



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

جامعة  
FSESNV



كلية العلوم الدقيقة والعلوم الطبيعية  
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 des matériaux

*Thème:*

Densité de charge électronique des  
composés MgTe, ZnTe et leurs alliages  
au bord de la bande de conduction

Présenté par:

*Sana Sehaïlia et Houda Saadallah*



Devant le jury:

Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Amira El-Hassasna	MCB	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le mardi 22 / 06 / 2021 à 11<sup>h</sup>:30



**Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat**  
(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)

Nous soussignons

Nom, prénom:     **Shailia Sana**     &     **Saadallah Houda**    

N° de carte d'étudiant: (1)     **161634020826**     (2)     **161634025044**    

Régulièrement inscrits (es) en **Master** au **Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2020/2021**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité:     **Physique des matériaux**    

Intitulé du mémoire:     **Densité de charge électronique des composés MgTe, ZnTe**  
    **et leurs alliages au bord de la bande de conduction**    

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

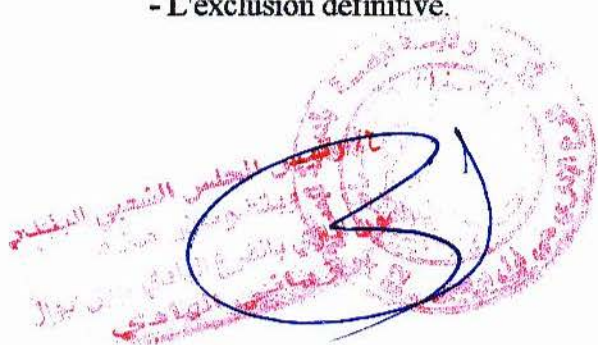
Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusion définitive.

Fait à Tébessa, le :04 juillet 2021..

Signature des étudiants (es):



2021 04

(1):

(2):



# *Sommaire*

Sommaire.	
Remerciements.	
Dédicace.	
المخلص	
Abstract	
Résumé	
Liste des tableaux.....	<i>i</i>
Liste des figures .....	<i>ii</i>
Liste des Symboles.....	<i>iv</i>
<b>Introduction Générale.....</b>	<b>1</b>

## Chapitre I

### La méthode du pseudo-potentiel

I.1. Introduction.....	4
I.2. La méthode des pseudo-potentiels.....	5
I.3. Le formalisme mathématique.....	5
I.4. Caractéristiques du pseudo-potentiel.....	7
I.5. Les modèles du pseudo-potentiel.....	7
I.5.1. Le modèle local.....	7
I.5.1.a. Le premier modèle.....	8
I.5.1.b. Le deuxième modèle (modèle d'Aschkroft).....	8
I.5.1.c. Le troisième modèle (Appelé modèle Heine et Abarenkov).....	8
I.5.2. Le modèle non local.....	8
I.5.2.a. La fonction de Heine Abarenkov.....	9
I.5.2.b. La fonction de Gauss.....	9
I.6. Transférabilité du pseudo-potentiel.....	10
I.7. La méthode empirique des pseudo-potentiels (EPM).....	10
I.8. la méthode du calcul.....	11
**Références**.....	14

## Chapitre II

### Les liaisons chimiques

II.1. Introduction.....	16
II.2. Structure amorphe.....	16
II.3. Structure cristallin .....	16
II.4. Les liaisons chimiques.....	17
II.5. Types de liaisons cristallines.....	17
II.5.1. Les liaisons fortes.....	17
II.5.1.1. Les liaisons covalents.....	17

II.5.1.2. Les liaisons ioniques.....	18
II.5.1.3. Les liaisons métalliques .....	18
II.5.2. Les liaisons faibles.....	19
II.5.2.1. Les liaisons hydrogènes .....	19
II.5.2.2. Les liaisons de Van der Waals .....	19
II.5.2.3. Les liaisons moléculaires.....	20
II.6. Structure Zinc- blende.....	20
II.7. Première zone de Brillouin.....	21
II.7.1. Les points de haute symétrie.....	21
II.7.2. Les lignes de haute symétrie.....	22
**Références** .....	23

### Chapitre III

#### Résultats et discussion

III.1. Introduction.....	24
III.2. Calcul de la densité de charge électronique.....	25
III. 3. La densité de charge pour chaque bande de valence au point $\Gamma$ .....	27
III. 3. 1. La première bande de valence .....	27
III. 3. 2. La deuxième bande de valence .....	28
III. 3. 3. La troisième bande de valence .....	33
III. 3. 4. La quatrième bande de valence .....	33
III. 4. La somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ des composés binaires .....	38
III. 5. Profil des quatre bandes de valence et la somme des composés binaires MgTe et ZnTe.....	41
III. 6. L'effet de désordre .....	42
III. 6. 1. La première bande de valence .....	42
III. 6. 2. La deuxième bande de valence.....	43
III. 6. 2. La troisième bande de valence.....	45
III. 6. 4. La quatrième bande de valence .....	46
III. 6. 5. La somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ .....	49
III.7. La densité de charge pour la première bande de conduction au point $\Gamma$ .....	51
III.7.1. L'effet de désordre.....	52
III.7.2. L'effet de la composition stœchiométrique.....	58
**Références** .....	61
<b>Conclusion générale</b> .....	62

# Remerciements

Nous remercierons avant tout **ALLAH** l'Élevé le plus Puissant qui nous' à offert la volonté et la santé et nous a aider à réaliser et accomplir ce travail. En premier lieu, nous remercierons notre directeur de mémoire, Docteur **Abderrachid Bectiri**, 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 Docteur **Fella Benmakhlouf**, Professeur à l'Université de Tébessa, d'avoir accepté de présider le Jury de ce mémoire. Nous remercierons sincèrement Docteur **Amira EL-Hassasna**, M.C.B à l'université de Tébessa, d'avoir accepté d'examiner ce travail et de faire partie de ce 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.

**Sana et Houda**



## *Dédicace*

*Je dédie ce modeste travail à celle qui m'a donné la vie, le symbole de tendresse, qui s'est sacrifiée pour mon bonheur et ma réussite.*

*A ma mère **Nassima***

*A mon père: **Ramdiane**, école de mon enfance, qui a été mon ombre durant mes études, et qui a veillé tout au long de ma vie à m'encourager, à me donner l'aide et à me protéger.*

*A mes adorables frères: **Khaled, Oussama, Yassine**. Puisse Dieu vous donne santé, bonheur et réussite dans la vie.*

*A mes chères soeurs : **Djihane** et **Kaouthier** pour leurs soutiens moraux,*

*Ames meilleur amies: **Nada, Chaima, Yasmine**.*

*À toutes mes amies.*

*Une spéciale dédicace: **Prof. Abderrachid Bechiri** pour son aide inestimable.*

*A tous ceux qui m'aiment.*

*A tous ceux que j'aime.*

*Je dédie ce travail.*

*Sana Sehailia*





## *Dédicaces*

Dédicaces avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail à ceux qui , quels que soient les termes embrassés , je n'arriverais jamais à leur exprimer mon amour sincère . A l'homme, mon précieux offre du dieu, qui doit ma vie, ma réussite et tout mon respect : mon cher père **Ali** A la femme qui a souffert sans me laisser souffrir, qui n'a jamais dit non à mes exigences et qui n'a épargné aucun effort pour me rendre heureuse : mon adorable mère **Zoubaida**

**A ma sœurs : Amel , Ardjouna , Nesrine .**

**A mes adorables frères : Sabri , Fouad , Rabeh , Ahmed.**

**A mon fiancé : Abdessatar** qui n'a pas cessée de me conseiller, encourager et soutenir tout au long de mes études. Que Dieu les protège et leurs offre la chance et le bonheur. • **A mon adorable chère sœur : Farida**, qui sait toujours comment procurer la joie et le bonheur pour toute la famille .

**A mon cher professeur : Abderrachid Bechiri** qui m'a accompagné tout au long de ma carrière de chercheur et qui a été comme notre deuxième père , Ses remarques m'ont incité à affiner ma réflexion, à corriger mes erreurs et à apprendre un esprit de responsabilité et de discipline .

A tous les amis que j'ai connus jusqu'à maintenant. Merci pour leurs amours et leurs encouragements. • Sans oublier mon binôme **Sana** pour son soutien moral, sa patience et sa compréhension tout au long de ce projet.

*Houda Saadallah*





ملخص

ملخص:

الهدف من هذا العمل هو دراسة كثافة الشحنة الإلكترونية للمركبات الثنائية  $MgTe$  و  $ZnTe$  وسبائكها المتبلورة في بنية زنك - بلاند عند النقطة  $\Gamma$ .

لإجراء هذه الدراسة، استخدمنا طريقة شبه الكمون التجريبية (EPM) إلى جانب تقريب البلورة الافتراضية (VCA).

لقد درسنا مساهمة كل عصابات التكافؤ ومجموع عصابات التكافؤ الأربعة بالإضافة إلى عصابة النقل الأولى عند نقطة التناظر العالي  $\Gamma$ .

إهتمام خاص تم تركيزه على تأثير العشوائية و تأثير التركيب الستوكيومترى للمغنيزيوم على كثافة الشحنة الإلكترونية.

بشكل عام، النتائج المحصل عليها تتوافق بشكل مرضي مع أعمال البحوث المتوفرة.

**الكلمات المفتاحية:**  $MgTe$ ،  $ZnTe$ ، طريقة شبه الكمون التجريبية (EPM)، تقريب البلورة الافتراضية (VCA)، كثافة الشحنة الإلكترونية.



*Abstract*

**Abstract:**

The aim of this work is to study the electronic charge density of binary compounds MgTe, ZnTe and their alloys crystallizing in the Zinc-blende structure at the  $\Gamma$  point .

To realize this study, we used the empirical pseudopotential method (E.P.M) coupled with the virtual crystal approximation (VCA).

We studied the contribution of each valence band and the sum of four valence bands as well as the first conduction band at the point of high symmetry  $\Gamma$  .

Particular attention has been paid to the disorder effect and the stoichiometric composition effect of magnesium on the electronic charge density.

In general, the results obtained are in agreement with the available research work.

**Keywords:** *MgTe, ZnTe, the empirical pseudopotential method (EPM), Virtual Crystal Approximation (VCA), Electronic Charge Density.*



# *Résumé*

**Résumé:**

Le but de ce travail est d'étudier la densité de charge électronique des composés binaires MgTe, ZnTe et de leurs alliages cristallisant dans la structure Zinc-blende au point  $\Gamma$ .

Pour réaliser cette étude, nous avons utilisé la méthode pseudopotentielle empirique (E.P.M) couplé avec l'approximation du cristal virtuel (VCA).

Nous avons étudié la contribution de chaque bande de valence et la somme de quatre bande de valence ainsi que la première bande de conduction au point de haute symétrie  $\Gamma$ .

Une attention très particulière a été accentuée sur l'effet du désordre et sur l'effet de la composition stœchiométrique du magnésium sur la densité de charge électronique.

En général, les résultats obtenus concordent mieux avec les travaux de recherches disponibles.

**Mots clés:** *MgTe, ZnTe, méthode pseudopotentielle empirique (E.P.M), approximation de cristal virtuel (VCA), densité de charge électronique.*



## *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 MgTe et ZnTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau en (<math>\text{Å}^0</math>).</i>	25
<i>Tableau III-2</i>	<i>les facteurs d'ionicté</i>	27





## *Liste des figures*

## Liste des figures

Figure	Titre	Page
Figure I-1	Fonction de Heine et Abarenkov.	09
Figure I-2	Les modèles du pseudo-potentiel non local.	10
Figure I-3	Organigramme de la procédure du calcul par E.P.M .	12
Figure II-1	Arrangement des atomes dans un cristal.	17
Figure II-2	La liaison cristalline type métallique.	18
Figure II-3	Amplitudes et distances d'interaction des principales liaisons interatomiques et intermoléculaires.	20
Figure II-4	Structure cubique Zinc blende (Sphalérite).	21
Figure II -5	Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries	22
Figure III-1	Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point $\Gamma$ du composé MgTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110)	29
Figure III-2	Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point $\Gamma$ du composé ZnTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110).	30
Figure III-3	Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point $\Gamma$ du composé MgTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110).	31
Figure III-4	La densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point $\Gamma$ du compose ZnTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110).	32
Figure III-5	Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point $\Gamma$ du composé MgTe (a) profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110)	34
Figure III-6	Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point $\Gamma$ du composé ZnTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110).	35
Figure III-7	Densité de charges électroniques de la quatrième bandes de valence au point $\Gamma$ du composé MgTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110)	36
Figure III-8	Densité de charges électroniques de la quatrième bande de valence au point $\Gamma$ du composé ZnTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110)	37
Figure III-9	Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ du composé MgTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110)	39
Figure III-10	Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ du composé ZnTe (a)profil suivant la direction [111], (b) contour dans le plan (110).	40
Figure III-11	Profil de la densité de charges électroniques des quatre bandes de valence et la somme au point $\Gamma$ des composés binaires MgTe et ZnTe suivant la direction [111].	42
Figure III-12	Densité de charges électroniques de la première bande de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ (a) profil suivant la direction [111] sans désordre (—) et avec désordre (- - -), (b) contour dans le plan (110) sans désordre et (c) avec désordre.	44

Figure III-13	Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ (a) profil suivant la direction [111] sans désordre (—) et avec désordre (----), (b) contour dans le plan (110) sans désordre et (c) avec désordre.	45
Figure III-14	Densité de charges électroniques de la troisième bande de valence au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ (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 $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ (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 $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ (a) profil suivant la direction [111] sans désordre (—) et avec désordre (----), (b) contour dans le plan (110) sans désordre et (c) avec désordre.	50
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) MgTe, (b) ZnTe.	51
Figure III-18	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.1}Zn_{0.9}Te$ , (a) profil suivant la direction [111], sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan (110) sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA)	54
Figure III-19	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.3}Zn_{0.7}Te$ , (a) profil suivant la direction [111], sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan (110) sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA)	55
Figure III-20	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ , (a) profil suivant la direction [111], sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan (110) sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA)	56
Figure III-21	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.7}Zn_{0.3}Te$ , (a) profil suivant la direction [111], sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan (110) sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA)	57
Figure III-22	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_{0.9}Zn_{0.1}Te$ , (a) profil suivant la direction [111], sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan (110) sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA)	58
Figure III-23	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ , profil suivant la direction [111], sans désordre (VCA).	60
Figure III-24	Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point $\Gamma$ de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ , profil suivant la direction [111], sans désordre (VCAA).	60



*Liste des symboles*

## Liste de symbole

Symboles	Sens physique
$\Gamma$	Point de centre de la première zone de Brillouin.
$X$	Point de centre d'une face carrée de l'octaèdre
$L$	Point de centre d'une face hexagonale de l'octaèdre.
$W$	Point qui se trouve sur l'un des sommets des faces carrées.
$Z$	Point situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre.
$\Delta$	Ligne qui représente la direction $\langle 100 \rangle$ . Elle relie le centre $\Gamma$ au point X.
$\Sigma$	Point appartenant au plan de symétrie.
$\Lambda$	Ligne qui représente la direction $\langle 100 \rangle$ Elle relie ( $\Gamma$ ) au f le point L de l'octaèdre.
$\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$	Vecteurs de base du réseau réciproque.
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$	Vecteurs de base du réseau direct.
$V$	Volume de la maille.
$\Psi$	Fonction d'onde du système.
$\Phi$	Ondes planes.
$\Phi_C$	Etat atomique qui occupe le cœur
$H$	Hamiltonien.
$E_C$	Energie du cœur.
$E$	Energie de valence.
$V_R$	Potentiel répulsive positif.
$V_C$	Potentiel attractif du coeur négatif.
$V_P$	Représente le pseudo potentiel
$\hbar$	Constante réduite de Planck.
$Z$	Nombre des électrons de valence atomique.
$r_C$	Rayon du cœur.
$A$	Potentiel constant dans la région du cœur.
$V_{NL}(r)$	Potentiel non locale.
$V_L(r)$	Potentiel locale.
$A_1(E)$	Energie des états profonds.
$f_1(r)$	Fonction simulant l'effet du cœur.
$P_1$	Opérateur de projection.
$\vec{R}$	Vecteur du réseau direct.
$\vec{\tau}$	Vecteur de la translation réseau direct.
$V_a(\vec{G})$	Facteur de forme.
$S(\vec{G})$	Facteur de structure.
$N_a$	Nombre d'atome de base.



*Introduction générale*

## **Introduction générale :**

Les semi-conducteurs ont joué un rôle majeur dans la révolution technologique courante, et la découverte des matériaux est l'un des facteurs les plus importants qui ont beaucoup contribué à la mise à niveau de la technologie moderne. L'un de ses fruits les plus importants a été la fabrication d'appareils électroniques qui sont utilisés dans notre vie quotidienne, en particulier dans les domaines des médias automatisés et de la conquête spatiale. Ils sont même considéré comme des matériaux de base dans la fabrication de détecteurs et de machines optiques et nucléaires, traitement d'images médicales et de nombreux autres domaines qui ont cristallisé à l'état solide et en ont fait un miracle électronique [1].

Pendant plus d'une décennie, les semi-conducteurs II-VI ont un intérêt croissant dû à leur application en optoélectronique. Les semi-conducteurs II-VI à larges bandes interdites sont des émetteurs efficaces dans la gamme spectrale bleu-UV et ils promettent d'être des systèmes probables pour la fabrication des diodes laser [2]. En dépit de quelques similitudes, chacun des semi-conducteurs II-VI possède ses propres propriétés physiques [3].

Les semi conducteurs composés II-VI sont connus pour leurs larges fentes de bande directe et pour leurs propriétés optiques et électriques. Cela en fait une importante classe de matériaux et des candidats concurrents pour le silicium et d'autres matériaux dans la conversion photovoltaïque et les applications optoélectroniques [4].

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 champ électrique critique beaucoup plus élevée [5].

Lors de cette recherche, on a étudié des alliages ternaires semi-conducteurs de type II-VI de la forme  $A_xB_{1-x}C$ . Nous avons choisi les alliages  $Mg_xZn_{1-x}Te$  des composés binaires ZnTe et MgTe sur la base de ses propriétés électroniques [6].

La structure électronique du MgTe, le ZnTe, a des applications très importantes pour les dispositifs d'éclairage à semi-conducteurs et les cellules solaires. De plus, cette structure est utilisée pour prévoir les bandes interdites dans les systèmes des alliages ternaires [7].

Les semi-conducteurs II-IV à base de MgTe ont attiré l'attention sur leur importance dans la fabrication des dispositifs optoélectroniques. Ils pourraient présenter de multiples phases cristallographiques telles que des états cubiques et hexagonaux et possèdent également plusieurs propriétés extraordinaires qui les rendent susceptibles d'être utilisés dans diverses applications.

Présente des trous à large bande et de faibles constantes diélectriques, il convient à l'optique dans le rayonnement UV-bleu. Il a une capacité d'émission de lumière dans son état solide très efficace [6,8, 9].

Le ZnTe est utilisé pour des applications dans les technologies optiques telles que les dispositifs d'éclairage visible et proche à UV. Il est utilisé en électronique, tels que divers dispositifs microélectroniques comme la diode émettrice de lumière verte [10], les mémoires optiques à haute densité, les conducteurs transparents et les photodétecteurs [11, 12]. Il a été étudié pour son utilisation de lasers à large bande interdite avec émission de lumière visible [9, 13].

Les alliages  $Mg_xZn_{1-x}Te$  sont utilisés potentiellement dans la fabrication des éléments des cellules solaires ou les couches diélectriques conductrices minces transparentes, et possèdent également des propriétés électriques et photo-luminescentes [14]. Ils sont utilisés dans l'industrie optoélectronique. C'est un bon candidat pour les lampes (LED) à émission verte et bleue. Il peut être utilisé comme une exposition aux UV efficace inférieure à 300 nm [8].

Le but de notre travail est l'étude de la densité de charge électronique de l'alliage ternaire. 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 résume 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] G. Ferenczi, F. Bekzray, *New Developments in Semiconductors Physics*, Springer erlag,(1988).
- [2] J. Gutowski, P. Michler, H. I. Ruckmann, H.G. Brunig, M. Rowe, K. Sebald and T. Voss, *Phys. Stat. Sol. B* **234**, 70 (2002).
- [3] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [4] S. Jeetendra, H. Nagabhushana, K. Mrudula, C. S. Naveen, P.Raghu, H. M. Mahesh, *Int. J. Electrochem. Sci*, **9**, 2944 (2014).
- [5] [https://fr.qwe.wiki/wiki/Wide-bandgap\\_semiconductor](https://fr.qwe.wiki/wiki/Wide-bandgap_semiconductor).
- [6] J. O. Akinlami, M. O. Omeike , A.J. Akindiilete , *Semiconductor physics J. Phys.***22**,5 (2019).
- [7] J.Yang, S. Chen, W.Yin, X. G. Gong , *Physcal Review J. Phys . B* **79**,245202, (2009).
- [8] A. Belhachemi, H. Abid, Y. Al-Douri, M. Sehil, A. Bouhemadou , M. Ameri, *Chinese J. Phys.* **55**, 1018 (2017).
- [9] U. Sarkar, B. Debnath, M. Debbarma, D. Ghosh, S. Chanda, R. Bhattacharjee, S. Chattopadhyaya, *Materials Chemistry and Physics J.Phys.* **230**, 54, (2019).
- [10] W. A. Syed, S.Ahmed, M. S. Saleem, N. A. Shah, *Chalcogenide Letters*, **12**, 215 (2015).
- [11] D. Lee, J. Zucker, M. D. Divino, R. F. Austin, R. D. Feldman, K. L. Jones et A.M. Johnson, *Appl. Phys. Lett*, **59**, 1867 (1991).
- [12] S. Valette, G. Labrunie, J.C. Deutsch, J. Lizet, *Appl. Opt.*, **16**, 1289 (1977).
- [13] J. H. Chang, M.W. Cho, H. Makino, K. Shim, H. Rabitz, T. Yao, *Crystal Growth J. Phys.* **214/215**, 373 (2000).
- [14] Z. Charifi, F. ElHaj Hassan, H. Baaziz, Sh. Khosravizadeh, S. J. Hashemifar , H. Akbarzadeh, *Condens Matter J. Phys.***17**,7077 (2005).

# *Chapitre I*

## *La méthode du pseudo-potentiel*

### I.1.Introduction :

Une longue pratique de calcul dans le domaine de la physique a montré que l'étude de divers problèmes nécessite des méthodes quantitatives précises et des méthodes de calcul simple et facile qui permettent le calcul de nombreuses propriétés des solides, en particulier les propriétés des semi-conducteurs. Les physiciens ont donc proposé une nouvelle technique de calcul efficace, précise et rapide, qui est la méthode du pseudo-potentiel [1].

L'approche du pseudo-potentiel 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 [2].

Le concept pseudo-potentiel a été avancé il y a longtemps et est basé sur la séparation énergétique et spatiale naturelle des électrons du noyau et de la valence. Le concept permet une réduction significative des efforts de calcul sans manquer la physique essentielle des phénomènes à condition que l'interaction des électrons du noyau et de la valence soit bien décrite par un modèle hamiltonien efficace. Le pseudo-potentiel est largement utilisé dans les calculs de structure de bande, il vise à remplacer le potentiel de réaction coulombien du noyau et les effets des électrons dits «de cœur», considérés comme fortement liés, par un potentiel effectif interagissant uniquement avec les électrons dits «de valence». Tous les pseudo-potentiels raisonnablement générés conduisent à des résultats de calcul précis, ils sont utilisés pour les systèmes moléculaires et pour simuler des surfaces et des masses de solides [3-6]. Cette approximation est d'une grande importance dans la théorie de la structure des bandes, car elle permet de ne traiter explicitement que des électrons de basse énergie (qui, par exemple, forment des liaisons chimiques) [7].

La base physique et chimique de cette heureuse approximation est double. Premièrement, dans un atome, seuls quelques électrons déterminent la formation de liaisons chimiques avec d'autres atomes, tandis que la plupart des électrons, étroitement liés à leur noyau, sont pratiquement gelés; les pseudo-potentiels éliminent simultanément les électrons internes sans importance et le potentiel nucléaire responsable de leur liaison. 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 [8].

Le but de ce chapitre est de mettre en évidence et d'expliquer l'un des méthodes de calcul des structures des bandes électronique, c'est la méthode utilisée dans nos calculs qui est la méthode du pseudo-potentiel.

### I.2. La méthode du pseudo-potentiel :

La technique du pseudo-potentiel [9-12] s'est avérée, depuis son introduction, très efficace dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides.

Le concept du pseudo potentiel a été introduit dans les années (1934) par Fermi lors de ses études d'états atomiques des couches minces pour l'étude des niveaux atomiques observés.

Dans les années qui succédèrent, Hellman [13] a proposé une approximation du pseudo potentiel qui puisse être utilisée dans la détermination du pseudo-potentiel énergétique dans les métaux alcalins [14]. En (1959) Phillips et Kleinman ont formulé la théorie du pseudo potentiel basée sur la méthode des ondes planes orthogonales {OPW}[15]. L'idée présentée par Fermi est de simplifier les calculs de la structure électronique en éliminant les états du cœur, et remplacement du fort potentiel réel des ions par un potentiel d'électrons de valence plus faible.

Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valence loin du cœur, et on obtient par effet d'annulation un potentiel faible ou "pseudo potentiel" [16].

L'avantage de cette méthode est que seuls les électrons de valence sont pris en compte. les électrons du cœur sont supposés « gelés » et seuls les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électronique. Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valences loin du cœur. L'effet d'annulation de Phillips et Kleinman [17, 18] se traduit par une faible probabilité ou un « pseudo-potentiel ».

Le pseudo-potentiel peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres (N.F.E.M) ou toute autre méthode standard pour résoudre l'équation de Schrödinger.

Cette méthode a été spécialement appliquée pour calculer les structures électroniques des solides et des liquide, les interactions électron-phonon, la supra conductivité, les vibrations des réseaux, les liaisons et structures cristallines... etc [19].

### I.3. Le formalisme mathématique :

La notion mathématique de la méthode pseudo potentiel est donnée par la fonction d'onde  $\psi$  qui décrit le cristal. Cette fonction est donnée par la somme d'ondes planes  $\phi$  et des états atomiques occupés du cœur  $\phi_c$  c'est-à-dire :

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

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

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

Alors la solution pour  $b_c$  rapporte :

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

On trouve l'énergie correcte  $E$  en substituant l'expression de  $\psi$  dans 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:

$$H\psi = H\left(\phi - \sum_C \langle \phi_C | \phi \rangle \phi_C\right) = E\left(\phi - \sum_C \langle \phi_C | \phi \rangle \phi_C\right) \quad (\text{I-5})$$

$$H\phi - H \sum_C \langle \phi_C | \phi \rangle \phi_C = E\phi - E \sum_C \langle \phi_C | \phi \rangle \phi_C \quad (\text{I-6})$$

$$H\phi + \sum_C (E - E_C) \langle \phi_C | \phi \rangle \phi_C = E\phi \quad (\text{I-7})$$

$$H\phi_C = E_C \phi_C \quad (\text{I-8})$$

Avec 
$$V_R \phi = \sum_C (E - E_C) \langle \phi_C | \phi \rangle \phi_C \quad (\text{I-9})$$

$V_R$ : représente le potentiel répulsif positif.

Donc

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

Si l'énergie est séparée en énergie cinétique et en potentiel attractif  $V_C$ :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_C \quad (\text{I-11})$$

L'équation (I-10) devient :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_C + V_R\right)\phi = E\phi \quad (\text{I-12})$$

Où :

$$p^2 = -\hbar^2 \Delta \quad (\text{I-13})$$

Donc

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_C + V_R\right)\phi = E\phi \quad (\text{I-14})$$

Alors

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

Où :

$$V_P = V_R + V_C \quad (\text{I-16})$$

$V_P$ : représente le pseudo potentiel car c'est la somme d'un potentiel attractif  $V_C$  et  $V_R$  un potentiel répulsif et devient faiblement attractif dans la région du cœur faiblement répulsif dans la région des électrons de valence [20, 21].

#### I.4. Caractéristique du pseudo-potentiel :

L'opérateur pseudo-potentiel  $V_{ps}$  qui n'a pas d'expression locale  $V_{ps}(r)$ , pour le connaître et l'introduire dans les calculs, il suffit de disposer de ses éléments matriciels déterminés sur une base complète de fonctions [22].

$$\psi V_r \psi = \sum_c (E_v - E_c) \left| \int dr \psi^* \psi \right|^2 \quad (I-17)$$

Etant donné que  $E_v$  est légèrement supérieure à  $E_c$ , donc  $E_r$  est toujours positif ainsi  $V_{ps} = V_c + V_r$  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 [23]:

$$V_r = V(r; r_0) = \sum_c (E_v - E_c) \phi_c(r) \langle \phi_c(r) | \phi_v(r) \rangle \quad (I-18)$$

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

Si on tient compte de l'effet du cœur, le potentiel devient non local [24].

#### I.5. Les modèles du pseudo-potentiel :

Le pseudo-potentiel a une large application comme une méthode du calcul pour obtenir la structure de bandes d'un cristal. Ce qui fait que des modèles et des potentiels empiriques furent utilisés pour «ajuster» les propriétés observées et résoudre ensuite l'équation de Schrödinger [25].

Il existe deux modèles du pseudo-potentiel: le pseudo-potentiel local (EPM local) et le pseudo-potentiel non local (EPM non local).

##### I.5.1. Le modèle local :

Ce modèle est le plus utilisé dans le calcul de la structure de bandes des semi-conducteurs, il dépend de la variable  $\mathbf{r}$ . Donc le pseudo-potentiel indépendant de l'effet du cœur est négligeable [17]. Dans cette approche, il ya plusieurs formes des potentiels ont été proposées :

**I.5.1.a. Le premier modèle :**

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

Dans ce cas, le modèle probable sera [26]:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ \frac{-Z_e}{r_c} & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-19})$$

Où :

$Z_e$  : la valence atomique.

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

**I.5.1.b. Le 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" [27] étant le potentiel des cœurs inoccupés présenté sous la forme suivante [22, 28]:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ 0 & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-20})$$

**I.5.1.c. Le troisième modèle (Appelé modèle Heine et Abarenkov) :**

Ce modèle introduit plus de flexibilité pour « fitter » les données atomiques [26] en utilisant un potentiel A considéré comme constant dans la région du cœur, dans ce cas la forme du potentiel sera [29]:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ A & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-21})$$

**I.5.2. Le 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 pseudo-potentiel local ne donne pas de bons résultats concernant la densité de charge de quelques composés [30, 31]. Cette approche a fait son apparition à partir des années 1976 [32, 33] pour apporter une correction de la dépendance énergétique du potentiel répulsif.

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. Elle est déterminée pour chaque moment angulaire ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) et, par conséquent, est donnée par la relation suivante :

$$V_{nl}(r, E) = \sum_{i=0}^{\infty} A_i(E) f_i(r) P_l \quad (\text{I-22})$$

- $A_1(E)$  : est la profondeur du puits de potentiel.
- $f_1(r)$  : est une fonction simulant l'effet du cœur.
- $P_l$  : est la projection de la  $l$ -ième composante du moment angulaire.

**Remarque:** il existe plusieurs modèles selon le choix de  $f_1(r)$  [14].

#### I.5.2.a. La fonction de Heine Abarenkov :

La forme carrée de la fonction de Heine et Abarenkov, est très utilisée à cause de sa simplicité [18, 35] :

$$f(r) = \begin{cases} 1 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \quad (\text{I-23})$$

Où  $r_c$  est le rayon du cœur ionique.

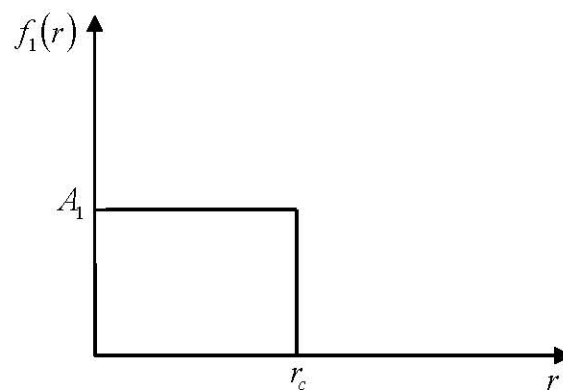


Figure I-1: Fonction de Heine-Abarenkov.

#### I.5.2.b. La fonction de Gauss [36-39] :

C'est le modèle le plus réaliste, il s'approche de l'expérience c'est-à-dire que ses résultats convergent vers ceux trouvés expérimentalement.

Dans ce modèle 
$$F(r) = \exp(-r/r_c)^2 \quad (\text{I-24})$$

La forme du pseudo-potentiel (voir figure I-2-c) est :

$$V_{NI} = A_I \exp(-r/r_c)^2 \quad (\text{I-25})$$

Avec  $A_I$  : la profondeur du puits.



$r_c$  : le rayon du cœur ionique.

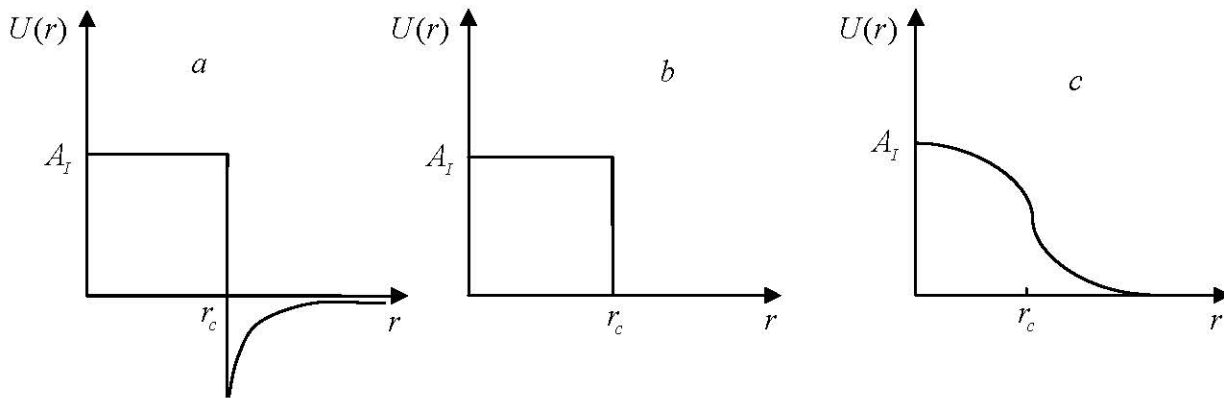


Figure I-2: Les modèles du pseudo-potential non local [40].

### I.6. Transférabilité du pseudo-potential :

Le pseudo-potential doit reproduire le calcul tous électrons dans l'environnement dans lequel il a été généré mais on voudrait qu'il reproduise aussi des calculs tous électrons dans différents environnements. On veut donc qu'il ait la meilleure transférabilité possible. La transférabilité d'un pseudo-potential dépend de:

- la valeur des rayons de coupure.
- la linéarisation du terme d'échange-corrélation cœur -valence.
- l'approximation coeur-valence sous jacente à la construction du pseudo-potential.
- la transformation de la forme semi-locale en une forme totalement séparable du pseudo-potential.

La transférabilité du pseudo-potential doit être vérifiée avant toute utilisation. la façon la plus simple d'augmenter la transférabilité d'un pseudo-potential est de réduire le rayon de coupure des fonctions d'onde [16].

### I.7. La méthode empirique des pseudo-potentiels (EPM) :

Il s'agit d'une approche dérivée de la méthode des pseudo-potentiels décrite précédente cette méthode appliquée avec succès aux semi conducteurs de structure diamant et de structure zinc blende [17, 18, 25, 34]. Dans cette méthode empirique du pseudo-potential, la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelque terme de  $V(G)$  que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux. L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de formes  $V(G)$  du pseudo-potential [17, 18].

$V_p(r)$  Présenté par la superposition linéaire des pseudo-potential atomiques [18, 34- 41]:

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

R: est un vecteur du réseau direct.

$\tau$ : est le vecteur de translation du réseau direct.

Dans le réseau réciproque, le potentiel  $V_p(r)$  prend la forme suivante [18, 34]:

$$V_p(r) = \sum_G S(G) V_a(G) \exp(-iG.r) \quad (\text{I-27})$$

$V_a(G)$ : est le facteur de forme.

$S(G)$  est le facteur de structure donné par [20, 34]:

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iG.r) \quad (\text{I-28})$$

Où  $N_a$  est le nombre des atomes de base.

La fonction d'onde  $\psi_{n,k}(r)$  et les valeurs d'énergie de bandes  $E_n(k)$  sont les solutions de l'équation:

$$\left[ \frac{P^2}{2m} + V_p(r) \right] \psi_{n,k}(r) = E_n(K) \psi_{n,k}(r) \quad (\text{I-29})$$

Où  $n$  indique l'indice de la bande.

$V_p(r)$ : est le fonction de pseudo-potentiel.

$\psi_{n,k}(r)$ : Sont les fonctions d'ondes de Bloch qui peuvent être développées en une série d'ondes planes [19].

### I.8. La méthode de calcul :

La procédure de calcul de la méthode EPM est illustrée dans le diagramme suivant [14, 22-23, 40]:

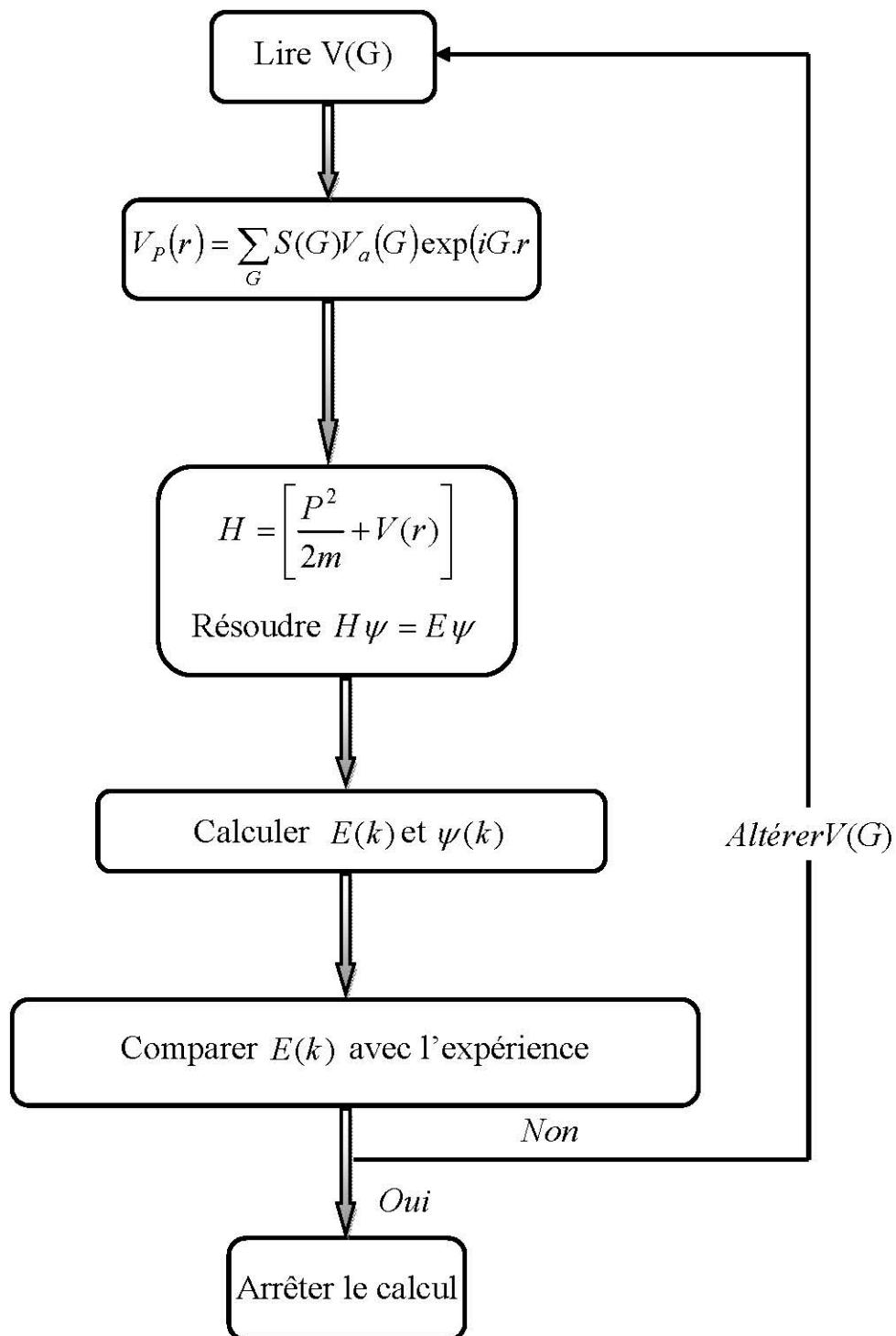


Figure I-3: Organigramme de la procédure de calcul par E.P.M.

L'approximation du pseudo-potential 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 [2].

D'autres méthodes des pseudo-potentiels 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 pseudo-potential du premier principe, utilisée dans le calcul de l'énergie totale et les propriétés structurales des solides [23].

## Références :

- [1] N. Harchaoui, thèse de doctorat, Université Mouloud Mammeri de Tizi-ouzou, (Algérie), 2010.
- [2] L. Hannachi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie), 2010.
- [3] H. Hellmann, J. Chem. Phys. **3**, 61 (1935).
- [4] W. A. Harrison, Solid State Theory (Mc-Graw-Hill, New York), 1970
- [5] G. Frenking, I. Antes, M. Bohme, S. Dapprich, A. W. Ehlers, V. Jonas, A. Neuhaus, M. Otto, R. Stegmann, A. Veldkamp, and S.F. Vyboishikov, Pseudo potential calculations of Transition Metal Compound: Scope and Limitations, Rev Com Chem. **8**, 63 (1996).
- [6] C. F. Melius and W. A. Goddard III, Phys. Rev. **A10**, 1528 (1974)
- [7] Gennady L. Gutsev, Numerical Pseudo potentials within DV- $X_\alpha$  Framework, University of Florida Gainesville, FL 32611, (USA)
- [8] A. Filippetti, University of Cagliari, Monserrato, Italy; G. B. Bachelet, University di Roma 'La Sapienza' Roma, Italy, (2005).
- [9] P. Y. Yu and M. Cardona Fundamentals of Semiconductors and Materials Properties, Springer Verlag (2001).
- [10] C. Herring, Phys. Rev. **57**, 1169 (1940).
- [11] D. Brust, J. C. Phillips and F. Bassani, Phys. Rev. Lett. **9**, 94 (1962).
- [12] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. **B14**, 552 (1976).
- [13] H. Hellmann, W. Kassatotschkin, Acta Physicochim. U.R.S.S. **5**, 23 (1936).
- [14] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006
- [15] P. J. H. Denteneer, the pseudo potential density functional method applied to semiconducting crystals, University Eindhoven. **13**. (1987).
- [16] R. Nicolas, Rapport sur « ACTINIDES ET TERRES RARES SOUS PRESSION: APPROCHE PSEUDOPOTENTIEL », commissariat à l'énergie atomique, ile de France. (2002).
- [17] S. Yousfi, mémoire de magister, Université. M'sila, (Algérie) 2004.
- [18] H. Zenasni, mémoire de magister, Université. Tlemcen, (Algérie) 2008.
- [19] N. Talbi, mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie) 2012.
- [20] N. Bouarissa, J. Phys. Chem. Solids **61**, 109 (2000).
- [21] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. **72**, 387. (2001).
- [22] S. Bacha, thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba, (Algérie), 2014.
- [23] W. Kara Mohamed, thèse de doctorat, Université Mohamed khider-Biskra, (Algérie), 2012.
- [24] G. Böhan, K. Unger, Physics State Solide (b), J. Phys. **216**, 961 (1999).
- [25] S. Ouendadji, thèse de doctorat, Université d'Annaba, (Algérie) 2010.
- [26] R. Mouici, mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie), 2012.
- [27] J. C. Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. **116**, 287. (1959).

- [28] A. Oualdine, mémoire de magister, Université Mohamed Boudiaf-Oran, (Algérie), 2010.
- [29] V. Heine, I. Abarankov, *Phil. Mag. J. Phys.* **9**, 451 (1964).
- [30] J. C. Phillips and K.C. Pandey, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 787 (1973);
- [31] J. C. Phillips and L. Kleinman, *Phys. Rev.* **116**, 287 (1956).
- [32] P. K. Lam and M. L. Cohen, *Phys. Rev.* **B25**, 6139 (1982).
- [33] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1582 (1973);  
J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **32**, 674 (1974);  
J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, *Phys. Rev.* **B10**, 5095 (1974).
- [34] N. Y. Aouina, mémoire de magister, Université de M'sila, (Algérie), 2003.
- [35] I. Abarenkov and V. Heine, *Phil. Mag.* **13**, 529. (1965).
- [36] M. A.Gell, D. Ninno, M. Jaros, D. J. Wolford, T. F. Keuch, and J. A. Bradley *Phys. Rev.* **B35**, 1196 (1987).
- [37] M. L. Cohen and V. Heine, *Solid State Physics* 24, Eds, H. Enrenreich, F. Seitz and D. Turnbull, Academic press, New-York (1970).
- [38] H. Nara and T. Kobayashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **41**, 1429 (1976).
- [39] H. Nara and A. Morita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **21**, 1852 (1966).
- [40] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [41] F. Barka, mémoire de magister, Université de M'sila, (Algérie), 2004.

## *Chapitre II*

### *Les liaisons chimiques*

## Chapitre II

### Les liaisons chimiques

#### II -1-Introduction :

La matière peut exister sous trois états : L'état gazeux, l'état liquide et l'état solide. La forme sous laquelle se trouve la matière est déterminée par les interactions entre ses particules constitutives (atomes, molécules ou ions).

Les liquides et les gaz sont des fluides, déformables sous l'action de forces très faibles, ils prennent la forme du récipient qui les contient. Les solides ont une forme propre, leur déformation exige des forces importantes.

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 amorphe :

C'est l'état où la distribution des atomes ne présente aucun ordre tout au moins que l'ordre ne porte que sur un nombre limité d'atomes. Il s'agit alors d'un ordre à courte distance, d'environ quelques dizaines d'angströms [2].

Solide amorphe Lorsqu'on refroidit rapidement un liquide visqueux, on assiste à la formation d'une structure rigide avant que les molécules n'aient eu le temps de s'orienter de façon régulière et ordonnée. Il s'agit d'un liquide désordonné figé par le froid. De tels matériaux sont appelés solides amorphes, ou solides vitreux. Les solides amorphes se distinguent par l'absence d'un point de fusion net. Un exemple typique de solide de ce type est le verre, obtenu par solidification de la silice fondue. De nombreux polymères donnent lieu à l'état solide à la formation de solides amorphes [3].

#### II -3-Structure cristallin :

Dans un solide cristallin, les molécules, atomes ou ions constitutifs se rangent les uns par rapport aux autres selon une position géométrique régulière. Le solide est ainsi constitué par la répétition régulière de motifs structuraux, Il est possible de déterminer expérimentalement la position des atomes, ions ou molécules dans un solide cristallin en dirigeant des rayons X sur le cristal. Les électrons de la matière qui reçoivent ces ondes électromagnétiques réémettent des ondes et le signal reçu par l'observateur contient des informations exploitables qui permettent de déterminer la position des atomes dans le solide [3].



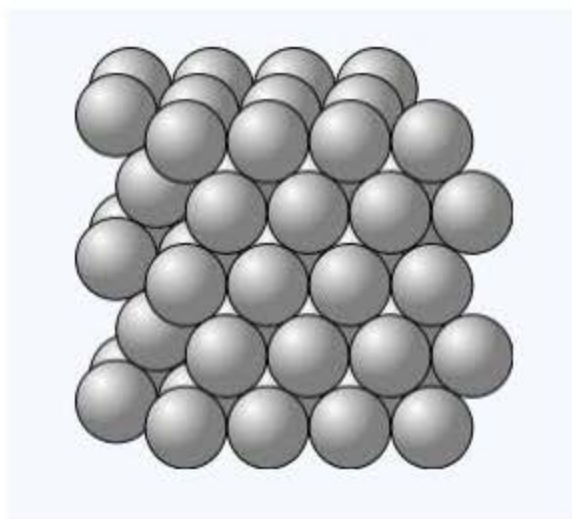


Figure II-1 : Arrangement des atomes dans un cristal [1].

#### II -4- Les liaisons chimiques :

Tout phénomène chimique suppose une union ou une séparation d'atomes. Il est important de découvrir comment les atomes se combinent entre eux et pourquoi leur nombre dans une molécule ou un ion poly atomique est limité. Pour répondre à ces questions, il faut faire appel à la structure électronique.

Les combinaisons chimiques sont dues à l'attraction qu'exercent certains atomes sur les électrons de leurs voisins. Si l'attraction est suffisamment forte, les électrons quittent leurs atomes d'origine et viennent compléter les couches de l'atome récepteur, mais si cette attraction n'est pas très grande, les électrons sont alors partagés par les atomes sous forme de liaisons chimiques. 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 [4].

#### II -5- Types de liaisons cristallines :

La conservation d'un cristal de sa structure régulière est liée à l'arrangement particulier et ordonné des atomes suivant des interactions établies entre eux garantissant leur cohérence. Les liaisons cristallines sont divisées en deux types :

##### II -5-1- Les liaisons fortes :

Ce type de liaison, dit aussi liaison intramoléculaire, dépend de la différence d'électronégativité, plus l'électronégativité est importante, plus l'électron est attiré par un atome particulier et plus la liaison a un caractère ionique. Si l'électronégativité est faible, la liaison est covalente [5].

##### II -5-1-1- Les liaisons covalents :

Les liaisons de covalence sont des liaisons relativement solides. On peut évaluer leur robustesse soit en mesurant la constante de la force qui tend à ramener à sa position d'équilibre un

atome lié par covalence qui en a été écarté, soit en déterminant l'énergie nécessaire pour rompre la liaison ; il faudra alors distinguer le cas de la rupture homolytique du cas de la dissociation ionique.

Cette liaison est une force dirigée; elle maintient une orientation fixe dans l'espace des atomes constituant une molécule ou un ion complexe les uns par rapport aux autres. Elle permet donc de retrouver la stéréochimie classique en la précisant et par conséquent de prévoir l'existence de stéréo isomères. L'étude d'un grand nombre de structures permet de mesurer des « rayons de covalence » [6].

### II-5-1-2-Les liaisons ioniques :

La liaison ionique est basée sur le transfert effectif d'un à plus d'un électron de la couche Périphérique du métal fort sur la couche périphérique du non-métal fort.

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 chimique) 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 [7].

### II-1-1-3-Les liaisons métalliques :

La liaison métallique [8-10] est un type de liaison chimique, la liaison qui permet la cohésion des atomes d'un métal. Une liaison métallique concerne un très grand nombre d'atomes. Ces atomes mettent en commun un ou plusieurs électrons, appelés « électrons libres » ; ces électrons sont à l'origine de la conductivité électrique des métaux (Fig. II-2). Par rapport à la liaison covalente, on peut voir les électrons libres comme des électrons délocalisés à toute la pièce métallique.

Les cristaux métalliques se caractérisent par des liaisons plus faibles que celles dans les cristaux ioniques ou covalents. Ces matériaux sont moins durs et fondent à basse température.

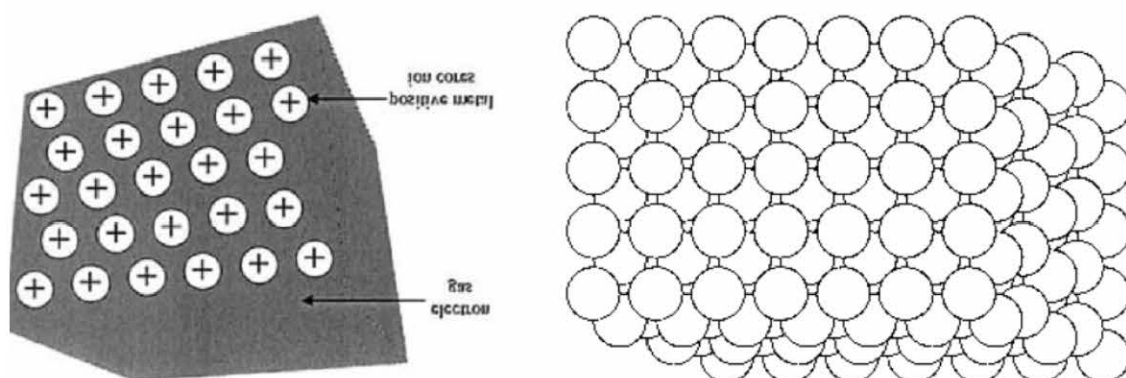


Figure II-2: La liaison cristalline type métallique [8]

**II -5-2- Les liaisons faibles :**

Les liaisons faibles sont des interactions électrostatiques (attraction de charges opposées) entre les molécules voisines (et non plus entre les atomes). Elles agissent donc à des distances plus longues et sont de ce fait plus faibles que les liaisons covalentes. On décrit ici les liaisons hydrogène et les interactions de Van der Waals [11], Cette liaisons:

**II-5-2-1-Les liaisons hydrogènes :**

Les liaisons hydrogène sont en fait des interactions électrostatique de type Dipôle permanent/dipôle induit [12]. L'énergie totale d'une liaison hydrogène est en fait décomposée en plusieurs contributions de nature différente : électrostatique, polarisation, transfert de charge, dispersion,... [13], 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) [14].

**II-5-2-2-Les liaisons de Van der Waals:**

Ces forces ont été nommées en l'honneur du physicien néerlandais Johannes Diderik van der Waals (1837 - 1923), prix Nobel de physique 1910, qui fut le premier à introduire leurs effets dans les équations d'état des gaz en 1873[15].

Les liaisons de van der Waals sont des interactions de faible intensité entre des molécules ou des atomes et agissent à longue portée, comme représenté à la (Fig-II 3) [16]. Ces forces jouent un rôle important dans tous les phénomènes impliquant les forces intermoléculaires car elles sont toujours présentes tout en restant relativement faibles comparées aux forces coulombiennes ou aux liaisons hydrogène [17].

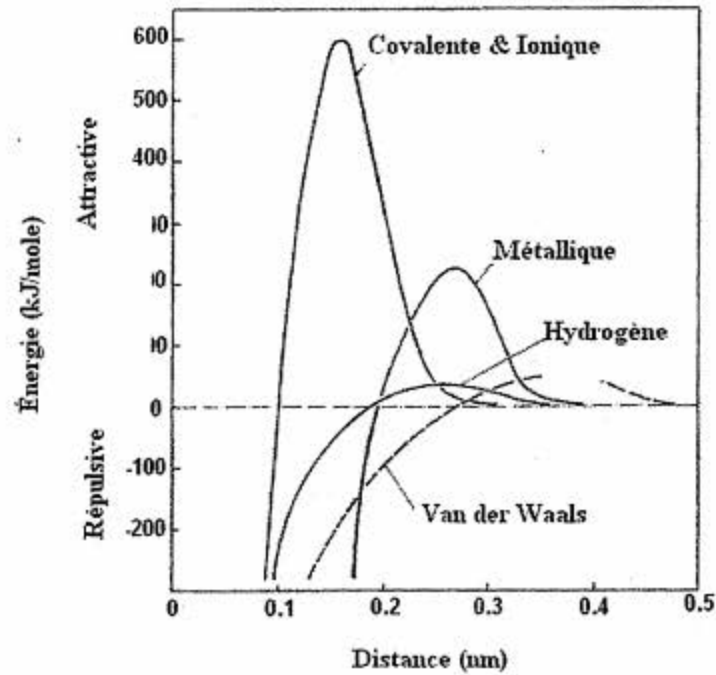


Figure II.3 : Amplitudes et distances d'interaction des principales liaisons interatomiques et intermoléculaires [16].

### II-5-2-3-Les 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 [18].

### II-6-Structure Zinc- blende :

C'est une structure cubique qui comporte deux réseaux cubiques à faces centrées décalés 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 [19], comme indique dans la (Fig II-4).

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 [20].

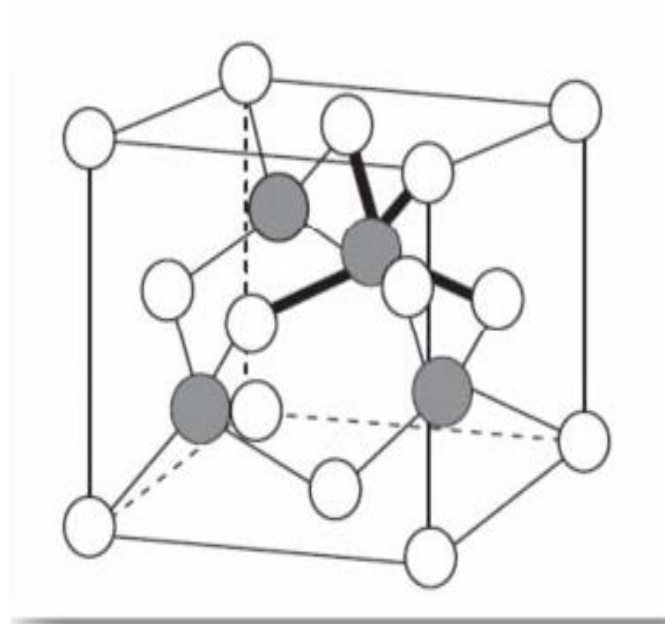


Figure II-4: Structure cubique Zinc blende (Sphalérite).

### II -7-Première zone de Brillouin :

La première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre tronqué (Fig II -5).

#### II -7-1- Les 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.

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

**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 -7-2- Les 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  $\langle 110 \rangle$ . Elle relie le centre de la zone ( $\Gamma$ ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre [21].

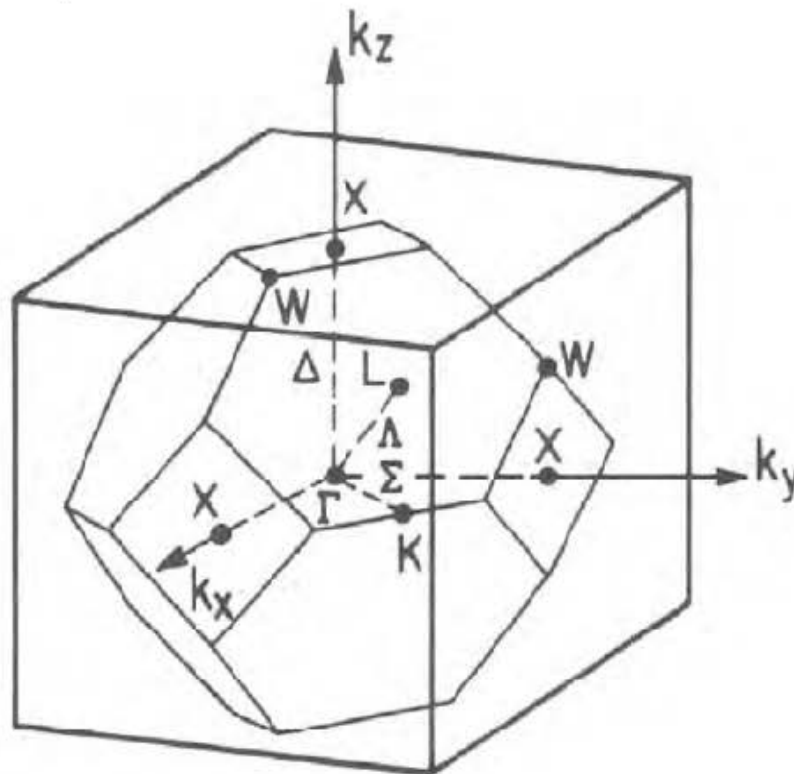


Figure II -5: Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries [21].

**Références:**

- [1] A. Belfar, Cours et Exercices de Cristallographie, Université d'Oran-Mohamed Boudiaf, (Algérie), 2015.
- [2] J. L. Teyssier, H. Brunet, introduction à la physique des matériaux conducteur et semiconducteur, Ed. Dunod, (Paris), 1992.
- [3] B. Fosset, J.-B. Baudin, F. Lahitète, chimie tout-en-un, Dounod, (Paris), 2013
- [4] J. Stratton, S. Madras, J. Gravel, G.Hall. Éléments de chimie moderne. **156**, (1981).
- [5] K. Kouachi, Cours de chimie avec exercices, Université de Béjaia - Abderahmane Mira, (Algérie), 2001.
- [6] J .Amiel, cours de chimie tome1 maitrise de sciences physiques, Dunod, (Paris), **163**, 1969.
- [7]N. Laidaoui, Cours de Chimie organique, Université d'Oran-Mohamed Boudiaf, (Algérie), 2016.
- [8] M. Guymont , Structure de la matière Atomes, liaisons chimiques et cristallographie, Éditions Belin, (Paris), 2003.
- [9] J. D. Patterson, B.C. Bailey, Solid-State Physics, Introduction to the Theory, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2007).
- [10] Sh. S. Li, Semiconductor Physical Electronics, Second Edition, University of Florida, ( USA), Springer 2006.
- [11] <https://barbati.fr/2011/11/17/les-liaisons-faibles>.
- [12] T . Steiner, W. Ange, Chem, **114**, 50, (2002).
- [13] B.T. Holland, L. Abrams , A. Stein, J. Am. Chem. Soc, **121**, 4308.(1999).
- [14] G.A. Jeffrey, Oxford University Press,( USA), 1997.
- [15] [http://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison\\_chimique](http://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison_chimique).
- [16] L. H. Lee, Fundamentals of Adhesion, Plenum Press,(New York), 1991.
- [17] V. F, Petrenko et R. W. Whitworth, Physics of ice, ( New York), 1999.
- [18] H. Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, 4ièm éd. Masson, (Paris), 1998.
- [19] K. Zanion, Semiconductors and Semimetals, R. K. Willardson and C.Beer, AcademicPress, (1967).
- [20] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006
- [21] 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 de charge électronique est l'une des caractéristiques qui découle de la structure de bande, elle est d'une utilité primordiale, lorsque les propriétés chimiques et physiques présentent un intérêt dans les matériaux semi conducteur. Elle nous permet de connaître le type de liaisons établit entre les constituants du matériau, d'où les propriétés optiques et électroniques. Les théoriciens du solide ont consacré leur attention beaucoup plus sur les propriétés électroniques que sur les propriétés structurales. Récemment, avec le développement des moyens de calcul, il y a eu un intérêt pour les propriétés structurales et en particulier les propriétés de liaison des semi-conducteurs et des isolants [1].

Plusieurs méthodes théoriques ont été développées pour l'étude des propriétés chimiques et physiques des matériaux. Cependant la méthode empirique des pseudo-potentiels reste la méthode la plus simple qui offre les résultats les plus compatibles à l'expérience.

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

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

Où

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

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

$$V_P(r) = V_L(r) = \sum_G V(G) S(G) \exp(iGr) \quad (\text{III-2})$$

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 définit par :

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

Où :

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

$E_{ij}^{\text{exp}}$  et  $E_{ij}^{\text{cal}}$  sont respectivement les énergies observées et calculées entre l'état :

$i$  avec  $k = k_i$  et l'état  $j$  avec  $k = k_j$ , du  $m^{ime}$  paire  $(i; i)$  et  $N$  est le nombre de paramètres du pseudo-potentiel 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 MgTe et ZnTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau en ( $\text{Å}^0$ ).

Composés	$a(\text{Å}^0)$	Facteurs de formes (Ryd)					
		$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_a(3)$	$V_a(4)$	$V_a(11)$
MgTe	6.350	-0.3302	0.2038	-0.0285	0.2085	0.0	0.03194
ZnTe	6.1037	-0.2889	0.0	0.051 43	0.016 334	0.1422	-0.1261

L'utilisation de ces paramètres dont les valeurs mentionnées dans le tableau (III-1) nous a permis de calculer les densités de charge dont elles sont des outils efficaces pour prédire les liaisons de nos matériaux.

### III. 2. Calcul de la densité de charge électronique :

Lorsque l'équation de Schrödinger est résolue pour les fonctions d'ondes  $\psi(r)$ , décrivant l'état d'un système :

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

Nous pouvons directement évaluer la densité de charges de l'électron dans une certaine région spatiale.

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

Dans le cas d'un solide, la densité de charges totale s'obtient en sommant sur tous les états  $k$  des  $n$  bandes du cristal

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

Pour une bande spécifique d'indice  $n$ , la densité de charges correspondante s'obtient en sommant sur tous les états  $k$  dans cette bande

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

La densité de charges, dans ce cas est :

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

Le calcul de la densité de charges totale nécessite la connaissance des fonctions d'ondes dans toute la zone de Brillouin. Plusieurs méthodes d'approximation ont été développées dans Le but de réduire le temps de calcul nécessaire. Ainsi, les densités de charges de quelques semi-conducteurs ont été calculées par J. P. Walter et *al.* [3] Ils ont pu calculer la densité de charge en utilisent un model de 3360 point de coordonnées

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

Unités de  $2\pi/a$

Où :  $s, m, n$  : sont des entiers.

Avec les mêmes fonctions d'ondes, Baldereschi [4] a calculé 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 (mean value point), Il a trouvé des résultats similaires à ceux de J. P. Walter avec une différence de 10%. Pour la structure zinc-blende aussi bien pour la structure rock-salt, ce point moyen a les coordonnées suivantes:

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

Chadi et Cohen ont développé le modèle des points spéciaux en démontrant [5] qu'en utilisant uniquement deux point spéciaux, la possibilité de calculer la densité de charge est très grande, ces derniers calculs sont de 1% différents de ceux utilisant un schéma de 71 points.

Ces deux points ont les coordonnées suivantes :

$$2\pi/a (1/4, 1/4, 1/4), 2\pi/a (3/4, 1/4, 1/4)$$

### III. 3. La densité de charge pour chaque bande de valence au point $\Gamma$ :

La densité de charges électroniques a été calculée, en utilisant les fonctions d'ondes obtenues à partir du calcul de la structure de bande électronique. La densité de charge pour chaque bande de valence peut être écrite comme :

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

Avec :

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

le numéro de la bande de valence.

Il est à noter que la plus grande contribution ionique provient de la première bande de valence pour les deux composés MgTe et ZnTe.

*Tableau III-2 : les facteurs d'ionocité*

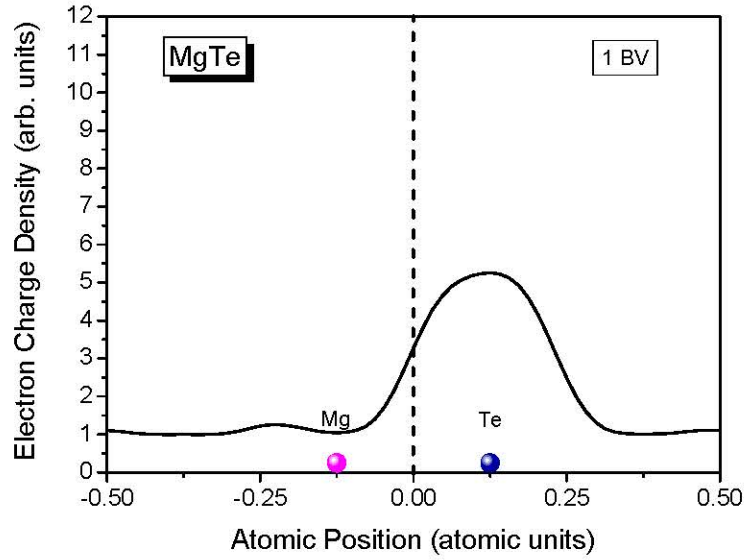
Composés	$f_i$
MgTe	0.554 [6]
	0.525 [7]
	0.579 [8]
ZnTe	0.609 [6]
	0.68 [7]
	0.560 [9]

#### III. 3. 1. La première bande de valence :

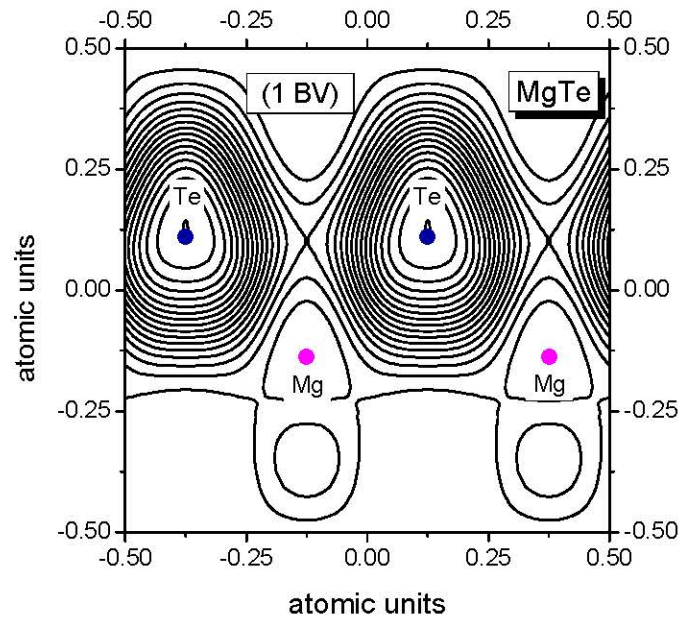
Dans les figures (III-1), (III-2) nous montrons la densité de charges des électrons de la première bande de valence calculée suivant les directions [111] et dans les plans (110) au point  $\Gamma$  pour les composés binaires MgTe et ZnTe. On peut noter que la distribution de la densité de charge est localisée au site anionique (Te) par rapport au site cationique (Mg, Zn). 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 chaque cas du composé binaire, 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'ionocité présent dans la liaison. En pratique, la densité de charge aux sites interstitiels n'est pas égale à zéro, et asymétrique autour du centre de la liaison.

**III. 3. 2. La deuxième bande de valence :**

Les figures (III-3), (III-4) représentent la densité de charges des électrons de la deuxième bande de valence calculée suivant les directions [111] et dans les plans (110) au point  $\Gamma$  pour les composés binaires MgTe et ZnTe 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 (Mg, Zn), mais la densité de charge du composé binaire MgTe est plus importante que celle du composé binaire ZnTe qui est presque nulle, ainsi que celle de la densité de charge dans les sites interstitiels.

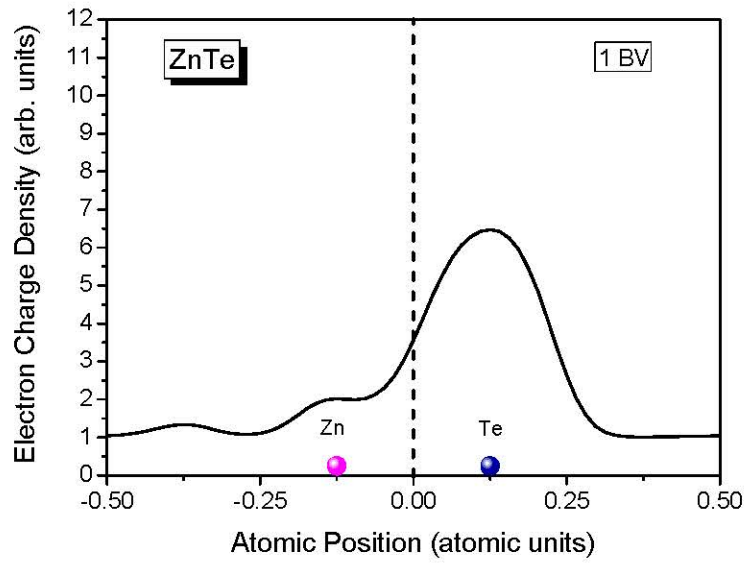


(a)

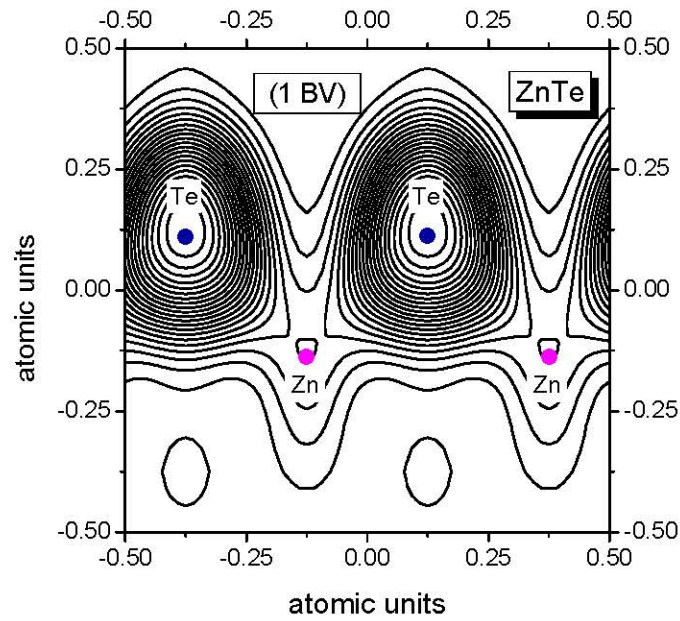


(b)

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

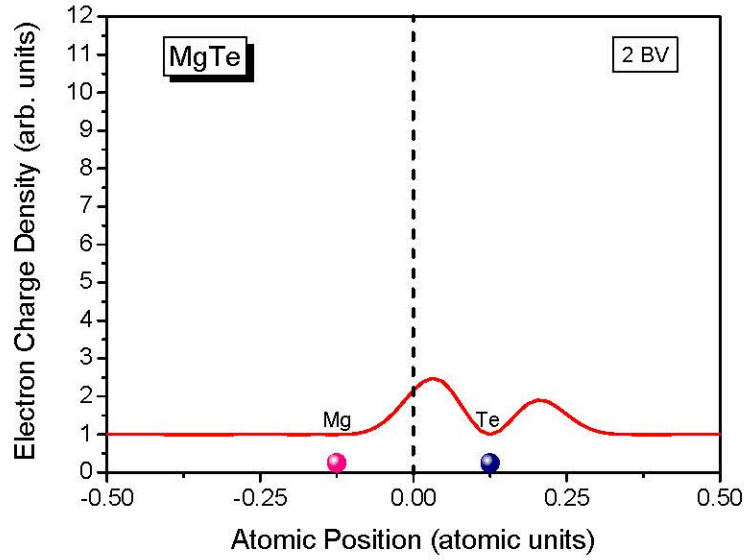


(a)

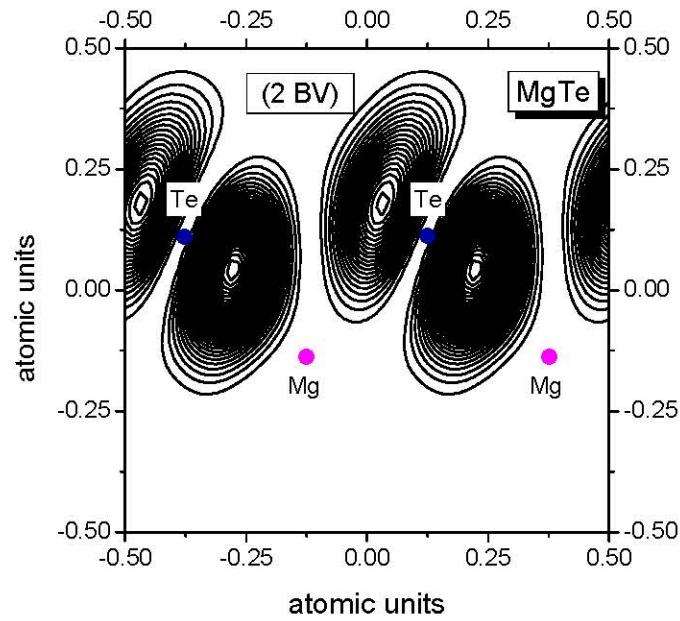


(b)

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



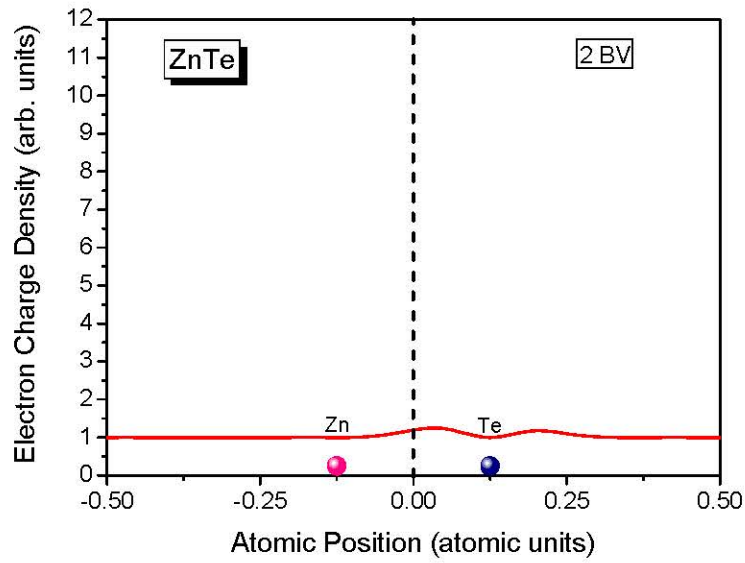
(a)



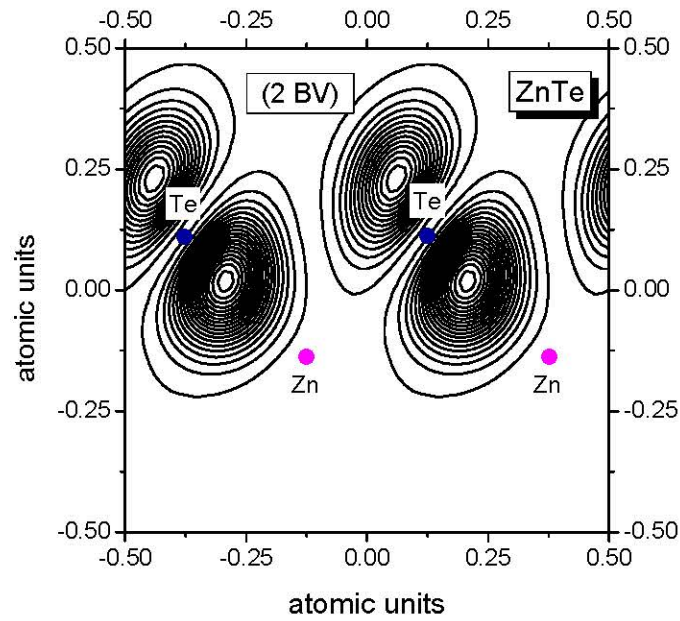
(b)

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





(a)



(b)

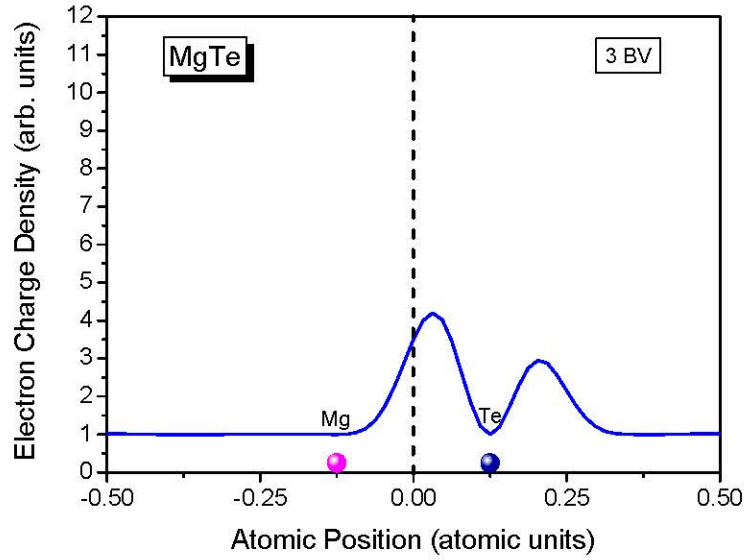
**Figure III-4** : Densité de charges électroniques de la deuxième bande de valence au point  $\Gamma$  du composé ZnTe (a)profil suivant la direction  $[111]$ , (b) contour dans le plan  $(110)$ .

**III. 3. 3. La troisième bande de valence :**

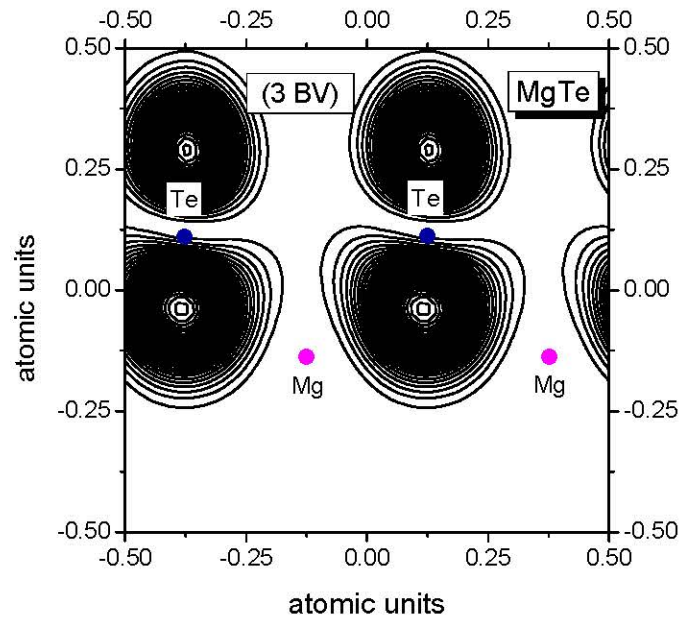
Les figures (III-5), (III-6) présentent la densité de charges des électrons de la troisième bande de valence calculée suivant les directions [111] et dans les plans (110) au point  $\Gamma$  pour les composés binaires MgTe et ZnTe. Nous remarquons que la distribution de la densité de charge est localisée 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 (Mg, Zn) ; mais la densité de charge du composé binaire MgTe est plus bas par rapport à celle du composé binaire ZnTe.

**III. 3. 4. La quatrième bande de valence :**

Dans les figures (III-7), (III-8) nous montrons la densité de charges des électrons de la quatrième bande de valence calculée suivant les directions [111] et dans les plans (110) au point  $\Gamma$  pour les composés binaires MgTe et ZnTe. Nous remarquons 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 (Zn, Mg) ; mais la densité de charge du composé binaire ZnTe est plus bas par rapport à celle du composé binaire MgTe.

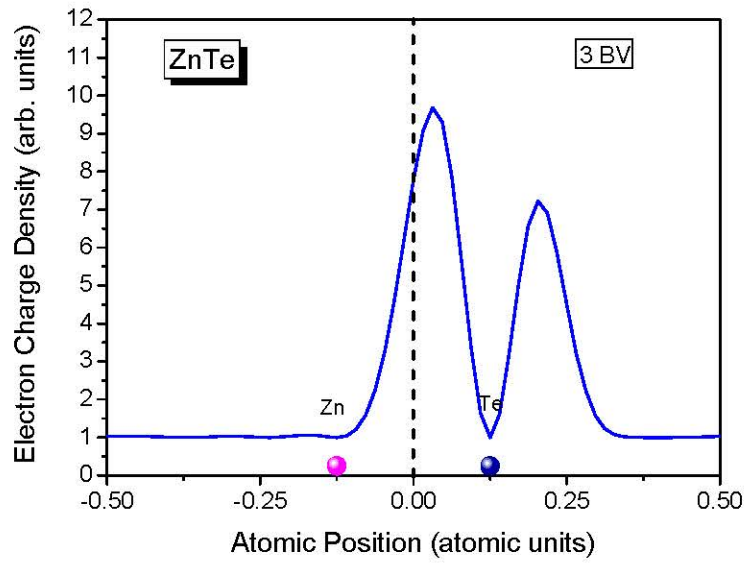


(a)

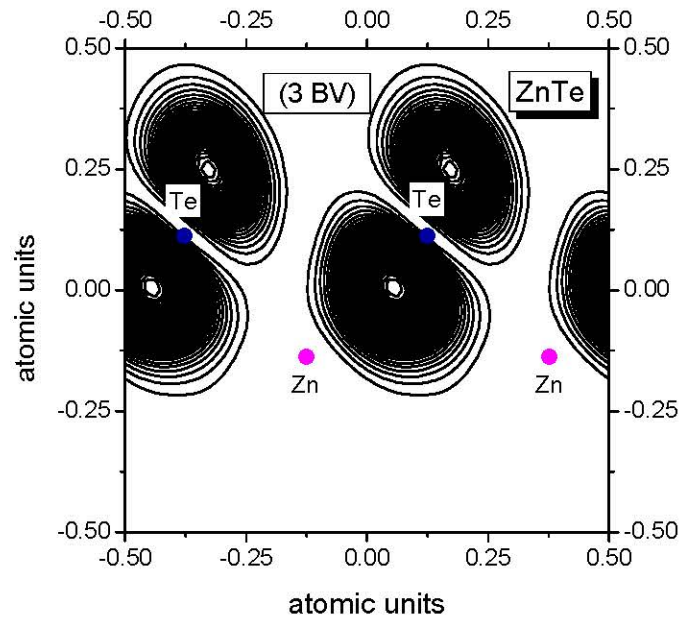


(b)

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

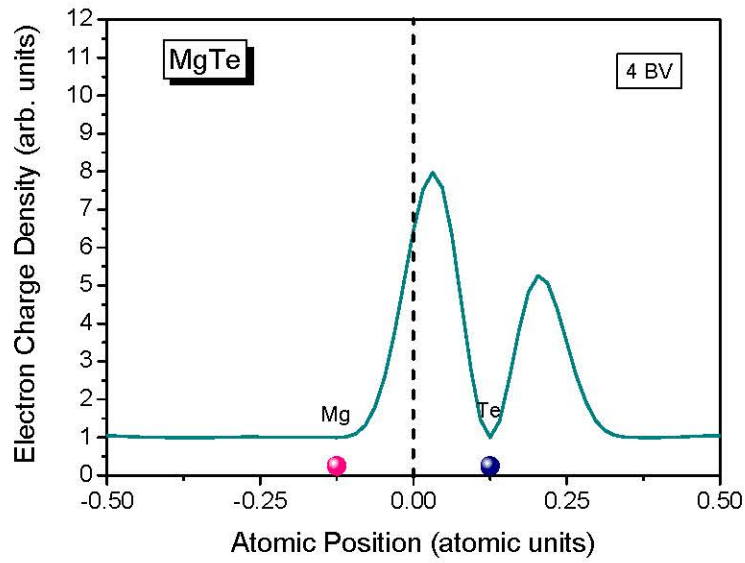


(a)

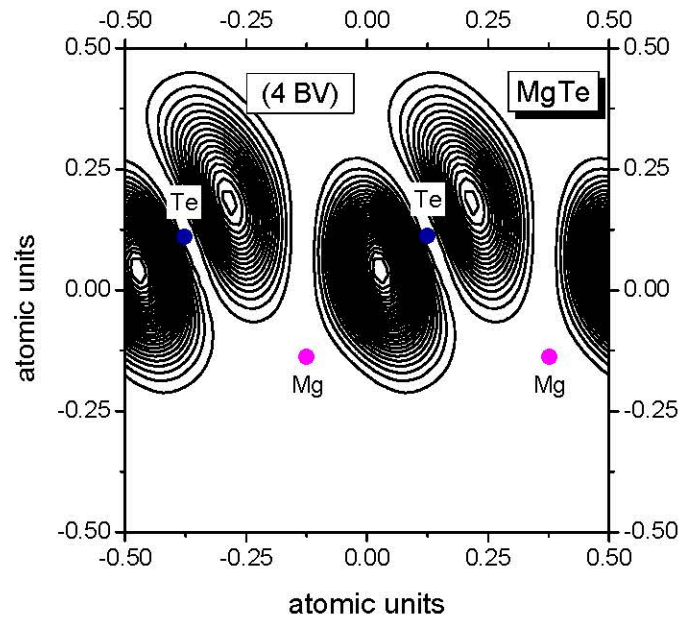


(b)

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

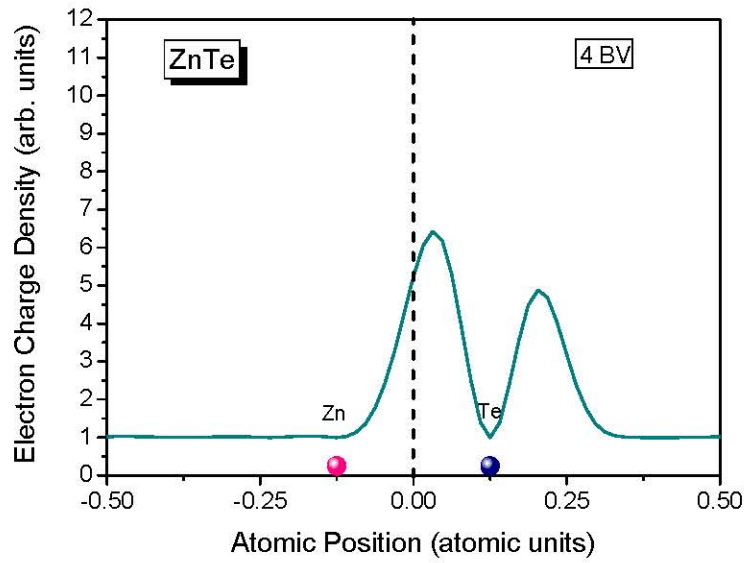


(a)

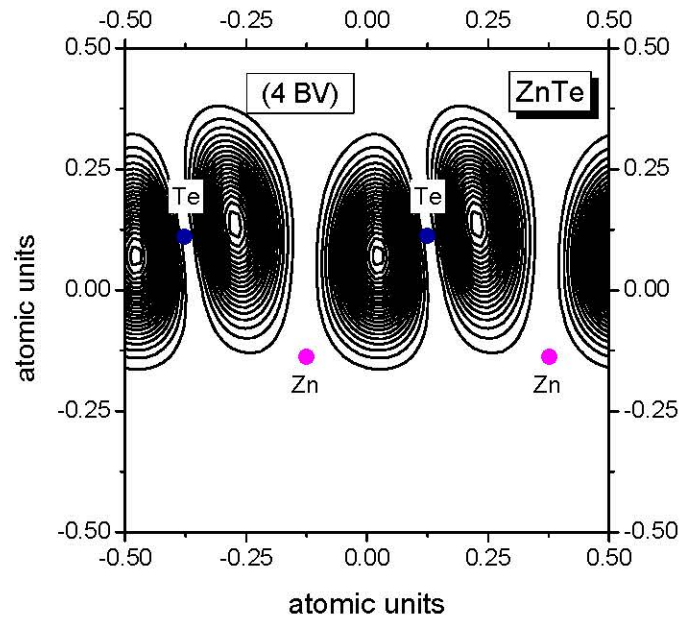


(b)

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



(a)



(b)

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

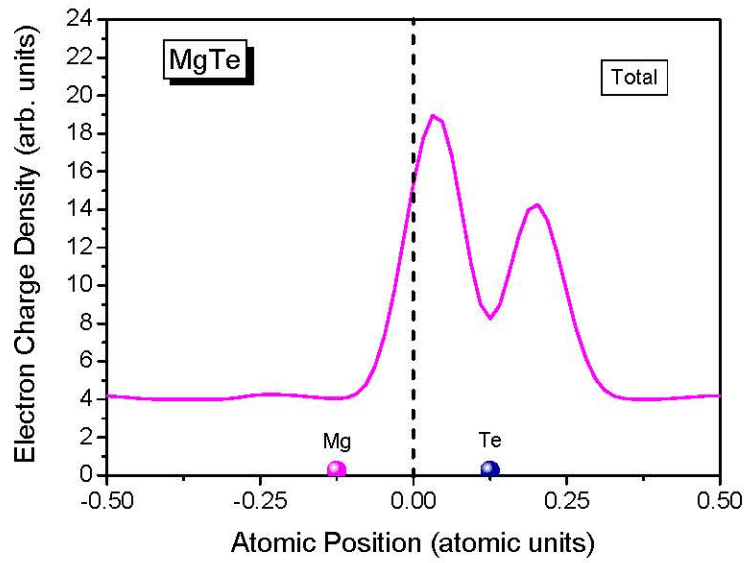
### III. 4. La somme des quatre bandes de valence au point $\Gamma$ des composés binaires :

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.

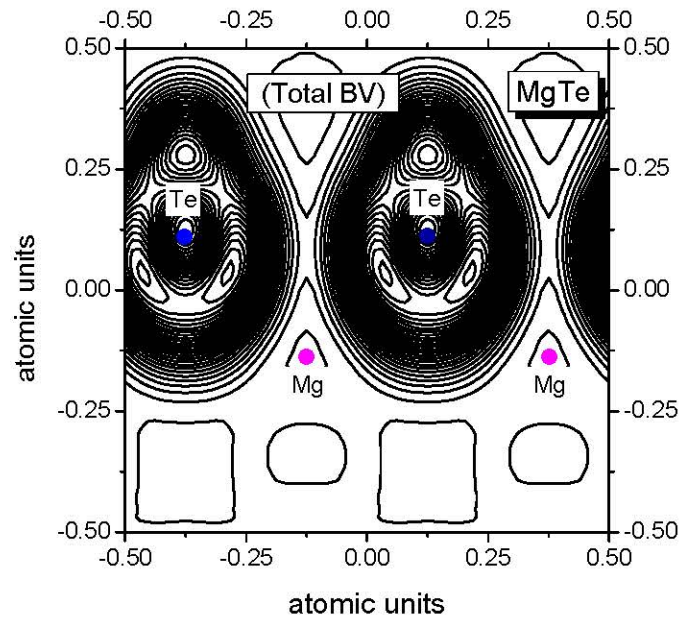
Dans les figures (III-9), (III-10) nous montrons la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  calculée suivant les directions  $[111]$  et dans les plans  $(110)$  pour les composés binaires MgTe et ZnTe. Nous remarquons que ces densité de charge présentent à peu près les mêmes caractéristiques et sont caractérisées chacune par un maximum de charges qui se trouve légèrement déplacé vers le côté de l'anion. Une autre partie de charge significative se trouve localisée au voisinage de l'anion. Au niveau du cation, il existe une charge très faible.

Le déplacement du maximum de la densité de charge vers le côté de l'anion est dû à une différence de potentiel du cation et de l'anion dans chaque cas du composé binaire.

Cependant, la densité de charge électronique est légèrement asymétrique autour du centre de la liaison, ainsi le transfert important de charges 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'ionicité présent dans la liaison. Ceci indique la présence de la liaison mélangée ionique covalente. Pratiquement, il n'y a presque aucune charge dans les régions interstitielles, alors dans notre cas, ZnTe s'avère plus ionique que MgTe étant donné qu'une forte densité de charges entoure le site de l'anion.



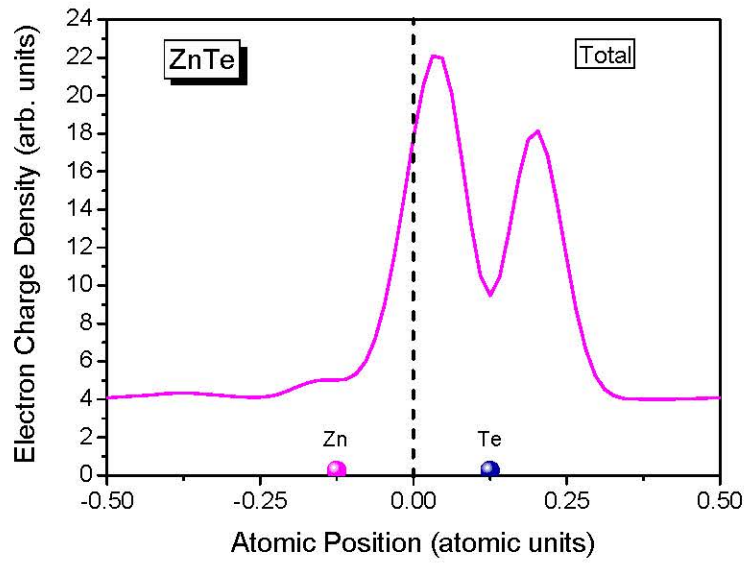
(a)



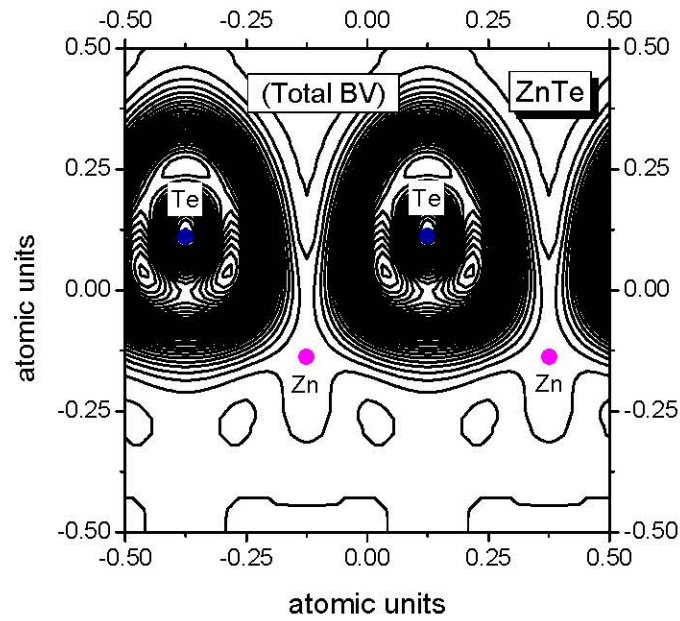
(b)

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





(a)



(b)

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

**III. 5. Profil des quatre bandes de valence et la somme des composés binaires MgTe et ZnTe :**

Dans la figure (III-11) le maximum de la densité de charge est localisé du côté anionique mais avec une grande importance pour le ZnTe que pour le MgTe. Ainsi qu'une quantité de charge est localisé autour du côté anionique (Te) et il n'ya presque aucune charge dans les régions interstitielles. Cette distribution asymétrique autour du centre de la liaison ainsi que le transport important de charge du cation (II) vers l'anion (VI) indique que l'anion possède un potentiel plus fort que le cation (Mg, Zn). Cette situation est différente de celle trouvée dans les semi-conducteurs avec la structure du diamant [10-12] où la densité de charge est concentrée à mi-chemin entre les deux atomes [13]. Cette différence de potentiel est responsable du caractère d'ionicté présent dans l'anion. On note que le décalage de la densité de charge vers l'anion Te est plus important pour le composé ZnTe que pour le composé MgTe. Cela le signifie que le composé ZnTe est plus ionique que le composé MgTe; voir l'ionicté établi par les auteurs, Phillips [6], Garcia *et al.* [7] Al-Douri *et al.* [8] et Adachi [9] dans le tableau III-2.

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

Pour le composé ZnTe, la 2<sup>ième</sup>, la 3<sup>ième</sup> et la 4<sup>ième</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 MgTe. Cette remarque concerne la 2<sup>ième</sup>, la 3<sup>ième</sup> et la 4<sup>ième</sup> bande de valence. 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 MgTe. La situation est inversée pour le composé ZnTe.

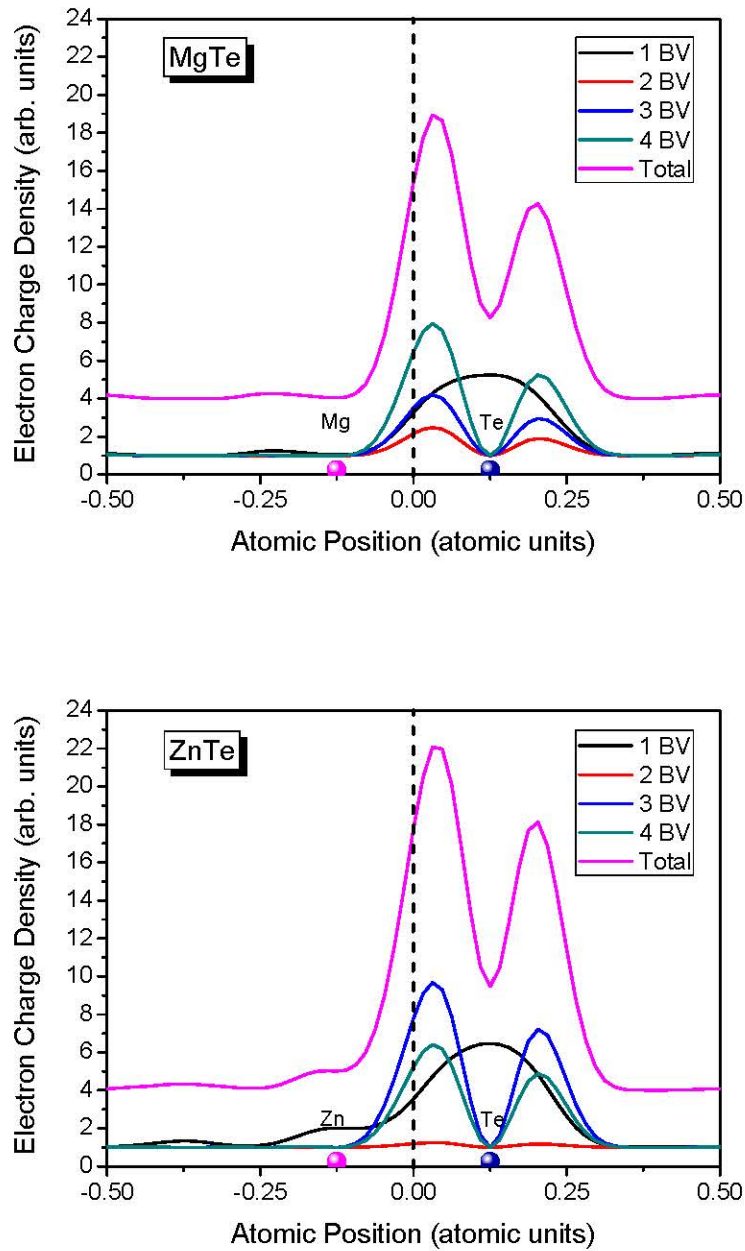


Figure III-11 : Profil de la densité de charges électroniques des quatre bandes de valence et la somme au point  $\Gamma$  des composés binaires MgTe et ZnTe suivant la direction [111].

### III. 6. L'effet de désordre :

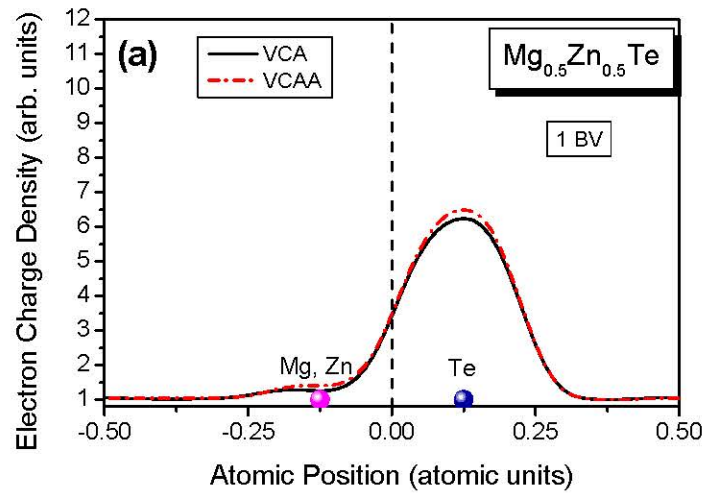
#### III. 6. 1. La première bande de valence :

La figure (III-12) présente la densité de charge électronique de la première bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$  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

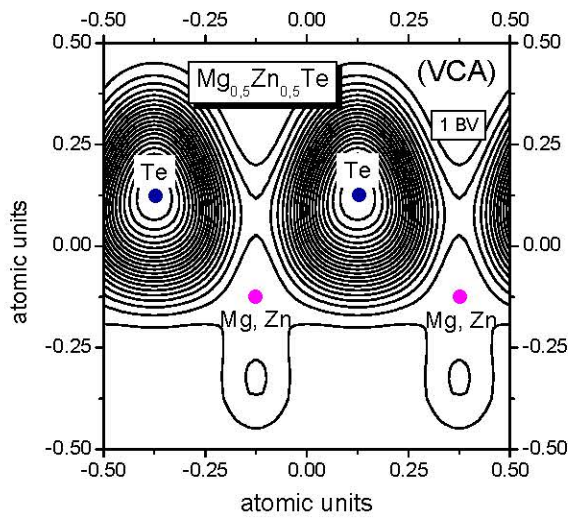
anionique (Te) par rapport au site cationique (Mg, Zn). Pratiquement, la densité de charge dans les sites interstitiels est nulle. L'effet de désordre compositionnel semble n'avoir aucun effet significatif sur la forme de la densité de charge électronique de la première bande de valence pour le profil et le contour.

### III. 3. 2. La deuxième bande de valence :

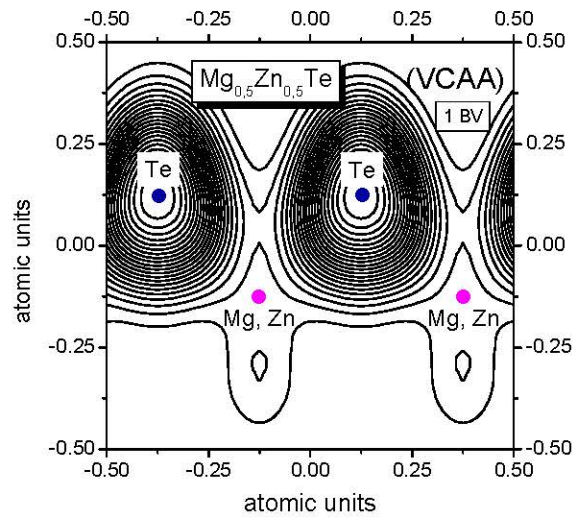
La figure (III-13) présente la densité de charge électronique de la deuxième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$  pour  $x=0.5$ , profil suivant la direction [111] et contour dans le plan (110) sans désordre et avec désordre. Dans la deuxième bande de valence la distribution de la densité de charge est asymétrique autour du 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 (Mg, Zn). Pratiquement, la densité de charge dans les sites interstitiels est nulle. On peut noter aussi que la densité de charge du composé ternaire pour cette bande est moins importante. L'effet de désordre compositionnel est très clair, et fait augmenter la densité de charge électronique.



(a)

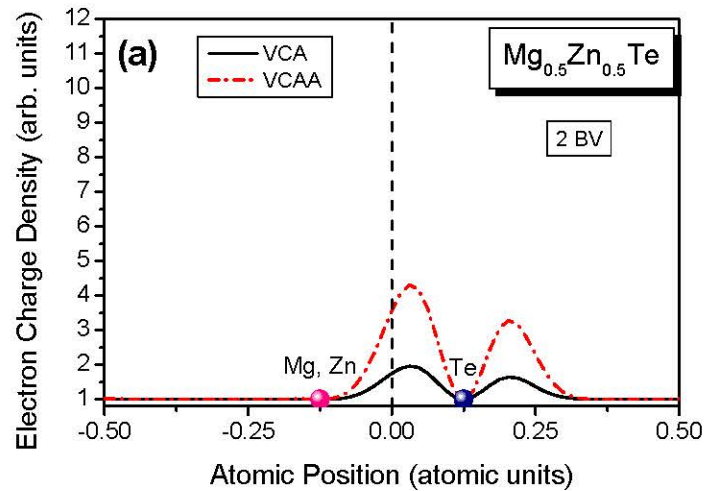


(b)

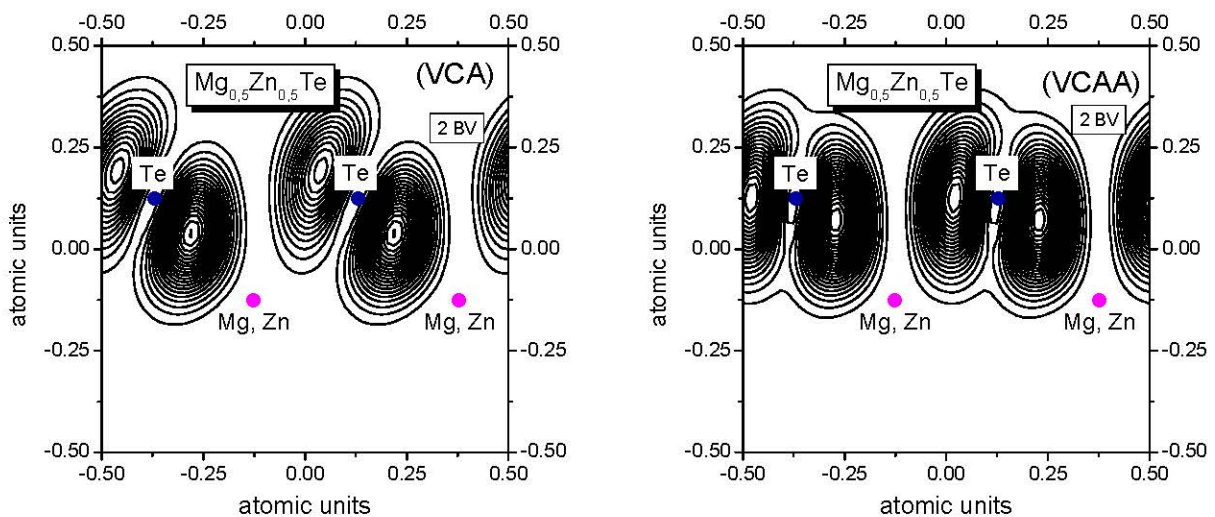


(c)

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



(a)



(b)

(c)

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

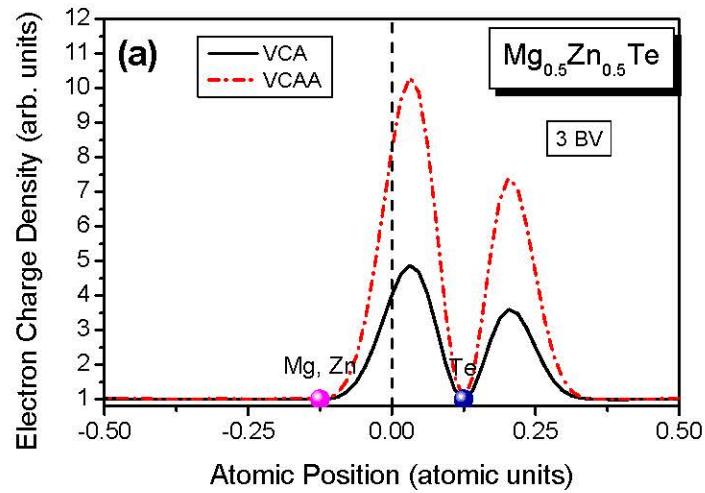
### III. 6. 2. La troisième bande de valence :

La figure (III-14) présente la densité de charge électronique de la troisième bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$  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 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), mais avec une intensité plus importante. La densité de charge

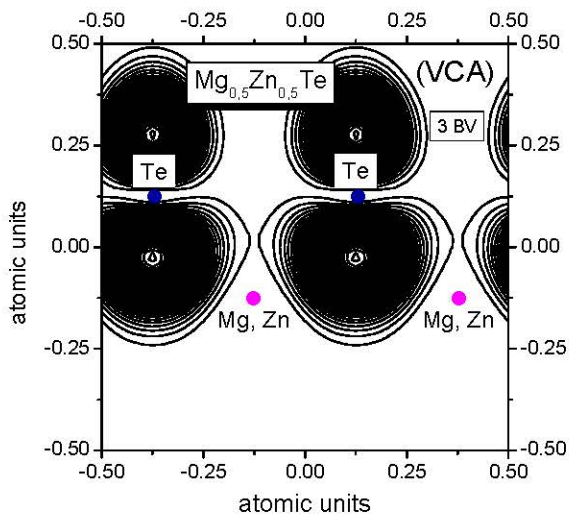
dans les sites interstitiels est presque nulle. L'effet de désordre compositionnel est très important, on observe une augmentation considérable de la densité de charge électronique.

#### III. 6. 4. La quatrième bande de valence :

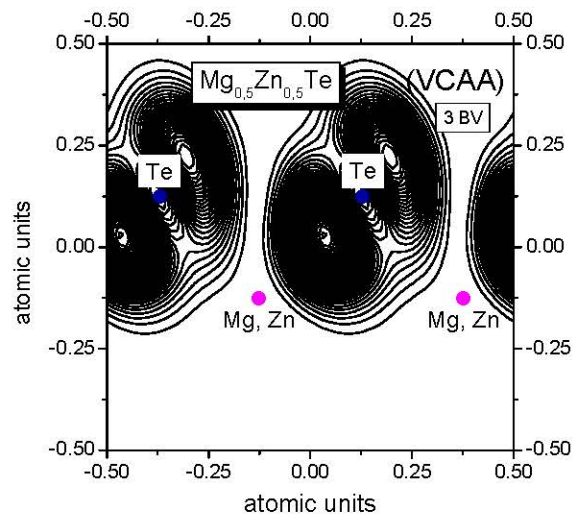
La figure (III-15) présente la densité de charge électronique de la première bande de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$  pour  $x=0.5$ , profil suivant la direction [111] sans désordre et avec désordre. Nous remarquons que la distribution de la densité de charge est centrée au 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 (Zn, Mg), 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.



(a)



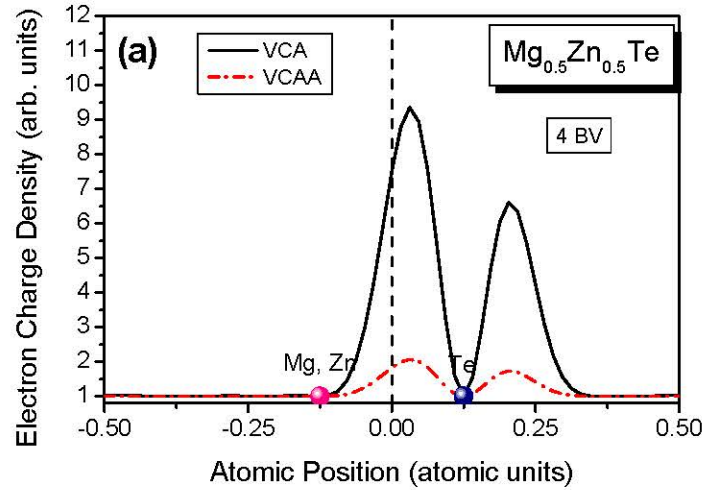
(b)



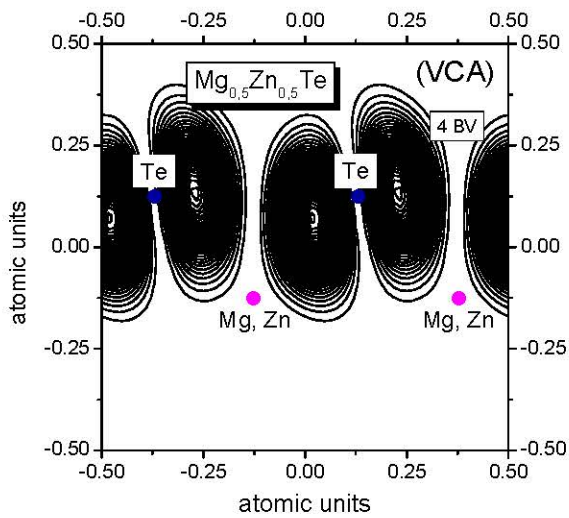
(c)

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

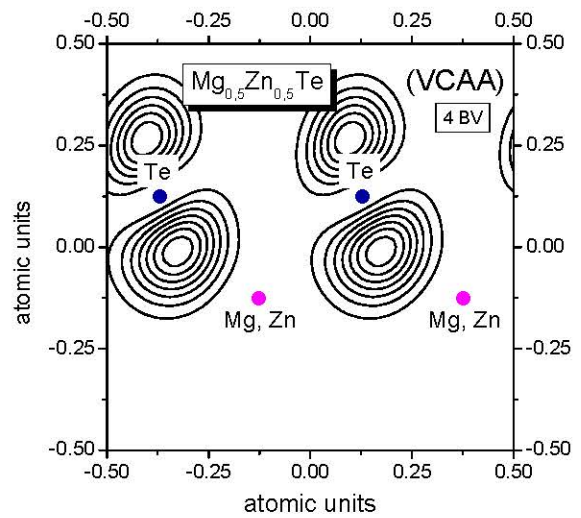




(a)



(b)



(c)

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

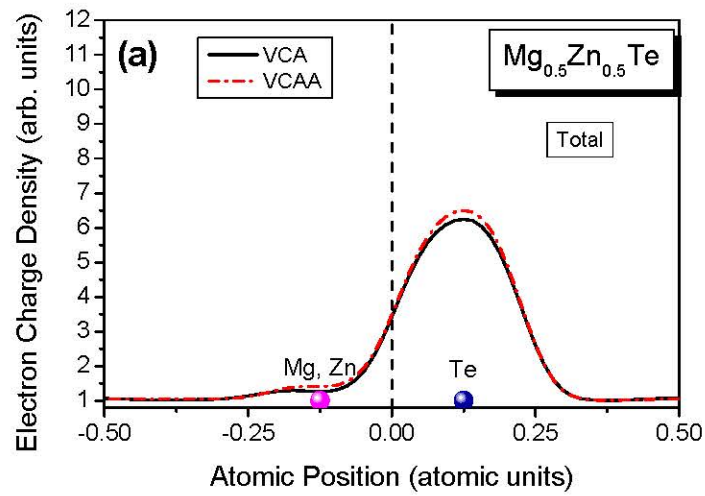
**III. 6. 5. La somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$  :**

La figure (III-16) présente la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$ , profil suivant la direction  $[111]$  et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et avec désordre. Cette figure est semblable à celle observée pour la première bande de valence de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$ . On peut noter que la distribution de la densité de charge est localisée au site anionique (Te) par rapport au site cationique (Mg, Zn). Pratiquement, la densité de charge dans les sites interstitiels est nulle. 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. Cependant, la densité de charge électronique est asymétrique autour du centre de la liaison, 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.

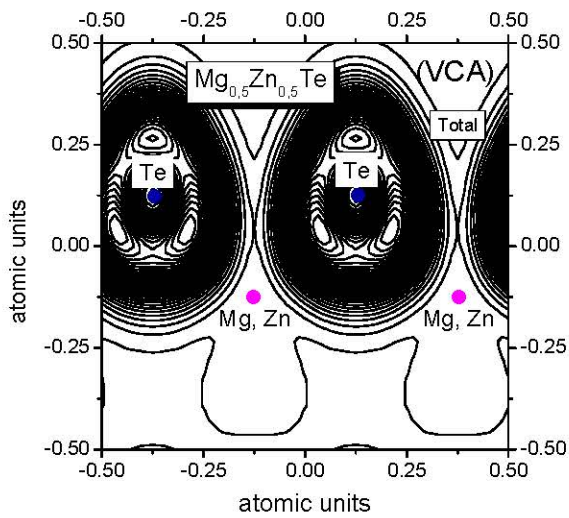
L'effet de désordre compositionnel semble n'avoir aucun effet significatif sur la forme de la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence pour le profil et le contour.

Nous pouvons conclure que la contribution varie de chaque bande dans la somme des quatre bandes de valence de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$ .

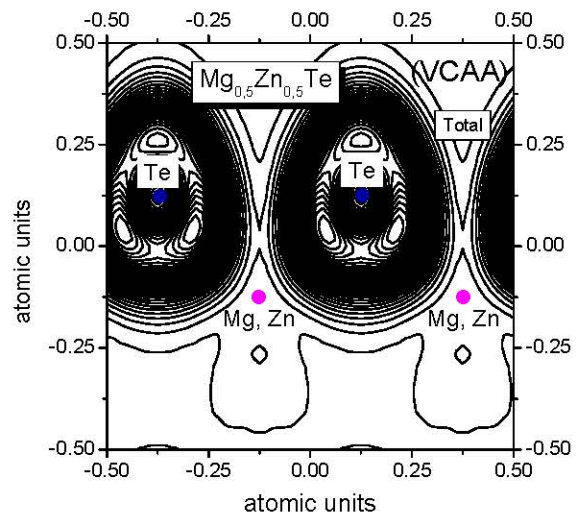
Essentiellement le caractère ionique est fourni par la première bande, et le reste de bandes fournit le caractère covalent. Cependant, il y a quelques exceptions là où la situation est renversée. Cette étude prouve que si la première bande est ionique donc le reste de bandes est covalente et vice versa, en plus la variation de  $x$  pourrait changer la nature de la liaison. Cette étude est conforme de celle trouvée par Aourag et *al.* [14].



(a)



(b)



(c)

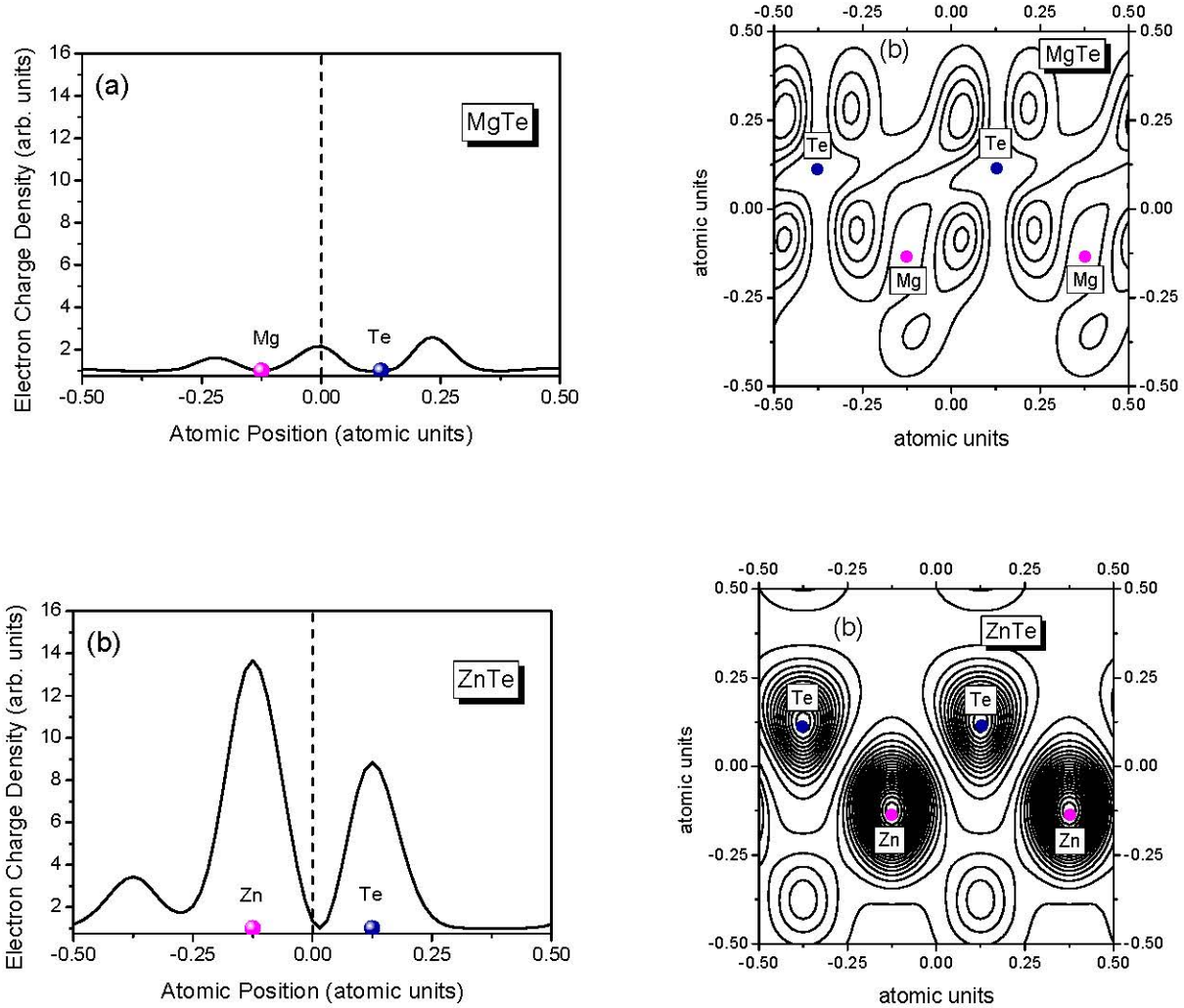
**Figure III-16** : Densité de charges électroniques de la somme des quatre bandes de valence au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$  (a) profil suivant la direction  $[111]$  sans désordre (—) et avec désordre (- - -), (b) contour dans le plan  $(110)$  sans désordre et (c) avec désordre.

**III.7. La 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), des composés binaires MgTe et ZnTe. Pour le composé MgTe, une charge électronique très faible est localisée entre le cation et l'anion. On peut dire un caractère liant de type P est plus prononcé pour le composé MgTe. Une quantité de charge électronique est présente sur les sites interstitiels côté anionique (Te) et cationique (Mg), La quantité de charge électronique sur le site interstitiel côté anionique (Te) est plus importante que la quantité de charge électronique sur le site interstitiel côté cationique (Mg).

Par contre pour le composé ZnTe, 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 du cation et de l'anion. Mais la densité de charge électronique est importante au site cationique (Zn) par rapport au site anionique (Te). Ces distributions des charges sont du type « S ».

On constate aussi, qu'il ya une charge électronique importante dans la région interstitielle côté cationique (Zn) et aucune charge électronique dans la région interstitielle côté anionique (Te).



**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)  $\text{MgTe}$ , (b)  $\text{ZnTe}$ .

### III.7.1. L'effet de désordre :

Les figures (III-18)-(III-22), représentent la densité de charge 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 magnésium. Les résultats montrent aussi que l'évolution de la première bande de conduction pour différentes concentrations  $x$  de magnésium est très sensible sous l'effet du désordre.

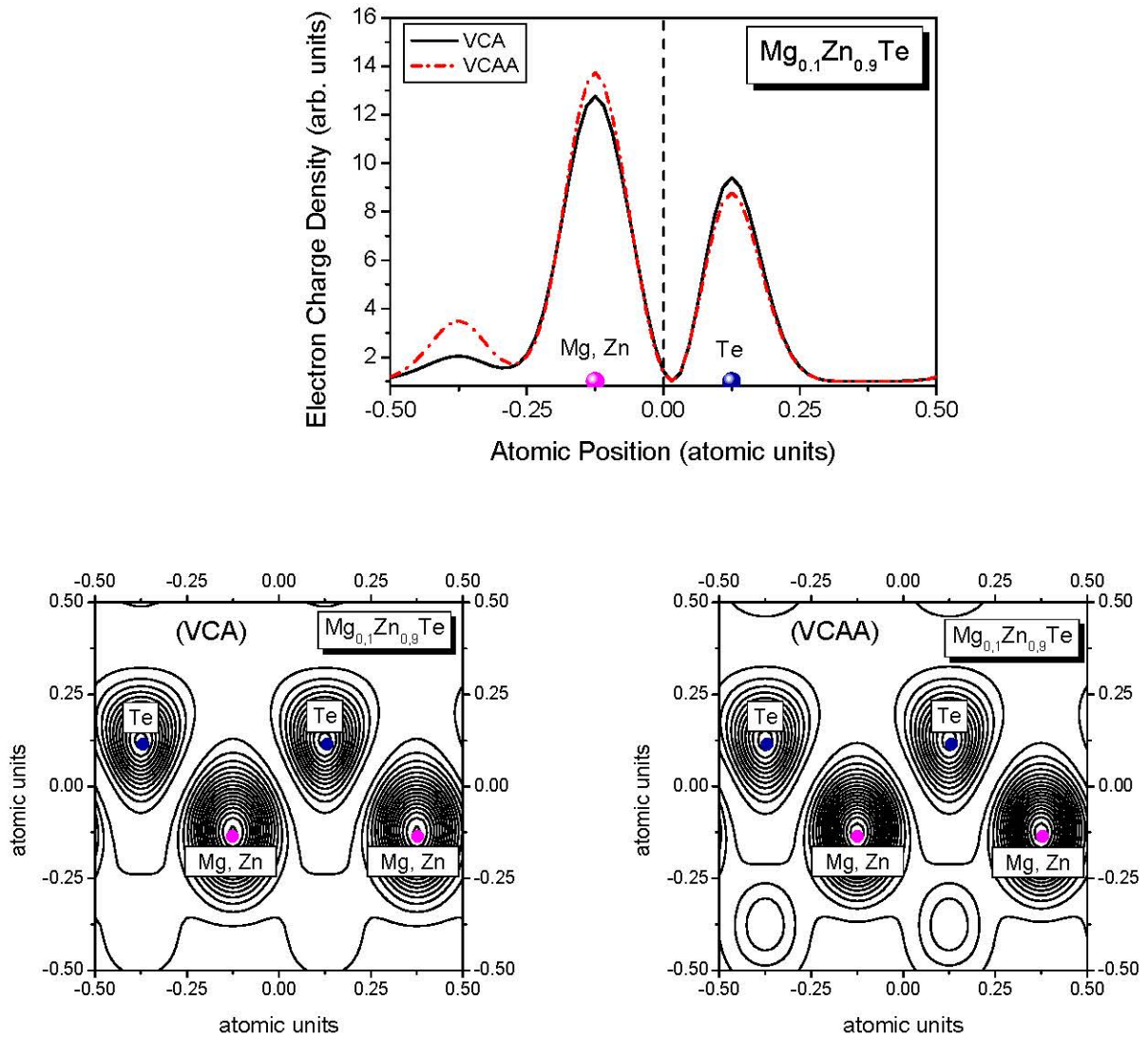
Dans les figures (III-18) et (III-19) à ( $x=0.1$ ;  $x=0.3$ ), nous remarquons qu'il ya une quantité importante de charge électronique présente sur les sites atomique anionique (Te) et cationique (Mg, Zn). Cependant la densité de charge électronique entourant l'anion est plus petit que celle entourant le cation pour l'alliage  $\text{Mg}_{0.1}\text{Zn}_{0.9}\text{Te}$  (figure (III-18)). Le cas inverse pour l'alliage  $\text{Mg}_{0.3}\text{Zn}_{0.7}\text{Te}$  (figure (III-19)). La densité de charge électronique entre le cation et l'anion est nulle.

Il y a une charge électronique faible au site interstitiel côté cationique (Mg, Zn) et aucune charge électronique au site interstitiel côté anionique (Te). Cette dernière diminue en augmentant la concentration de magnésium.

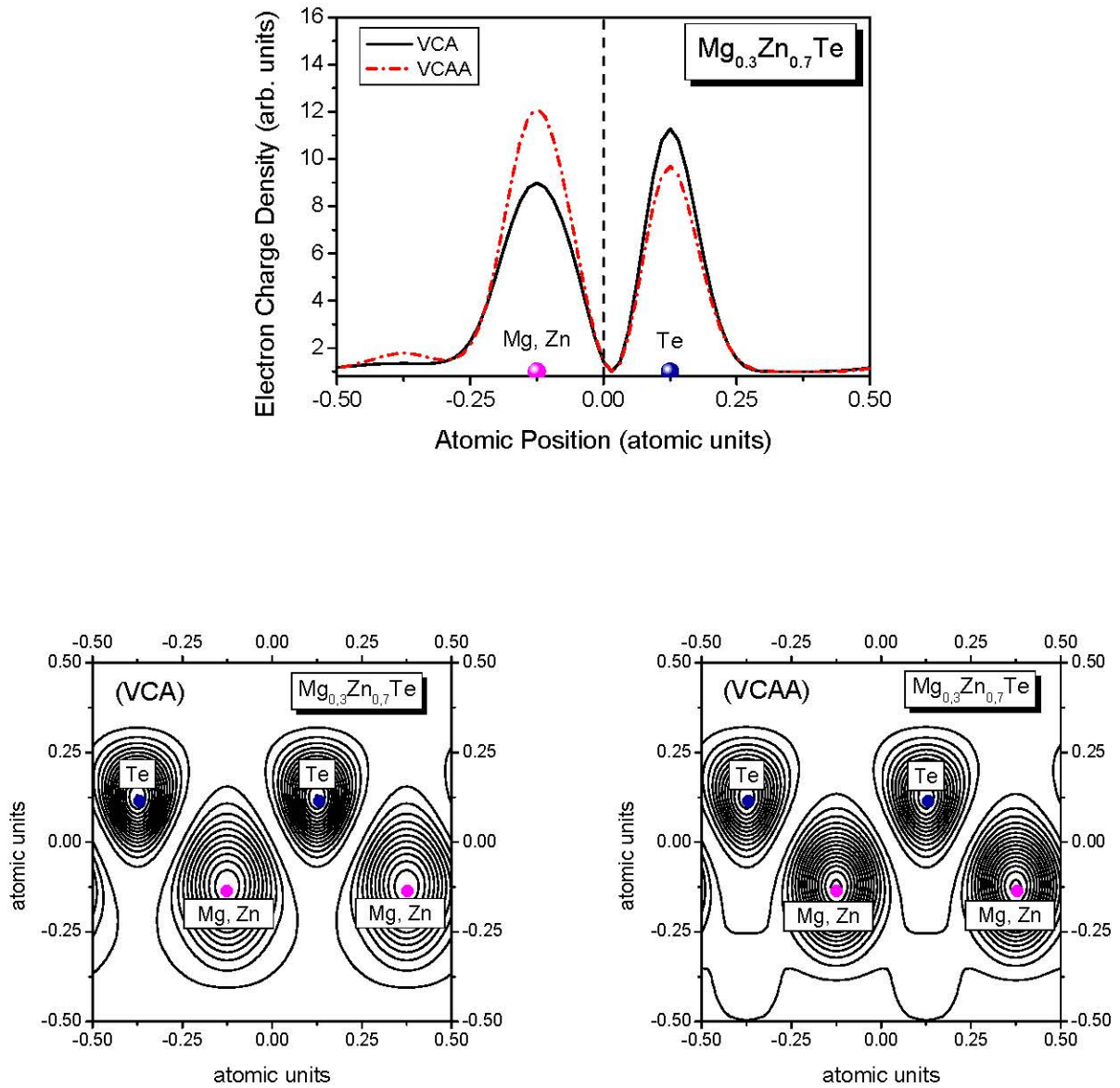
L'effet de désordre compositionnel est très clair et remarquable.

Ceci est conforme aux distributions de charges des composés III-V [15-21].

Dans les figures (III-20) et (III-22) à ( $x=0.5$ ,  $x=0.7$  et  $x=0.9$ ), nous constatons que la densité de charge électronique autour des sites atomique est nulle, une charge électronique faible est localisée entre le cation et l'anion et sur les sites interstitiels anionique et cationique. Cette effet fait augmenter la densité de charge électronique autour des sites atomique pour l'alliage  $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$  (figures (III-20)), par contre cette augmentation se fait entre les deux sites atomique et aux sites interstitiels pour l'alliage  $Mg_{0.9}Zn_{0.1}Te$  (figures (III-22)). Cependant, l'effet de désordre fait diminuer la densité de charge électronique entre les deux sites atomique et aux sites interstitiels pour l'alliage  $Mg_{0.7}Zn_{0.3}Te$  (figures (III-21)).

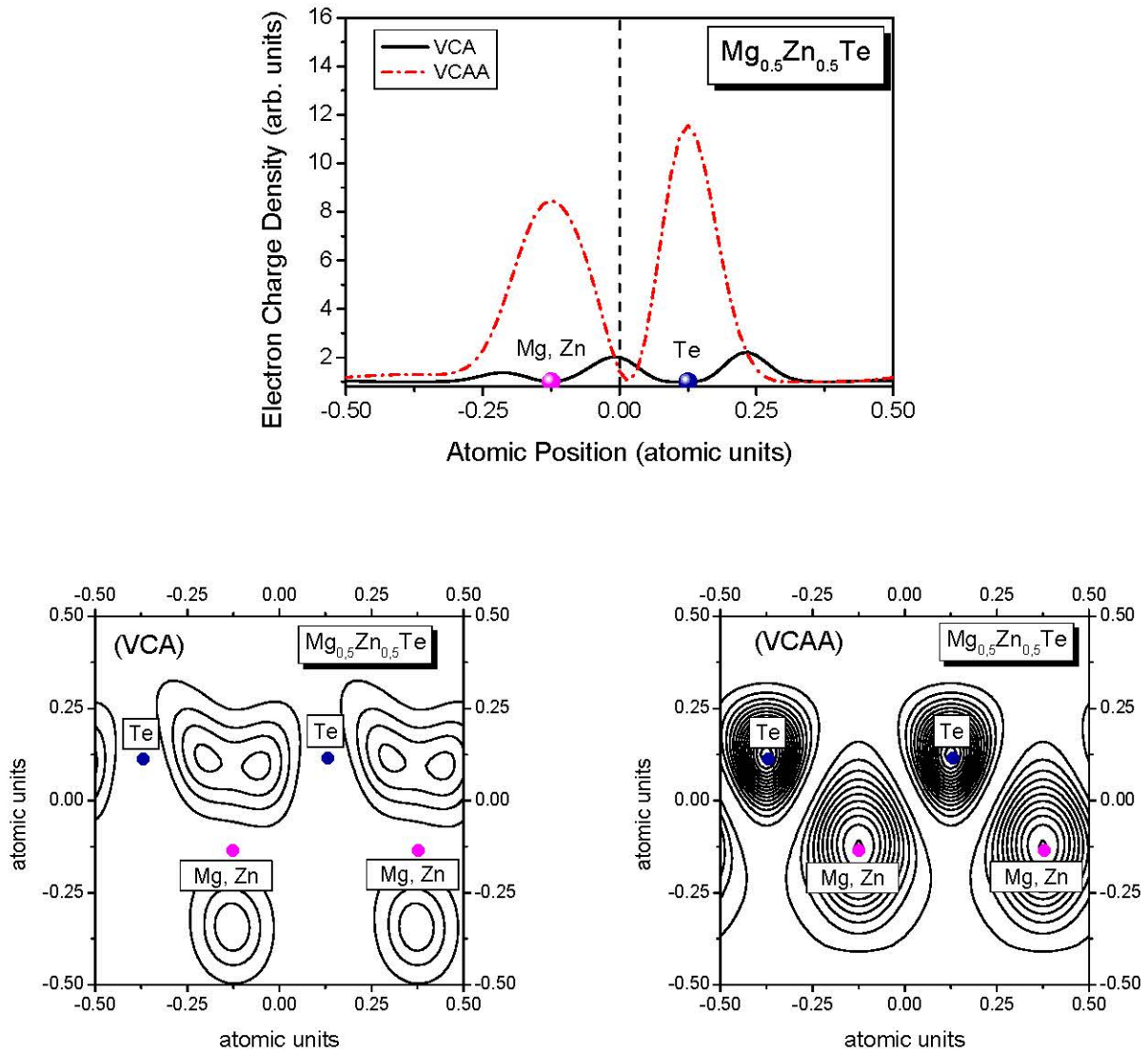


**Figure III-18** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_{0.1}Zn_{0.9}Te$ , profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA)

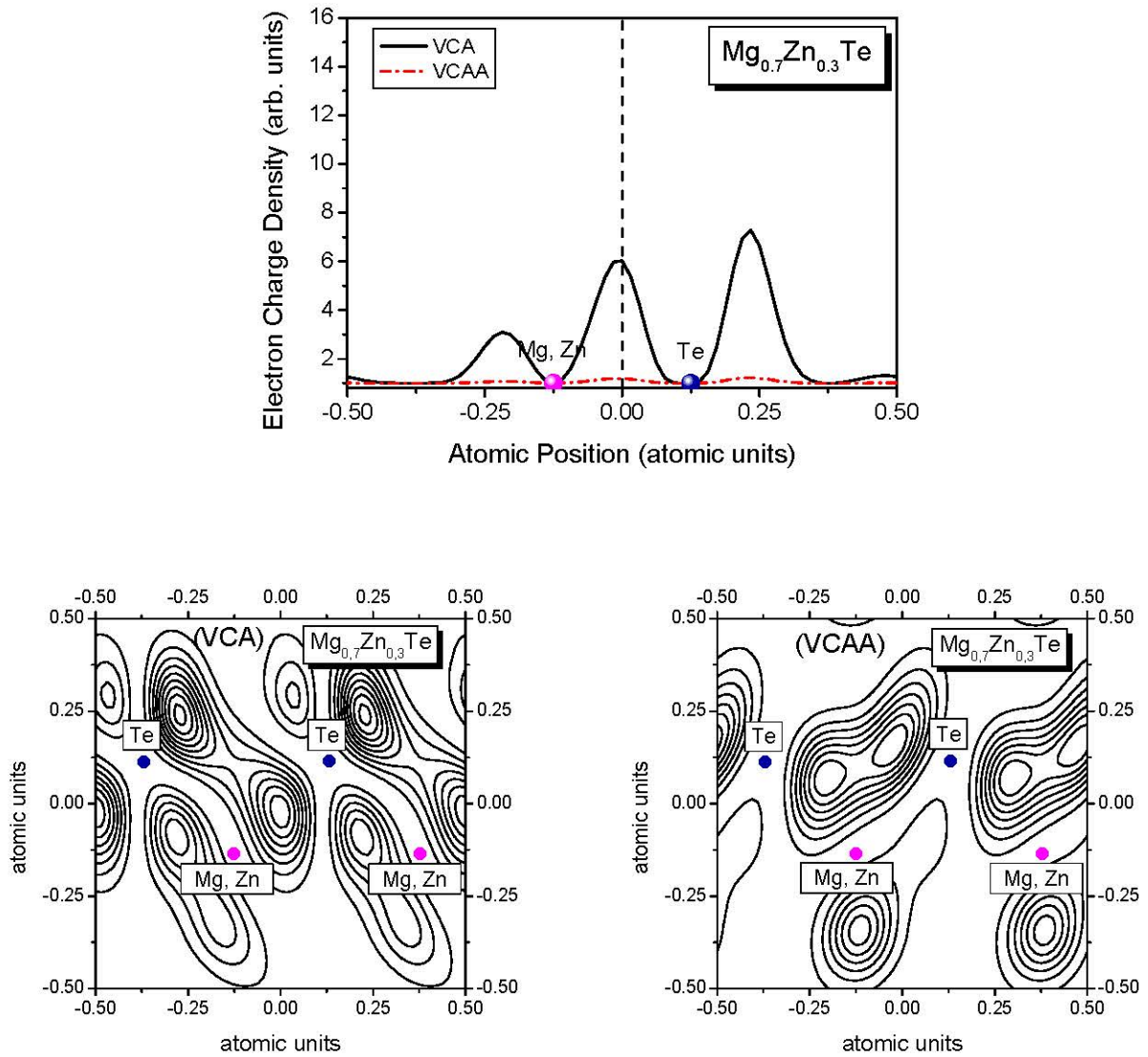


**Figure III-19** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_{0.3}Zn_{0.7}Te$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre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

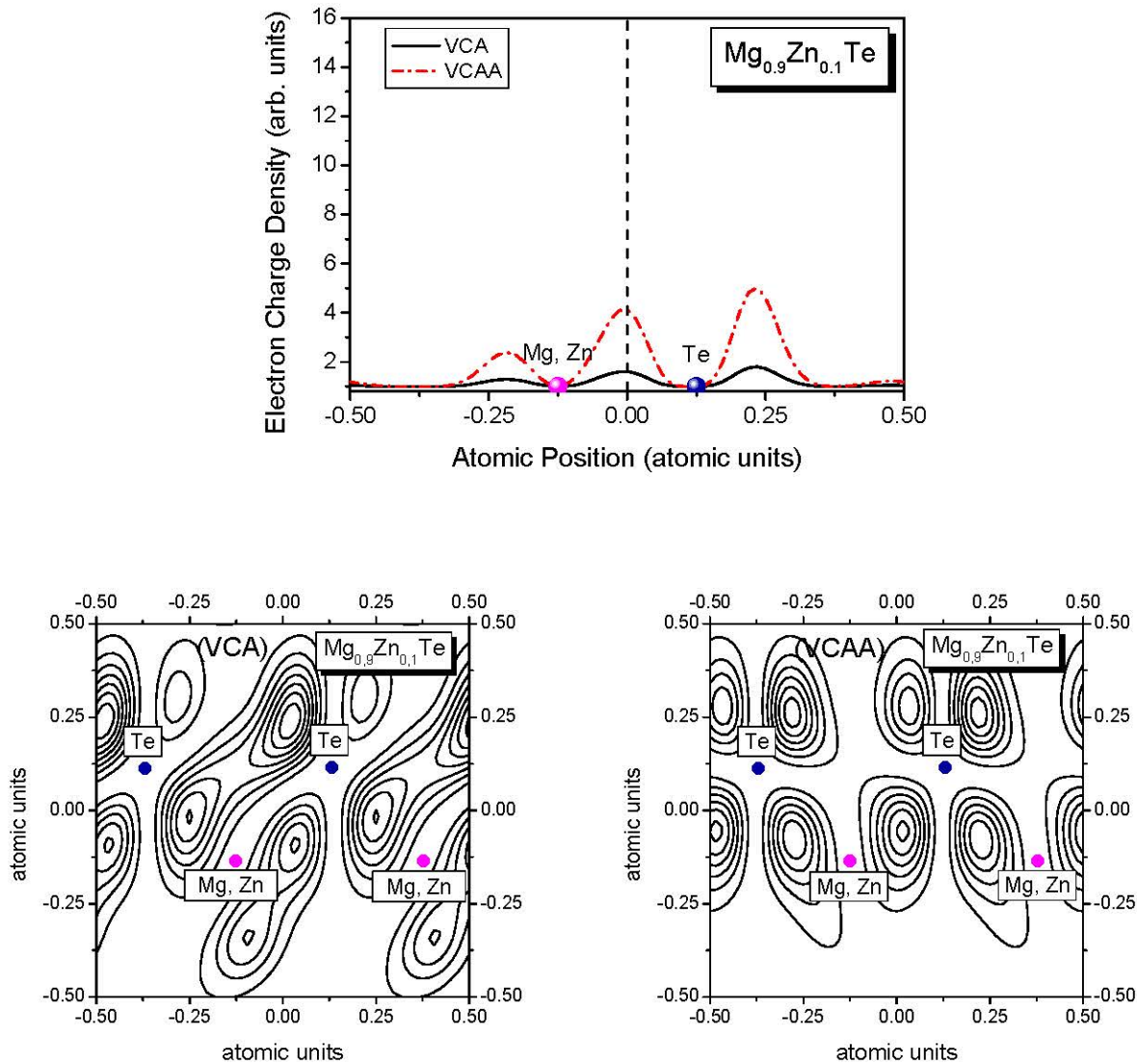




**Figure III-20** : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre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



**Figure III-21:** Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_{0.7}Zn_{0.3}Te$ , (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  $Mg_{0.9}Zn_{0.1}Te$ , (a) profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (—) et avec désordre (-----), et contour dans le plan  $(110)$  sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA)

### III.7.2. L'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  $Mg_xZn_{1-x}Te$ , 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 du Mg suivantes :  $x=0.0$  (ZnTe),  $x = 0.1$  ( $Mg_{0.1}Zn_{0.9}Te$ ),  $x = 0.3$  ( $Mg_{0.3}Zn_{0.7}Te$ ),  $x=0.5$  ( $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ ), et  $x = 0.7$  ( $Mg_{0.7}Zn_{0.3}Te$ ), et  $x=0.9$  ( $Mg_{0.9}Zn_{0.1}Te$ ). Nous remarquons que pour les concentrations faibles, la distribution de la densité de charge est localisée au site cationique (Mg, Zn) par rapport au site anionique (Te). Cependant la densité de charge électronique entourant le cation est plus grande que celle entourant l'anion. Il y a une charge significative se trouve localisée au niveau de la région interstitielle côté cationique. Ainsi, la densité

de charge électronique est presque nulle dans la région interstitielle côté anionique et dans la région entre les deux atomes. De plus, l'intensité de la densité de charge diminue au site cationique (Mg, Zn) avec l'augmentation de la fraction molaire  $x$  de magnésium, par contre elle augmente au site anionique (Te). On peut conclure que les distributions de charge électronique pour la première bande de conduction au point  $\Gamma$  est encore anti-liante de type S, pour les concentrations faibles de magnésium. Par contre un caractère liant de type P est plus prononcé pour les concentrations élevées de magnésium et le composé binaire MgTe. Ceci est conforme aux distributions de charges des composés II-VI [22-26].

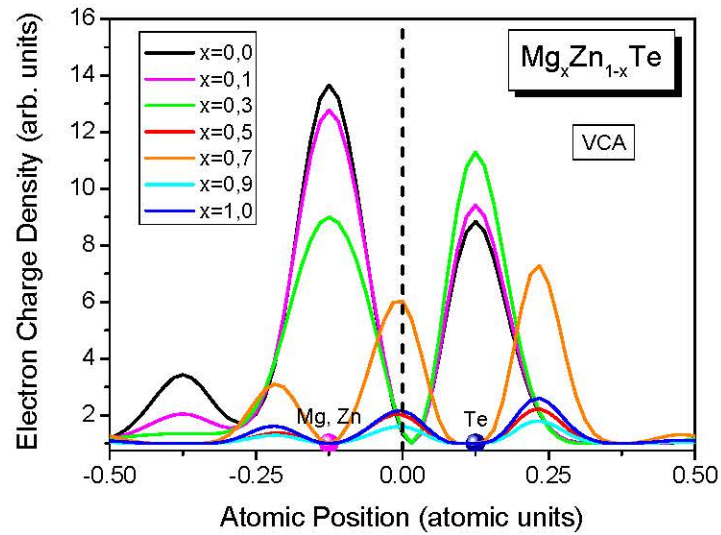


Figure III-23: Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$ , profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (VCA).

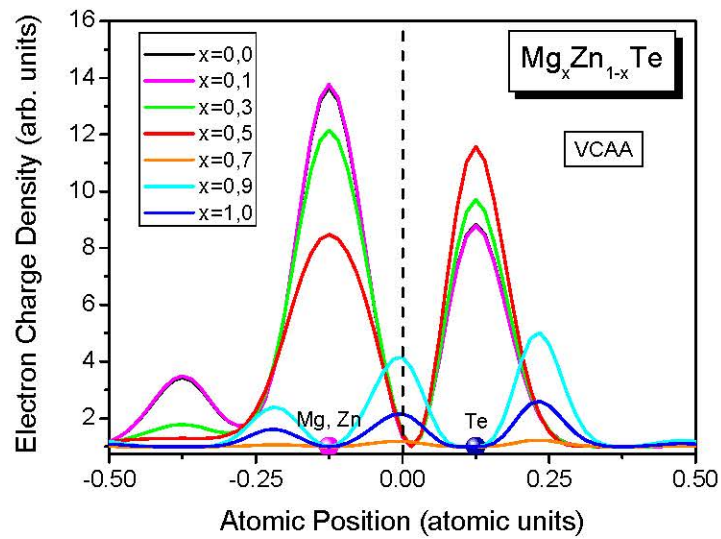


Figure III-24 : Densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point  $\Gamma$  de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$ , profil suivant la direction  $[111]$ , sans désordre (VCAA).

## Références :

- [1] J. C. Phillips, *Science* **169**, 1035 (1970); *Rev. Mod. Phys.* **42**, 317 (1970).
- [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] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic Press, New York, (1973).
- [7] A. Garcia, M.L. Cohen, *Phys. Rev. B* **47**, 42155 (1993).
- [8] Y. Al-Douri, H. Abid, H. Aourag, *Mater. Chem. Phys.* **65**, 117 (2000).
- [9] S. Adachi, *Proprieties of semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons , (2009).
- [10] N. Bouarissa, A. Tanto, H. Aourag , and T. Bent-Meziane, *Compu. Mater. Sci.* **3**, 430 (1995).
- [11] H. Aourag, A. Belaidi and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys.* **24**, 209 (1989).
- [12] H. Aourag, G. Merad, B. Khelifa and A. Mahmoudi, *Mat. Chem. Phys.* **28**, 431 (1991).
- [13] F. Benmakhlouf, A. Bechiri, , and N. Bouarissa, *Solid-State Electronics*, **47**, 1335 (2003).
- [14] H. Aourag, M. Hammadi, M. Mahmoudi and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys.*, **31**, 359 (1992).
- [15] A. Bechiri, thèse de Doctorat d'état, Université de Constantine (Algeria), 2006.
- [16] N. Bouarissa, N. Amrane and H. Aourag, *Infrared Phys. Technol* , **31**, 755 (1995).
- [17] H. Aourag, B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys* , **25**, 531, (1990).
- [18] H. Aourag, A. Belaidi, B. Khelifa, M. Gamoudi and C. Jardin, *Phys. Lett. A* , **149**, 305 (1990).
- [19] G. Merad, H. Aourag and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys* , **30**, 187, (1992)
- [20] H. Aourag, F. Sellal and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys*, **30**, 229 (1992).
- [21] N. Badi, H. Abid, B. Soudini, N. Amrane, M. Driz, B. Khelifa and H. Aourag, *Mat. Chem. Phys*, **38**, 24 (1994).
- [22] H. Aourag, B. Khelifa, L. Hamerlaine, H. Belarbi, *Phys. Lett A*, **145**, 45 (1990).
- [23] H. Aourag, M. Hammadi and B. Khelifa, *Mat. Chem. Phys*, **33**, 197 (1993).
- [24] H. Aourag, M. Driz, B. Khelifa, H. Nara and T. Kobayasi, *Mat. Chem. Phys*, **36**, 77 (1993).
- [25] A. Mahmoudi, B. Soudini, N. Amrane, B. Khelifa and H. Aourag, *Compu. Mat. Sci*, **2**, 213 (1994).
- [26] 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 MgTe et ZnTe et leurs alliages ternaires  $Mg_xZn_{1-x}Te$ . Nos calculs sont basés sur l'utilisation de la méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui prie 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 MgTe et ZnTe et leurs alliages ternaires  $Mg_xZn_{1-x}Te$  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 voir l'effet de la composition x du magnésium sur la distribution de la densité de charge électronique.

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

Pour le composé ZnTe, 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. Même constatation a été faite pour le composé MgTe. Cette remarque concerne la 2<sup>ième</sup>, la 3<sup>ième</sup> et la 4<sup>ième</sup> bande de valence. 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 MgTe. La situation est inversée pour le composé ZnTe

Nous pouvons conclure que la contribution varie de chaque bande dans la somme des quatre bandes de valence de l'alliage  $Mg_xZn_{1-x}Te$ . 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 x 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 première bande de conduction aux points  $\Gamma$ .



L'effet de la composition stœchiométrique de magnésium est intéressant. Les distributions de charge électronique pour la première bande de conduction au point  $\Gamma$  est anti-liante de type S, pour les concentrations faibles de magnésium. Par contre un caractère liant de type P est plus prononcé pour les concentrations élevées de magnésium et le composé binaire MgTe.