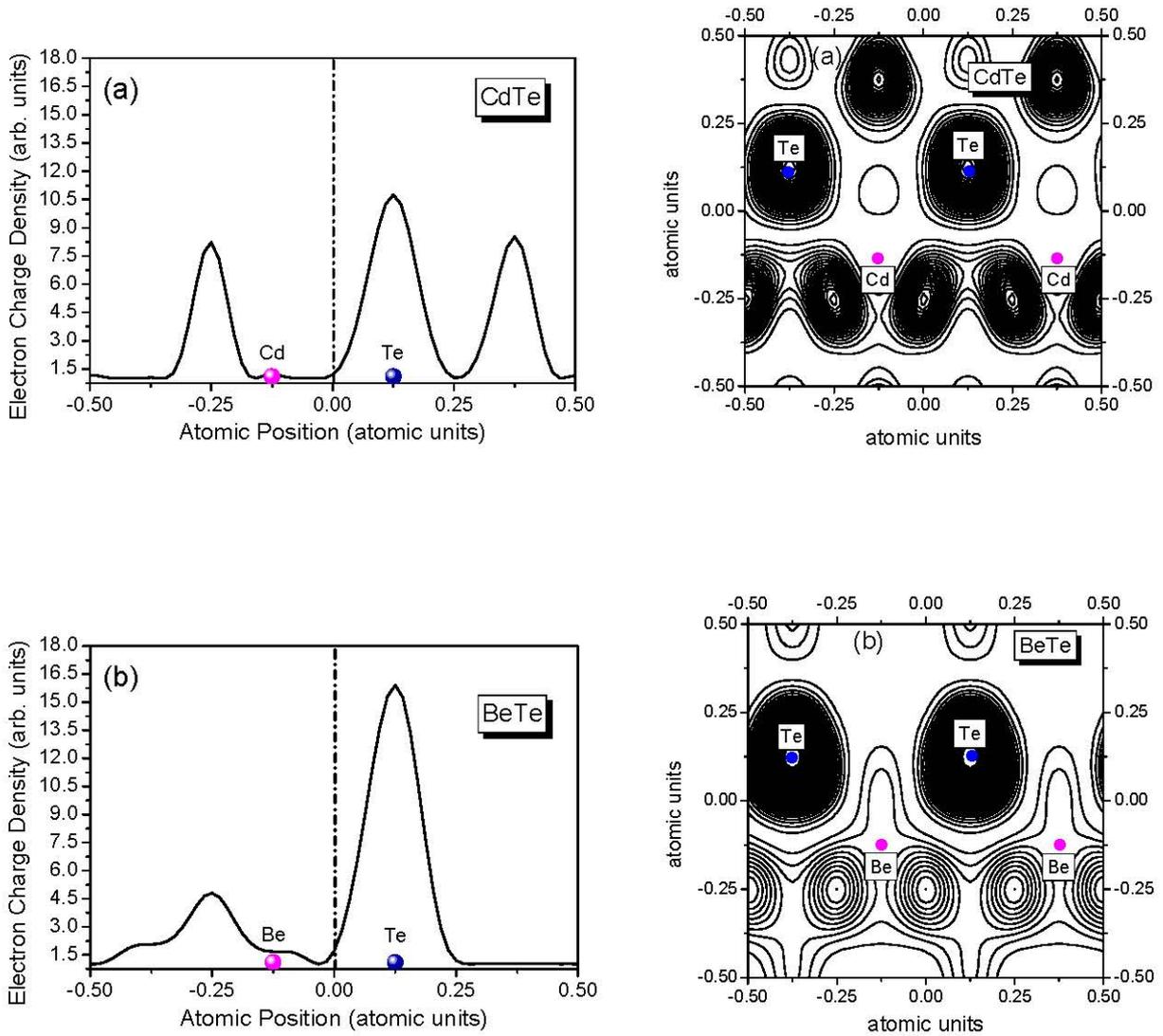
La figure (III-16) présente la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ , profil suivant la direction  $[111]$  et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et avec désordre.

On peut constater que la densité de charge électronique est similaire à celle observée pour la première bande de valence de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ . Cependant, la densité de charge électronique est asymétrique autour du centre de la liaison, ainsi le transfert important de charge du cation (Be, Cd), vers l'anion (Te) indique que l'anion possède un potentiel plus fort que celui du cation. Cette différence de potentiel est responsable du caractère de l'ionicité présent dans la liaison. On note aussi, que la densité de charge dans les régions des sites interstitiels est remarquable dans les régions des sites anioniques (Te).

L'effet de désordre compositionnel affecte légèrement la forme de la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence.

Nous pouvons conclure que la contribution varie de chaque bande dans la somme des quatre bandes de valence de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ .

Essentiellement le caractère ionique est fourni par la première bande, et le reste de bandes fournit le caractère covalent. Cependant, il y a quelques exceptions là où la situation est renversée. Cette étude prouve que si la première bande est ionique, donc le reste de bandes est covalente et vice versa, en plus la variation de la concentration  $x$  de Béryllium pourrait changer la nature de la liaison. Cette étude est conforme de celle trouvée par Aourag et *al.* [15].



*Figure III-17 : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  profil suivant la direction  $[111]$  et contour dans le plan  $(110)$  des composés binaires : (a) CdTe, (b) BeTe.*

**III- 7- Densité de charge pour la première bande de conduction au point  $\Gamma$  :**

La figure (III-17), représente la densité de charge des électrons de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  profil suivant la direction [111] et contour dans le plan (110), pour les composés binaires BeTe et CdTe.

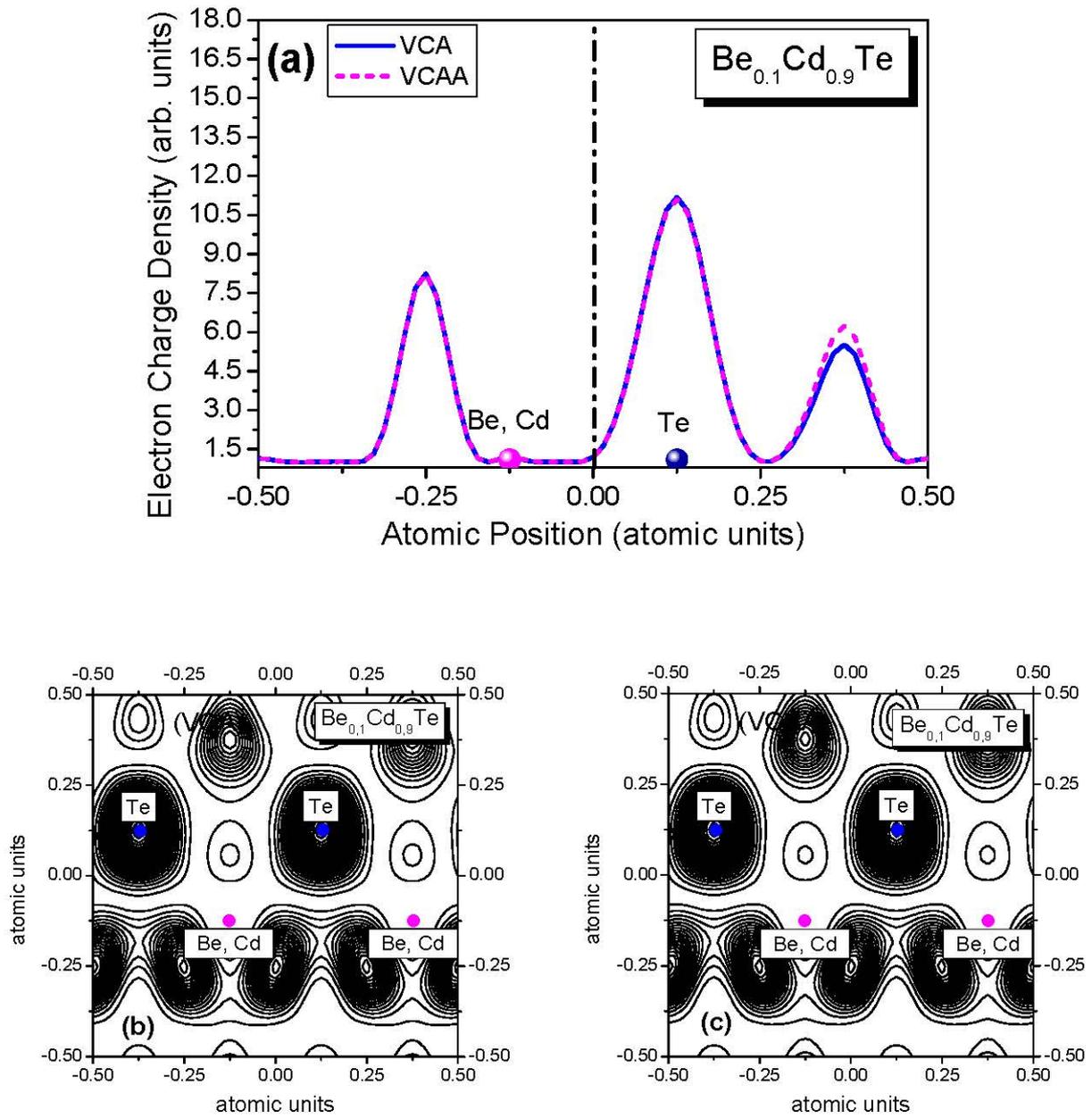
Pour le composé CdTe, nous remarquons l'absence totale des charges électroniques entre le cation et l'anion, caractérise une orbitale anti-liante. Cependant, les distributions des charges électroniques sont concentrées au niveau de l'anion (Te). Une quantité de charge électronique est présente sur les sites interstitiels côté anionique (Te) et cationique (Cd).

Par contre pour le composé BeTe, les distributions des charges électroniques sont presque similaires du composé CdTe avec des charges importantes au niveau du site anionique (Te) et aucunes charges électroniques dans la région interstitielle côté anionique, mais une quantité de charge électronique se trouve sur les sites interstitiels côté cationique (Be). On peut dire que ces distributions des charges sont du type « S » pour les deux composés.

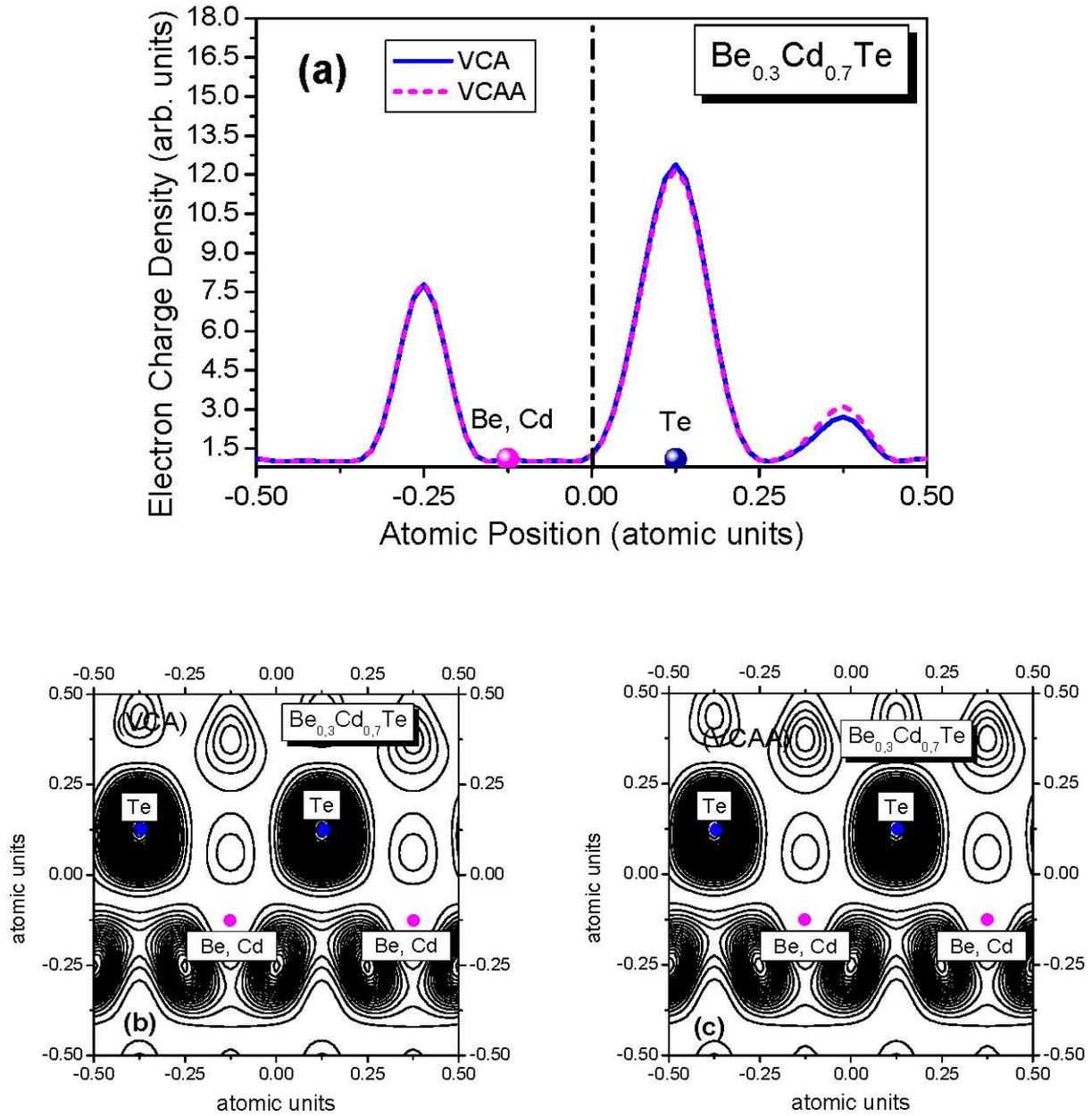
**III- 7-1- Effet de désordre :**

Les figures (III-18)-(III-22), représentent la densité de charge électronique de la première bande de conduction au point  $\Gamma$ , profil suivant la direction [111] et contour dans le plan (110), calculée par V.C.A et la V.C.A. Améliorée pour des différentes compositions x de Béryllium. Les résultats montrent que l'évolution de la première bande de conduction pour les différentes concentrations de Béryllium est moins sensible sous l'effet du désordre. Ceci n'est pas conforme aux distributions de charges des composés III-V [16-22].

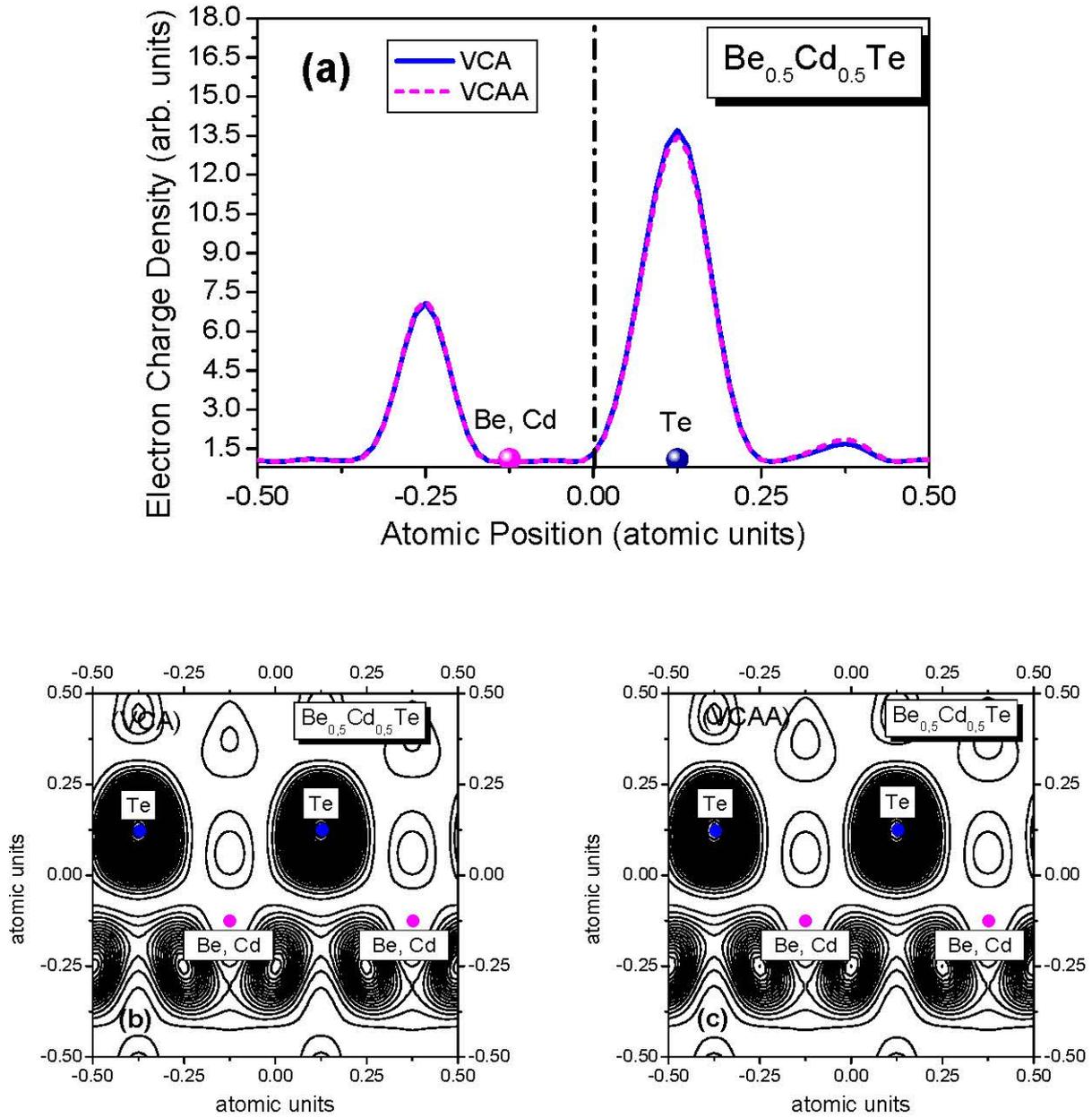
Les figures sont presque semblables. La densité de charge électronique est localisée au site anionique (Te) et presque aucune charge électronique dans les sites cationiques (Be, Cd). Une densité de charge importante se trouve dans les régions interstitielles anioniques (Te) et cationiques (Be, Cd). Cette dernière fait diminuer rapidement dans les régions interstitielles anioniques (Te) et légèrement dans les régions interstitielles cationiques (Be, Cd) en augmentant la concentration de Béryllium. Cependant l'intensité de la densité de charge électronique augmente dans les sites anioniques (Te) en fonction de la concentration de Béryllium.



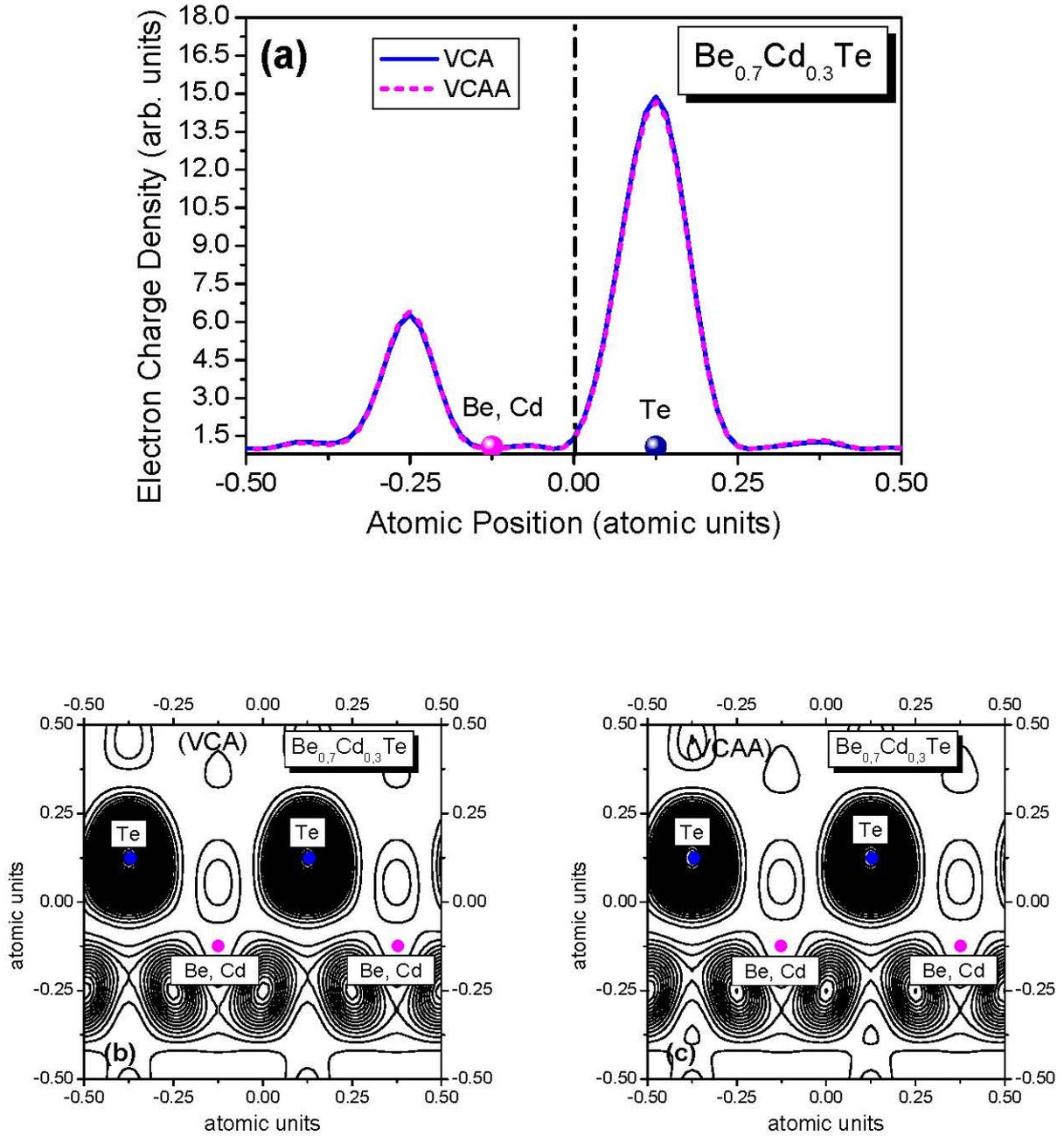
**Figure III-18** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Be_{0.1}Cd_{0.9}Te$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (- - - - -), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).



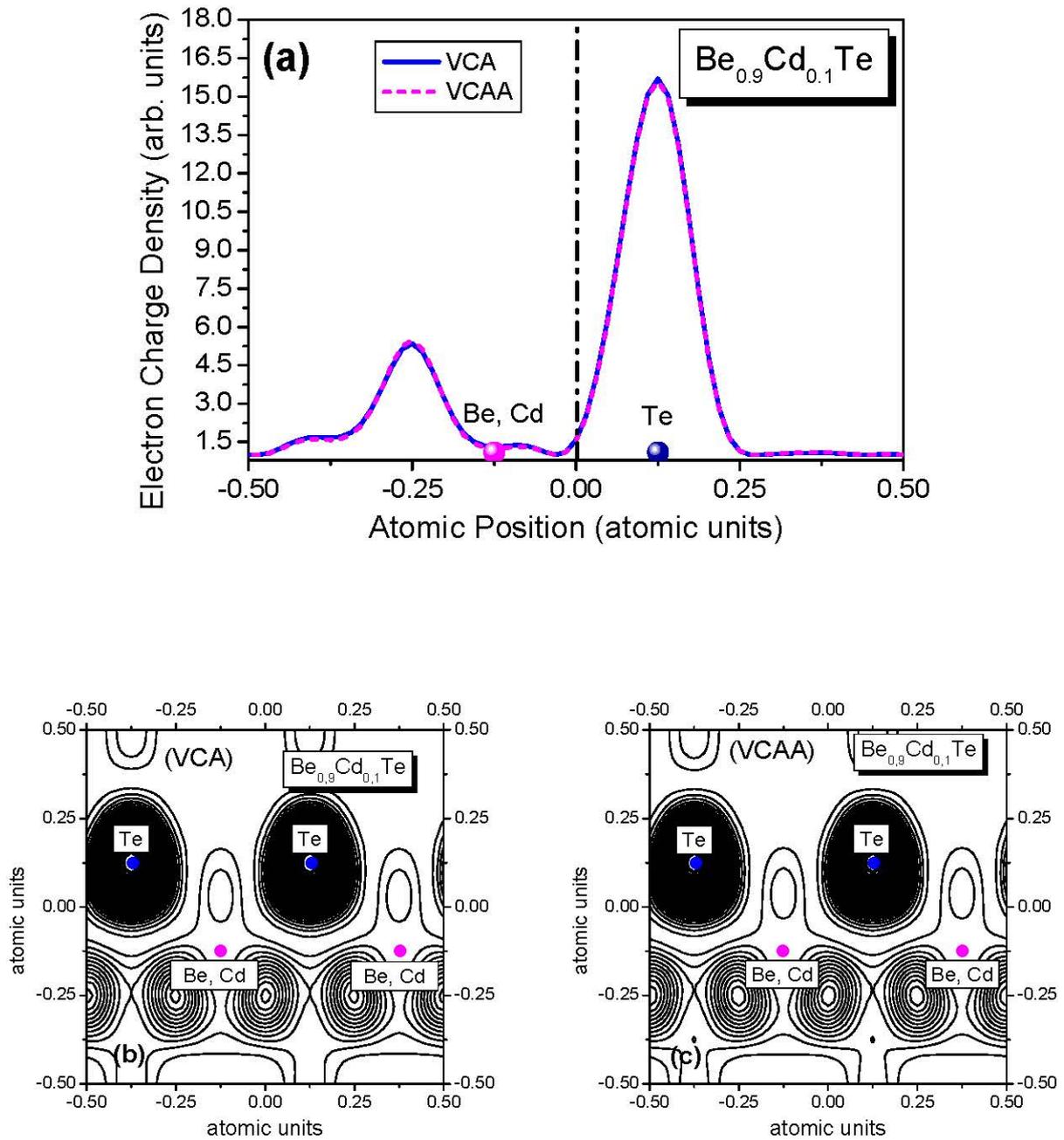
**Figure III-19** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Be_{0.3}Cd_{0.7}Te$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).



**Figure III-20** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Be_{0.5}Cd_{0.5}Te$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).



**Figure III-21** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Be_{0.7}Cd_{0.3}Te$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).



**Figure III-22** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_{0.9}\text{Cd}_{0.1}\text{Te}$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA).

**III-7-2- Effet de la composition stœchiométrique :**

Les figures (III-23) (III-24) présente la densité de charge électronique de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ , profil suivant la direction [111]. Cette figure nous montre l'effet de la composition stœchiométrique sur la densité de charge électronique au point  $\Gamma$  pour les concentrations de Be suivantes :  $(\text{CdTe})$   $x=0$  ;  $(\text{Be}_{0,1}\text{Cd}_{0,9}\text{Te})$   $x=0,1$  ;  $(\text{Be}_{0,3}\text{Cd}_{0,7}\text{Te})$   $x=0,3$  ;  $(\text{Be}_{0,5}\text{Cd}_{0,5}\text{Te})$   $x=0,5$  ,  $(\text{Be}_{0,7}\text{Cd}_{0,3}\text{Te})$   $x=0,7$  ,  $(\text{Be}_{0,9}\text{Cd}_{0,1}\text{Te})$   $x=0,9$  et  $(\text{BeTe})$   $x=1$ .

Les deux figures sont presque identiques. On remarque que la distribution de la densité de charge électronique est localisée au site anionique (Te), et la densité électronique entourant l'anion (Te) est plus importante à celle entourant le cation (Be, Cd). Il y a une charge remarquable au niveau des régions interstitielles des deux côtés anionique (Te) et cationique (Be, Cd). Presque aucune charge électronique entre les deux sites atomiques. Une autre constatation a été faite, est que la densité de charge électronique augmente en augmentant la concentration de Béryllium au site anionique (Te). Par contre elle diminue rapidement dans les régions interstitielles anioniques (Te) et légèrement dans les régions interstitielles cationiques (Be, Cd). On peut conclure que les distributions de charge électronique de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  sont toujours anti-liante de type S. Cela est conforme aux distributions de charges des composés II-VI [23-27].

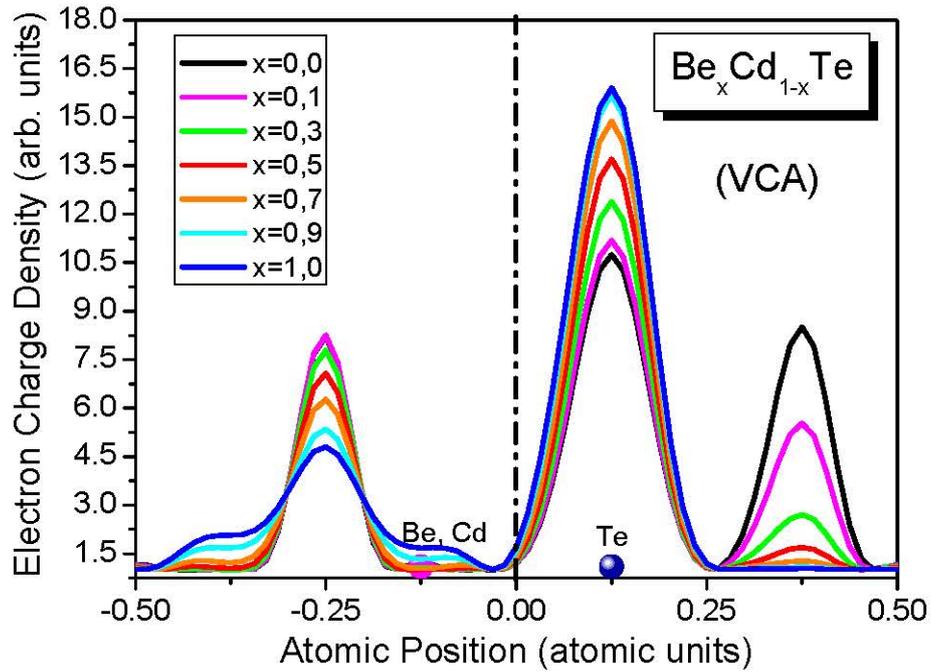


Figure III-23 : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Be_xCd_{1-x}Te$ , profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (VCA).

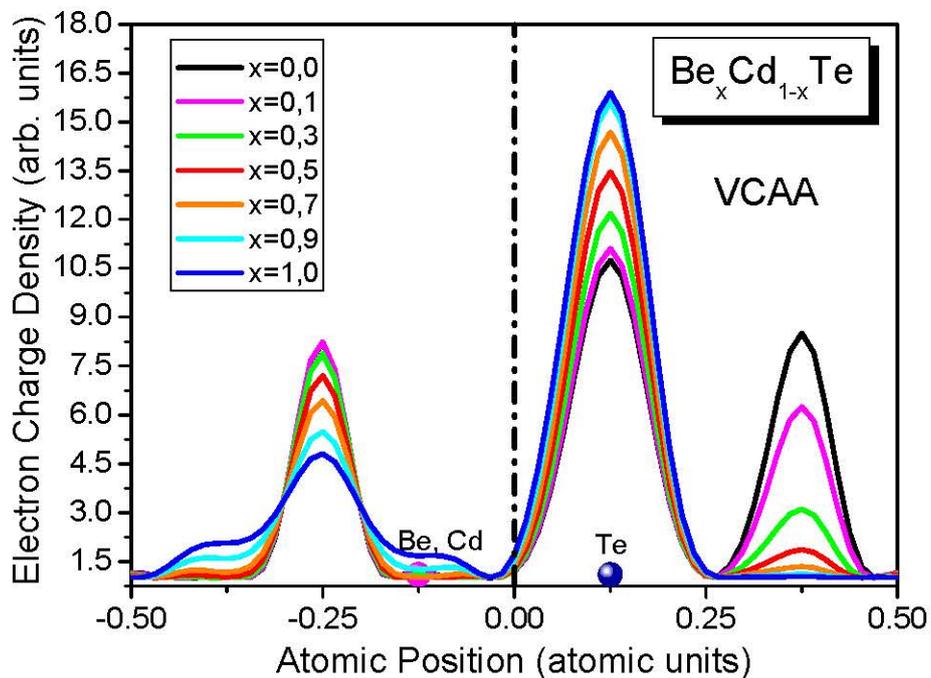


Figure III-24 : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Be_xCd_{1-x}Te$ , profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (VCAA).

## Références :

- [1] <https://ar.thpanorama.com/artcles/quimica/qu-es-la-densidad-electrnica.html>
- [2] J. M. Baranowski, *J. Phys. C* 17, 6287 (1984).
- [3] J. P. Walter and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* 4, 1877 (1971).
- [4] A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* 7, 5212 (1973).
- [5] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Rev. B* 8, 5747 (1973).
- [6] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Status Solidi (b)* 62, 238 (1974).
- [7] N. Bouarissa, A. Tanto, H. Aourag , and T. Bent-Meziane, *Compu. Mater. Sci*, 3, 430 (1995)
- [8] H. Aourag, A. Belaidi and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys*, 24, 209 (1989).
- [9] H. Aourag, G. Merad, B. Khelifa and A. Mahmoudi, *Mat. Chem. Phys*, 28, 431 (1991).
- [10] F. Benmakhlouf, A. Bechiri, , and N. Bouarissa, *Solid-State Electronics*, 47,1335 (2003).
- [11] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic Press, New York, 1973.
- [12] S. Adachi, *Proprieties of semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons , 2009.
- [13] N. E. Christensen, S. Satpathy and Z. Pawlowska, *Phys. Rev. B* 36, 1032 (1987).
- [14] V. Kumar, G. M. Prasad, A. R. Chetal and Dinesh Chandra, *Jour. Phys. Chem. Solids* 57, 503 (1996).
- [15] H. Aourag, M. Hammadi, M. Mahmoudi and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys.*, 31, 359 (1992).
- [16] A. Bechiri, thèse de Doctorat d'état, Université de Constantine (Algeria), 2006.
- [17] N. Bouarissa, N. Amrane and H. Aourag, *Infrared Phys. Technol* , 31, 755 (1995).
- [18] H. Aourag, B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys* , 25, 531,(1990).
- [19] H. Aourag, A. Belaidi, B. Khelifa, M. Gamoudi and C. Jardin, *Phys. Lett. A* , 149, 305 (1990).
- [20] G. Merad, H. Aourag and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys* , 30, 187, (1992)
- [21] H. Aourag, F. Sellal and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys*, 30, 229 (1992).
- [22] N. Badi, H. Abid, B. Soudini, N. Amrane, M. Driz, B. Khelifa and H. Aourag, *Mat. Chem. Phys*, 38, 24 (1994).
- [23] H. Aourag, B. Khelifa, L. Hamerlaine, H. Belarbi, *Phys. Lett A*, 145, 45 (1990).
- [24] H. Aourag, M. Hammadi and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys*, 33, 197 (1993).
- [25] H. Aourag, M. Driz, B. Khelifa, H. Nara and T. Kobayasi, *Mat. Chem. Phys*, 36, 77 (1993).
- [26] A. Mahmoudi, B. Soudini, N. Amrane, B. Khelifa and H. Aourag, *Compu. Mat. Sci*, 2, 213 (1994).
- [27] H. Saheb and A. Bechiri, *Solid State Phenomena*, 297, 131 (2019).



*Conclusion générale*

## Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons étudié la densité de charge électronique des composés semiconducteurs binaires CdTe et BeTe et leurs alliages ternaires  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ . Dans nos calculs nous avons utilisé la méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui prie en considération l'effet du désordre compositionnel comme un potentiel effectif. Généralement, il y'a un accord entre nos résultats et les travaux de recherches disponibles.

Nous avons calculé la densité de charge électronique des composés binaires CdTe et BeTe et leurs alliages ternaires  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  au point  $\Gamma$  pour chaque bande de valence et la somme des quatre bandes de valence. Nous avons calculé aussi la densité de charge électronique au point  $\Gamma$  pour la première bande de conduction. Nous avons étudié l'influence de l'effet de désordre sur chaque état des bandes de valence et la première bande de conduction au point  $\Gamma$  et nous avons vu l'effet de la composition  $x$  de Béryllium sur la distribution de la densité de charge électronique.

Dans les composés CdTe et BeTe seulement la plus basse bande (1<sup>ière</sup> bande de valence) a une grande partie un caractère type S, vu clairement au site de l'anion donnant alors le caractère ionique à cette bande. Etudier.

Pour les deux composés CdTe et BeTe, la 2<sup>ième</sup>, la 3<sup>ième</sup> et la 4<sup>ième</sup> bande de valence ont un caractère type P donnant alors le caractère covalent à ces bandes. Mais la contribution de la 4<sup>ième</sup> bande de valence est plus importante que la contribution de la 3<sup>ième</sup> bande de valence pour le composé CdTe. La situation est inversée pour le composé BeTe

Nous pouvons conclure que la contribution varie de chaque bande dans la somme des quatre bandes de valence de l'alliage  $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ . Essentiellement le caractère ionique est fourni par la première bande, et le reste de bandes fournit le caractère covalent. Cette étude prouve que si la première bande est ionique donc le reste de bandes est covalente et vice versa, en plus la variation de la concentration de Béryllium pourrait changer la nature de la liaison.

L'effet du désordre affecte les bandes de valence au point  $\Gamma$ . Mais, ce dernier est plus remarquable pour la 2<sup>ième</sup>, la 3<sup>ième</sup> et la 4<sup>ième</sup> bande de valence au point  $\Gamma$ .

L'effet de la composition stœchiométrique de Béryllium est intéressant. Les distributions de charge électronique pour la première bande de conduction au point  $\Gamma$  est anti-liante de type S, pour toutes les concentrations de Béryllium.