

III-1. Introduction

Dans ce chapitre, nous discutons les résultats obtenus de nos calculs telles que les propriétés structurales, électroniques et optiques des composés ZnX ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Te}$) dans le cadre de la DFT (Density Functional Theory). Les calculs ont été réalisés par le code CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) en utilisant la méthode pseudo-potentielle (PP-PW). Le potentiel d'échange et de corrélation a été traité par l'approximation LDA et GGA.

III-2. Propriétés structurales des composés ZnO , ZnS , ZnTe

L'étude des propriétés structurales est un point de départ à cause de leurs importances dans la compréhension d'autres propriétés électroniques et optiques.

III-3. Détails des calculs

Nos calculs ab-initio sont exécutés avec la technique pseudo-potentielle couplée avec la méthode de la base des ondes planes (PP-PW) et cela afin de résoudre les équations de Khon-Sham. Cette technique est basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT ou la fonctionnelle d'énergie d'échange-corrélation est traité avec les deux approximations: la densité locale (LDA : locale Densité Approximation) et l'approximation gradient généralisée (GGA ; Generalized Gradient Approximation).

Le code CASTEP est capable de simuler la relaxation électronique à l'état fondamental pour des métaux, des isolants, ou des semi-conducteurs. Il calcule les forces agissantes sur les atomes et l'effort sur la maille primitive. Les forces peuvent être employées pour trouver la structure d'équilibre.

III-3.1. Paramètre d'entrée

Des données d'entrées sont indispensables pour le code tels que :

- Les éléments dans les matériaux.
- Le système cristallin réseaux de bravais (groupe d'espace).
- Les paramètres de maille ($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$).
- Les positions des atomes.

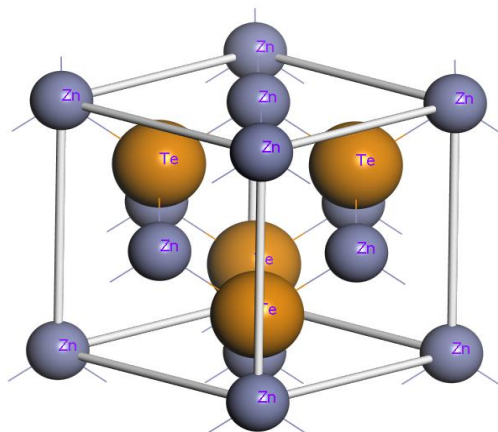
Ces paramètres d'entrée sont regroupés dans le tableau III – 1

Tableau III-1 : les paramètres, le groupe d'espace et les nombres atomiques du composée ZnX(X=O,S,Te) à base de Zinc.

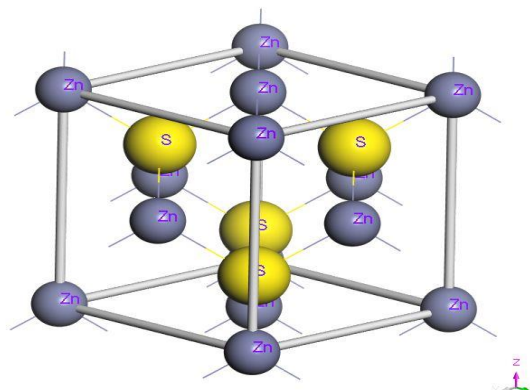
Composé	Paramètre (Å)	Angle	Groupe d'espace	Z	Etats de Valence
ZnTe	a=6.07	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	216 F-43M	Zn: 30 Te: 52	Zn: 3d104s ² Te: 5s ² 5p ⁴
ZnS	a=5.445	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	186 P-63mc	Zn: 30 S: 16	Zn: 3d104s ² S: 3s ² 3p ⁴
ZnO	a=3.254 C=5.215	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	186 P-63mc	Zn: 30 O: 8	Zn: 3d104s ² O: 2s ² 2p ⁴

La structure cristalline des matériaux ZnO, ZnS, ZnTe est représentée dans la figure III-1.

(a)



(b)



(c)

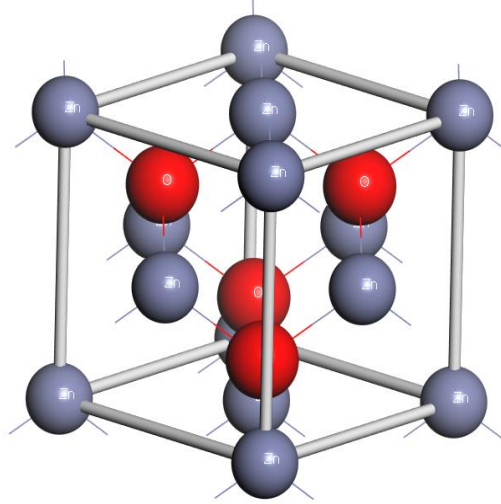


Figure III-1 : les structures cristalline de Zinc-blende des composées: (a) ZnTe, (b) ZnS, (c) ZnO.

Avant de calculer les propriétés structurales, électroniques et optiques, il faut commencer par une optimisation structurale avec les paramètres de convergence telles que l'énergie de coupure E_{cut} et l'échantillonnage de la zone de Brillouin.

III-3.1.1. Convergence d' E_{cut} et NK-point

Dans la pratique, il faut toujours tester la convergence des résultats par rapport à l'énergie de coupure E_{cut} et par rapport à la grille d'échantillonnage de la zone de Brillouin, appelée NK-points. D'habitude, Pour obtenir les bonnes valeurs de l'énergie cinétique de coupure E_{cut} et le nombre de points k assurant la convergence de l'énergie totale du système avec plus précision, on varie l'énergie (E_{cut}) allant de 300 à 1000 eV, pour chacune de ces valeurs, nous calculons l'énergie totale et nous traçons la courbe de variation de l'énergie totale en fonction l'énergie cut-off.

Après avoir fixé la valeur de E_{cut} , Nous procédons à l'échantillonnage de la zone de Brillouin ZB. Nous suivons la même procédure de convergence que celle précédente pour déterminer le nombre de points K dans la première zone de Brillouin.

Les valeurs du nombre de points K (NK-point) sont variées de (2 2 2) à (12 12 12) pour tous les composés. Pour chacune de ces valeurs, nous calculons, ainsi l'énergie totale et nous traçons la courbe de variation de l'énergie totale en fonction des valeurs du nombre des points K avec structure Zinc Blende pour Les deux approximations : la LDA et la GGA sont utilisées pour la convergence.

✚ Pour le composé ZnO

Les figures III-2 et III-3 montrent respectivement la convergence de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure et la convergence de l'énergie en fonction des NK-points pour les deux approximations LDA et GGA.

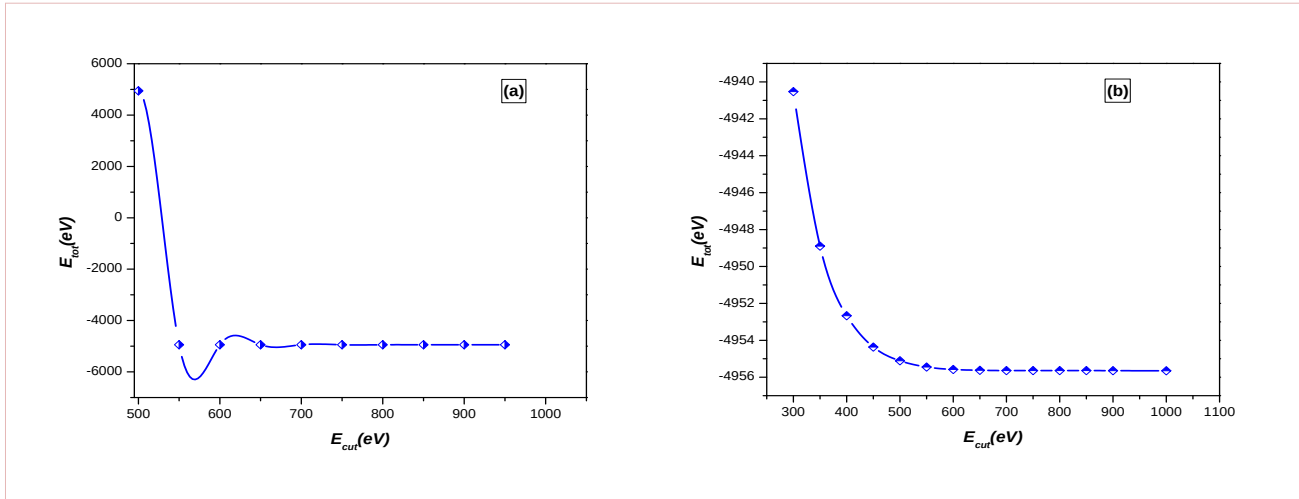


Figure III-2 : Convergence de l'énergie totale de ZnO en fonction de l'énergie de coupure (E_{cut}) pour NK-point (8 8 8) : (a) LDA (b) GGA

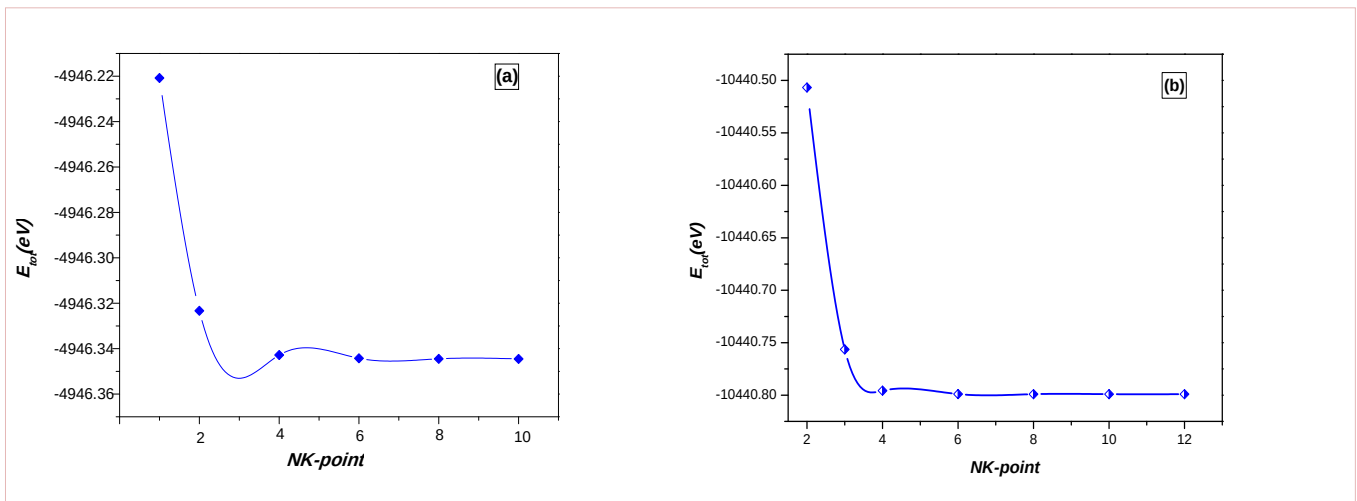


Figure III-3 : Convergence de l'énergie totale de ZnO en fonction du nombre de point K pour $E_{cut} = 800$: (a) LDA (b) GGA.

✚ Pour le composé ZnS

Les figures III-4 et III-5 montrent respectivement la convergence de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure et la convergence de l'énergie en fonction des NK-points pour les deux approximations LDA et GGA.

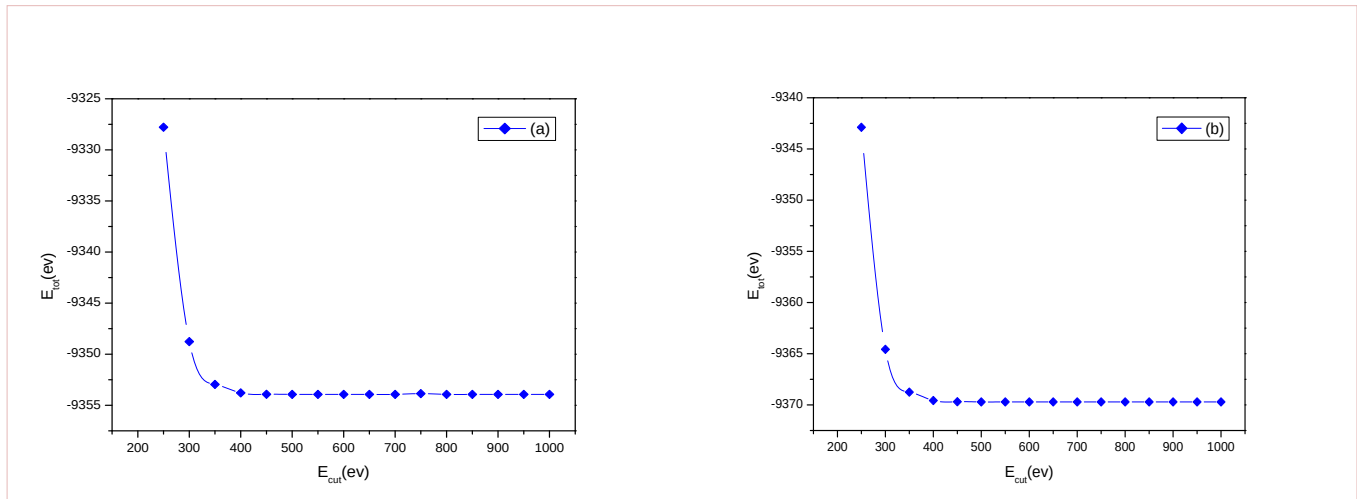


Figure III-4 : Convergence de l'énergie totale de ZnS en fonction de l'énergie de coupure (E_{cut}) pour NK-point (8 8 8) : (a) LDA (b) GGA

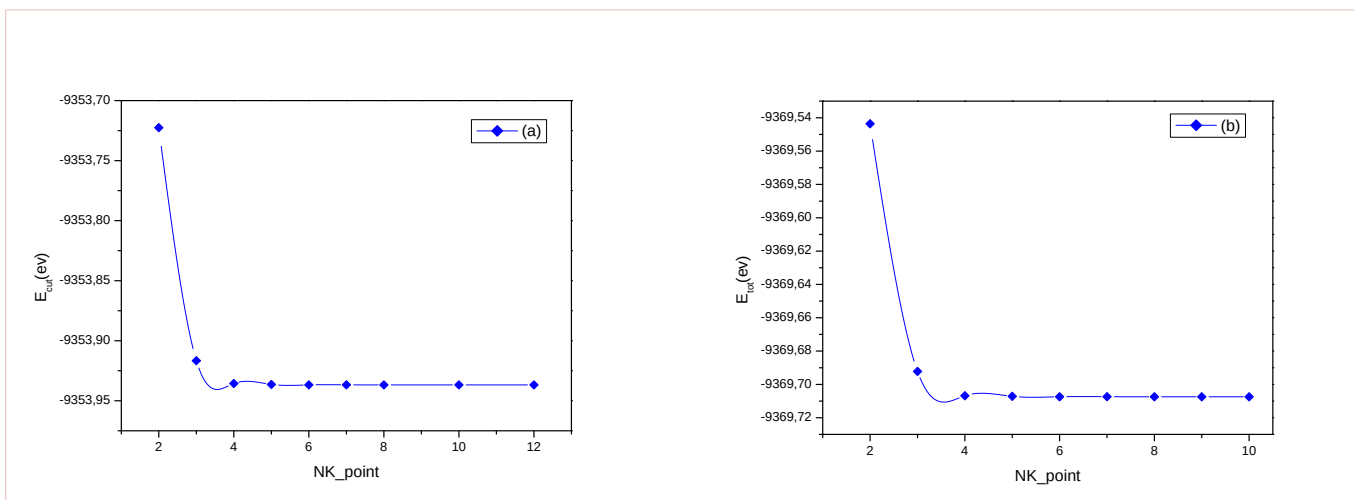


Figure III-5 : Convergence de l'énergie totale de ZnS en fonction du nombre de point K pour $E_{cut} = 850$: (a) LDA et (b) GGA.

✚ Pour le composé ZnTe

Les figures III-6 et III-7 montrent respectivement la convergence de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure et la convergence de l'énergie en fonction des NK-points pour les deux approximations LDA et GGA.

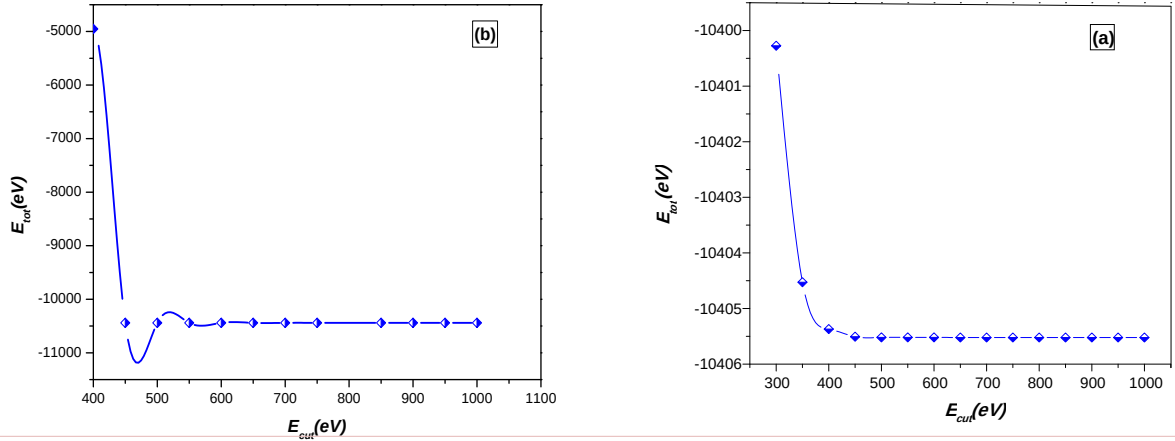


Figure III-6 : Convergence de l'énergie totale de ZnTe en fonction de l'énergie de coupure (E_{cut}) pour NK-point (8 8 8) : (a) LDA (b) GGA.

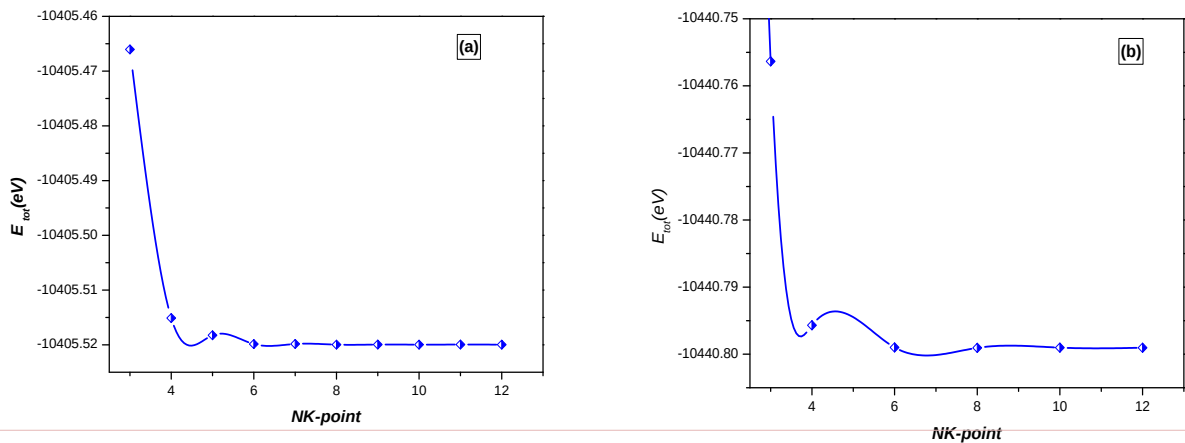


Figure III-7 : Convergence de l'énergie totale de ZnTe en fonction du nombre de point K pour $E_{cut} = 750$: (a) LDA et (b) GGA.

Dans cette étude, on a choisi le critère de convergence de l'énergie totale égale à 10^{-6} eV. D'après les derniers résultats de calcul de l'énergie on peut fixer une énergie cinétique

de coupure Ecut et un nombre de point K pour optimiser la structure. Les résultats de convergence sont résumés dans le tableau III-2.

Tableau III-2 : les valeurs de convergence des ZnTe, ZnS et ZnO par l'approximation LDA et GGA.

L'approximation	Ecut(eV)		NK-point	
	LDA	GGA	LDA	GGA
ZnTe	650	750	(8 8 8)	(8 8 8)
ZnS	800	850	(8 8 8)	(8 8 8)
ZnO	750	800	(8 8 8)	(8 8 8)

III-3.2.1. Optimisation de la structure

Pour déterminé les propriétés structurales de l'équilibre statique tel que le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 (Bulk modules) et sa dérivée par rapport à la pression P . Nous avons effectué un calcul self-consistent de l'énergie totale E_{tot} pour différentes valeurs du volume de la maille élémentaire. Les valeurs de l'énergie ainsi obtenues ont été ensuite interpolées par l'équation d'états de Murnaghan [1] donnée par :

$$E_{tot}(V) = E_0(V) + \frac{B_0 V}{B'(B' - 1)} \left[B \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad (\text{III-1})$$

Où, V_0 est le volume d'équilibre statique de la maille primitive et E l'énergie totale par maille primitive de l'état d'équilibre sont donnée par le minimum de la courbe $E_{tot}(V)$.

Le module de compression B_0 est déterminé par :

$$B_0 = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III-2})$$

III-3.2.2. Détermination des paramètres de maille

Utilisant le code CASTEP, on doit varier les paramètres des atomes dans la maille, en fonction de l'énergie totale, et la valeur minimale de celle-ci correspond aux paramètres et positions optimales. Le code du calcul CASTEP utilise l'algorithme de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno « BFGS » [2].

✧ Pour tout les composés

Avec le code CASTEP et avec les critères suivant :

- Force maximal = $0,001 \text{ eV / \AA}^\circ$.
- Energie = 1.10^{-6} eV/Atm « GGA » et 1.10^{-6} eV/Atm « LDA ».
- Déplacement maximal = $5.10^{-4} \text{ \AA}^\circ$.

Toutes les structures étudiées sont optimisées par l'algorithme de « BFGS ». Le tableau III-3 regroupe les résultats des opérations d'optimisation des composés ZnO, ZnS et ZnTe utilisant les deux approximations LDA et GGA.

Tableau III-3 : Les valeurs des paramètres optimisés par le code CASTEP des matériaux ZnO, ZnS, ZnTe.

Lattice paramètre	Avant l'optimisation	Après l'optimisation	
	a ($\text{\AA}^\circ$)	GGA	LDA
ZnO	a=3.254	a=3.278	a=3.188
	c=5.215	c= 5.291	c= 5.153
ZnS	5.445	5.441	5.295
ZnTe	6.070	6.184	6.002

III-3.2.3. Optimisation du volume

Après avoir fixé les paramètres d'optimisation, nous suivons la même procédure pour l'optimisation du volume et la détermination des paramètres de maille : On calcule l'énergie totale pour chaque valeur du volume et on trace la courbe de variation de l'énergie totale en fonction du volume. Les calculs sont effectués utilisant les deux approximations LDA et GGA.

✚ Pour le composé ZnO

Le graphe d'optimisation du volume de la maille de ZnO est représenté dans la figure III.8.

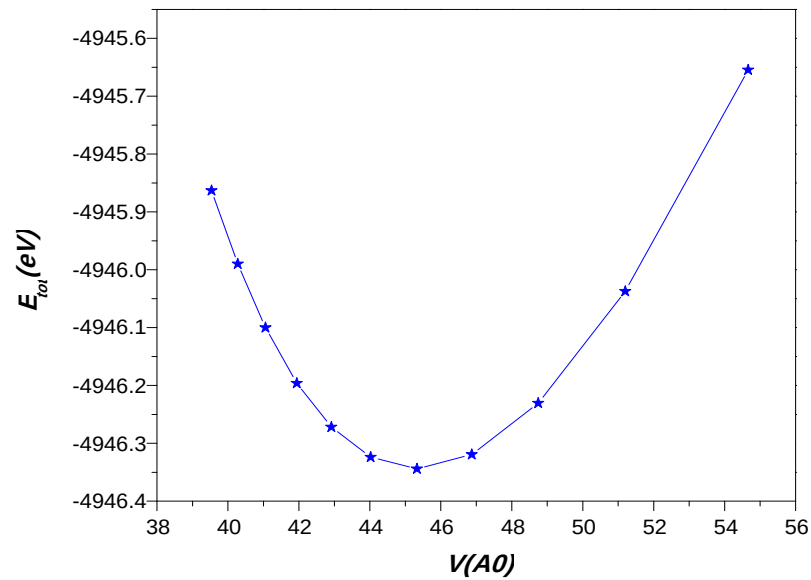


Figure III-8 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de ZnO.

✚ Pour le composé ZnS

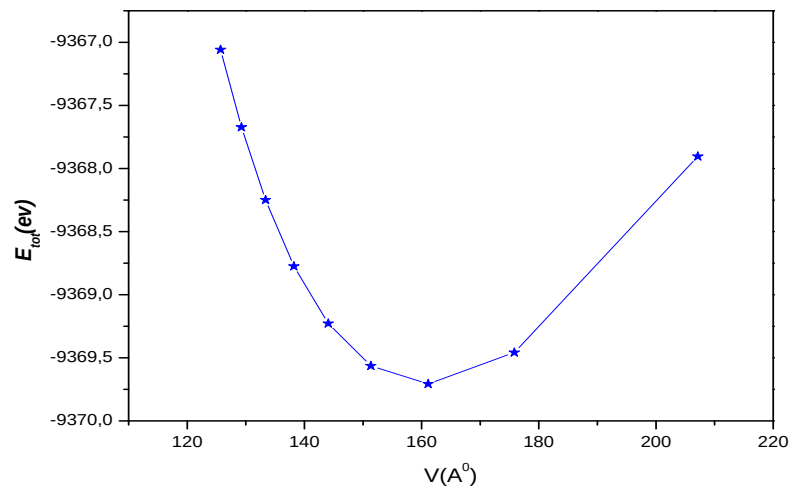


Figure III-9 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de ZnS.

✚ Pour le composé ZnTe

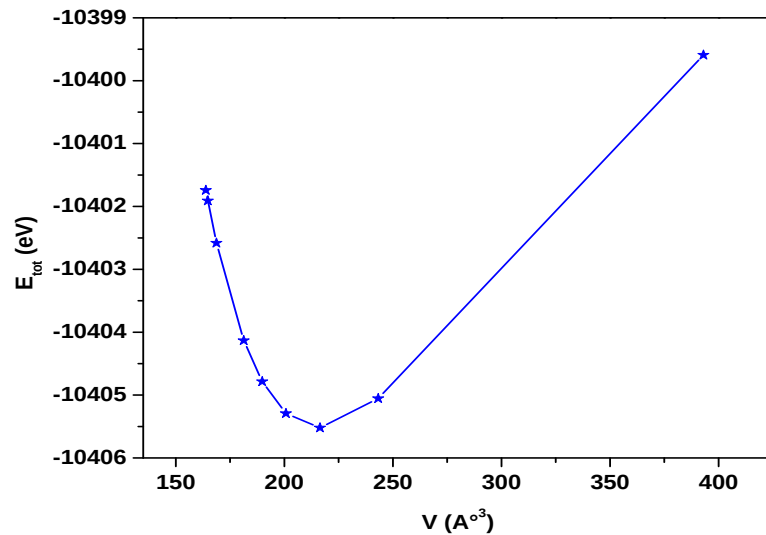


Figure III-10 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de ZnTe.

Les résultats de calculs sont représentés au tableau III-4. Un récapitulatif des différentes valeurs des paramètres a_0 , V , B_0 et une comparaison avec des résultats expérimentaux et théoriques obtenus avec d'autres auteurs.

Tableau III-4 : Les propriétés structurales de ZnO, ZnS, ZnTe, les paramètres du maille, le Volume et le module de compressibilité B_0 .

Méthode (GGA)		a (Å)	V (Å ³)	B (Gpa)	Autre calculs	Expérimentale
Nos calculs						
ZnO	Wurtzite	a=3.278 c= 5.291	49.20485	-	a=3.280 ^[3] c=5.254 ^[3]	a=3.25 ^[4] c=5.21 ^[4]
	Zinc Blende	4.630	99.25284	52.38392	4.871 ^[5]	3.6 ^[6]
ZnS		5.441	161.07798	51.10067	5.475 ^[7]	5.662 ^[8]
ZnTe		6.040	220.63092	30.72195	6.020 ^[9]	6.103 ^[10]

D'après les résultats affichés au tableau III.8, on distingue que toutes les valeurs de paramètre de maille et de volume sont généralement en bonne concordance à celles calculées dans les références [3-9].

III-4. Les propriétés électroniques des composés ZnX (X = O, S, Te)

III-4.1. La structure des bandes d'énergie

Les bandes d'énergie donnent les énergies possibles d'un électron en fonction du vecteur d'onde. Ces bandes sont donc représentées dans l'espace réciproque, et pour simplifier, seules les directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin sont traitées.

Nous avons étudié la structure des bandes des composés ZnX (X = O, S, Te) en utilisant l'approximation GGA, avec les paramètres de maille optimisée et obtenus précédemment.

Les figures III-11, III-12, III-13 représentent les structures de bandes électroniques selon les directions de haute symétrie de la 1^{ère} zone de Brillouin associée à la structure zinc blende pour ZnX (X = O, S, Te). Une première comparaison entre les structures des bandes révèle une topologie similaire pour l'ensemble des trois semi-conducteurs étudiés.

Comme pour tous les semi-conducteurs, ils se caractérisent par leur bande interdite (gap), qui sépare les derniers états occupés de la bande de valence et les états libres de la bande de conduction. Comme l'énergie maximale de la bande de valence se situe au point Γ et

l'énergie minimale de la bande de conduction au point X ces composés sont des semi-conducteurs à gap direct.

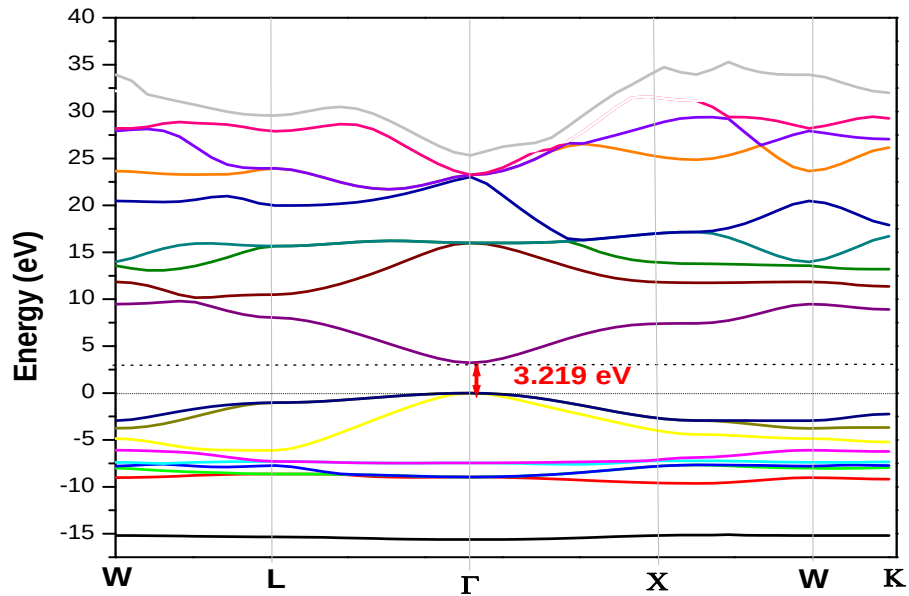


Figure III-11 : Structure de bande d'énergie et le gap de ZnO.

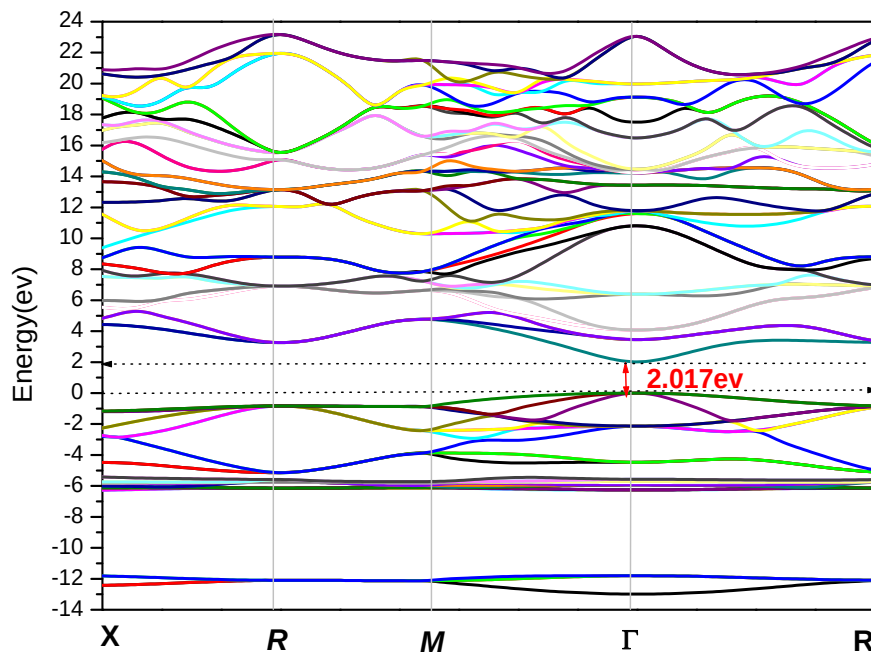


Figure III-12 : Structure de bande d'énergie et le gap de ZnS.

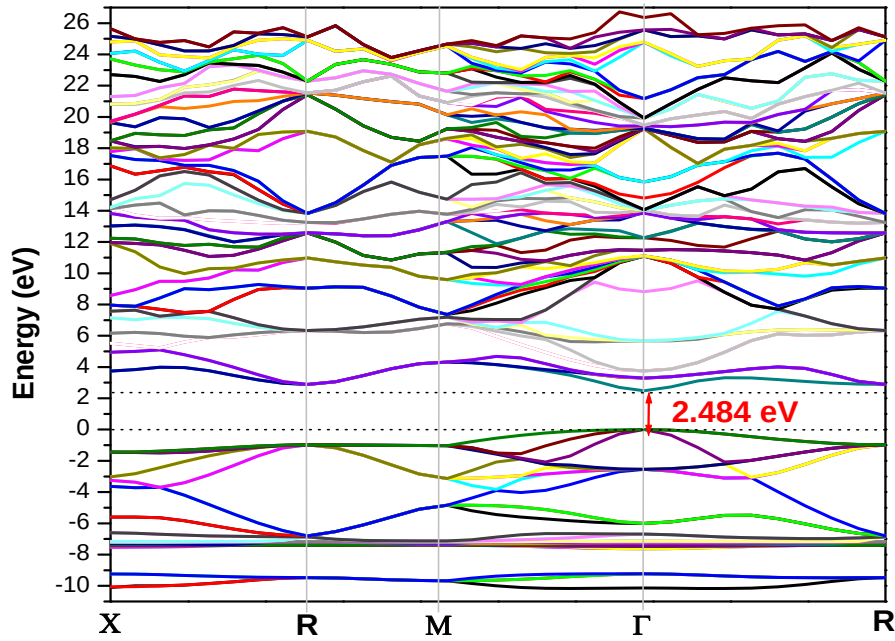


Figure III-13: Structure de bande d'énergie et le gap de ZnTe.

La bande de conduction débute à partir de [3.22, 2.017, 2.40] eV respectivement pour ZnO, ZnS, ZnTe. Ces valeurs représentent aussi la largeur de la bande interdite E_g . Les valeurs d'énergies de transition bande interdite selon la direction de haute symétrie sont représentées au tableau III-5. Les valeurs des gaps obtenus sont comparées à d'autres études théoriques utilisant la même approximation d'échange-corrélation (GGA) ainsi qu'aux résultats expérimentaux.

Tableau III-5 : Largeur de la bande interdite calculé comparée à d'autres résultats théoriques et expérimentaux pour ZnO, ZnS, ZnTe.

	Type	E_g (eV)	Autre calcule	Expérimentale
ZnO	Directe	3.219	3.37 ^[11]	3.34 ^[12]
ZnS	Directe	2.017	2.0 ^[13]	3.66 ^[14]
ZnTe	Directe	2.484	2.26 ^[12]	2.33 ^[15]

III-4.2. La densité d'états électronique

Pour avoir une idée générale sur l'origine de la structure électronique des bandes, nous avons calculé les densités d'états totales (TDOS) des composés ZnX (X = O, S, Te) en utilisant l'approximation GGA. La densité d'états totale (TDOS) à l'équilibre est présentée à la figure III-14, respectivement, aux composés ZnTe, ZnO et ZnS.

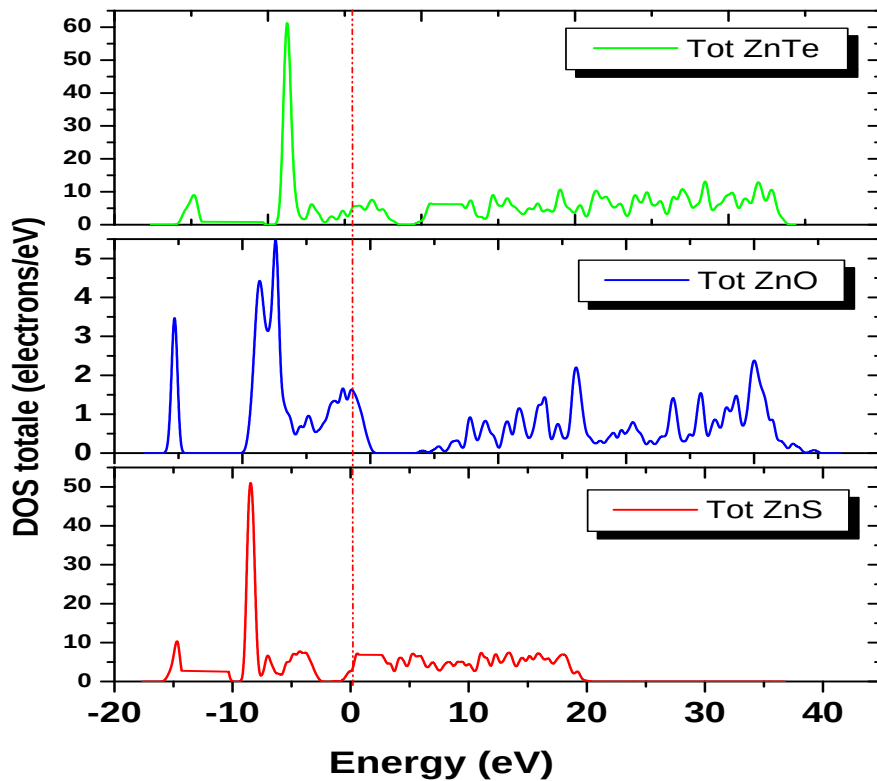


Figure III-14 : Profile de DOS totale des composées ZnO, ZnS et ZnTe.

III-5. Les propriétés optiques

Il est d'un grand intérêt de connaître les différentes manières dont la lumière interagit avec la matière dans la physique de l'état solide, tels que l'absorption, la transmission, la réflexion, la diffusion, l'émission et la réflectivité.

Le calcul direct des propriétés optiques basé sur les résultats de structure de bande en est relié avec la compréhension plus profonde de la structure électronique. Toutefois, le calcul direct des propriétés optiques exige une grille dense de points k . Dans des structures particulières, la dépendance énergétique de propriétés mentionnées ci-dessus à la structure de

bande est très grande. Une information cruciale sur les valeurs propres et les fonctions propres est nécessaire pour calculer la fréquence (Énergie) dépendante des propriétés optiques. Ces dernières sont automatiquement générées par le code de calcul ab-initio basé sur la méthode DFT et utilisés pour calculer les propriétés optiques des cristaux.

Le code CASTEP permet de calculer les propriétés optiques des semi-conducteurs qui sont dues aux transitions électroniques et en utilisant l'approximation GGA-PBE et LDA-CAPZ.

III-5.1. L'absorption

Le coefficient d'absorption optique est donné, en fonction des parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique, par l'expression:

$$I(\omega) = \sqrt{2}(\omega) \left(\sqrt{(\epsilon_1(\omega))^2 + (\epsilon_2(\omega))^2} - \epsilon_1(\omega) \right)^{1/2} \quad (\text{III-3})$$

Dans la figure III-15 on présente le spectre d'absorption linéaire optique $I(\omega)$, calculé le long d'une direction en fonction de l'énergie, respectivement, pour les composés ZnO, ZnTe et ZnS dans la structure cubique, pour les deux approximations GGA et LDA.

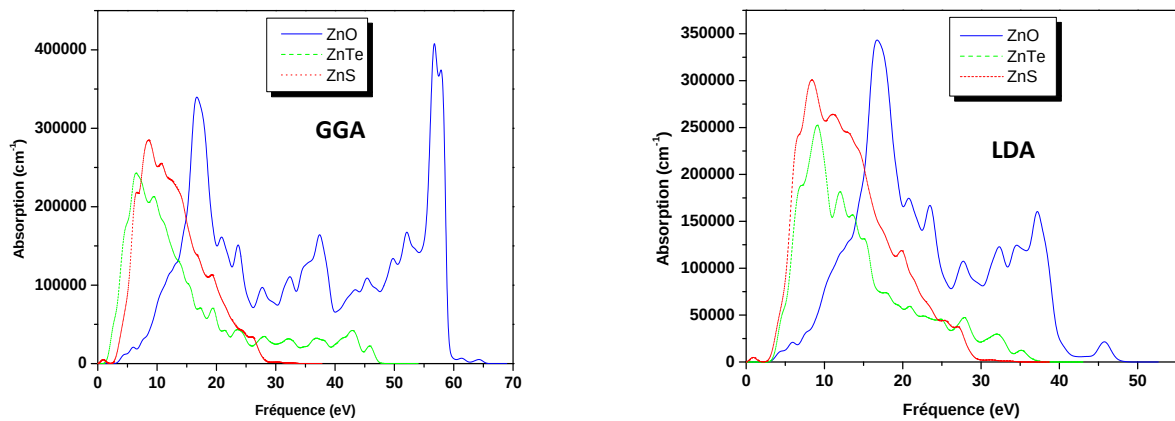


Figure III-15 : Variation de l'Absorption optique en fonction de l'énergie des composés ZnO, ZnS, ZnTe pour l'approximation GGA et LDA.

Les valeurs maximales se situées dans l'intervalle de 70 à 80 eV, 10 à 15 eV, 5 à 10 eV pour les composés ZnO, ZnS, ZnTe, respectivement, dans cet intervalle l'absorption est très forte. Les valeurs des coefficients d'absorption α_0 sont regroupées dans le tableau III-4.

Tableau III-4 : Les valeurs des coefficients d'absorption α_0 .

Composée	α_0 (cm ⁻¹)	
	GGA	LDA
ZnO	4.08*10 ⁵	3.43*10 ⁵
ZnS	2.85*10 ⁵	3.01*10 ⁵
ZnTe	2.35*10 ⁵	2.52*10 ⁵

III-5.2. La réflectivité

La réflectivité $R(\omega)$ et perte optique $L(\omega)$ sont données par les deux expressions suivantes :

$$R(\omega) = \left| \frac{\frac{1}{\varepsilon^2(\omega)} - 1}{\frac{1}{\varepsilon^2(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (\text{III-4})$$

$$L(\omega) = -\text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \quad (\text{III-5})$$

Les spectres de la réflectivité pour l'ensemble de nos composés ZnX (X = O, S, Te) pour les deux approximations GGA et LDA ont été calculés en fonction de l'énergie et représentés à la figure III-16. Les valeurs de coefficient de réflectivité R_0 sont regroupées dans le tableau III-6.

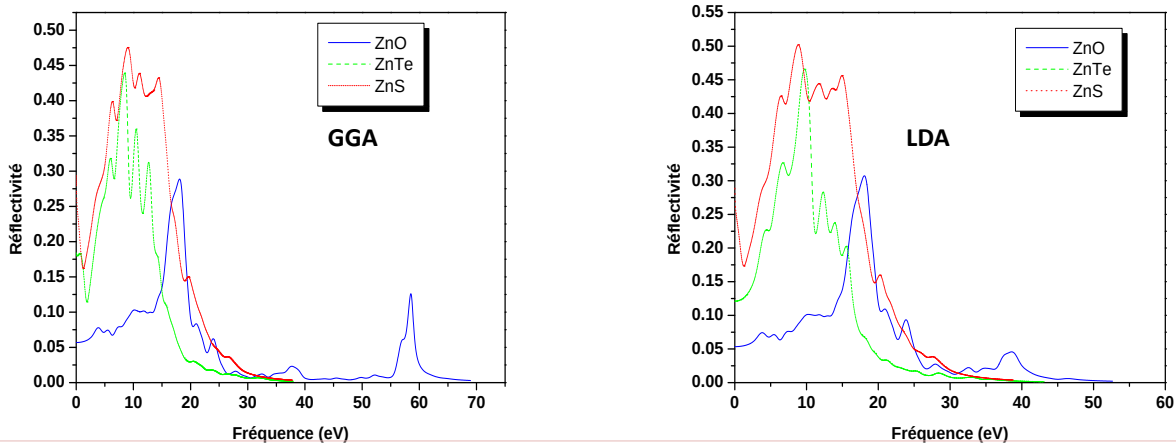


Figure III-16 : Variation de la Réflectivité en fonction de l'énergie pour les composées ZnO, ZnS, ZnTe pour deux approximations GGA et LDA.

Nous remarquons par la suite qu'il correspond au début de la réduction brutal de L'intensité optimale du spectre $R(\omega)$. De plus, la fonction de la réflectivité $R(\omega)$ subie un maximum dans l'intervalle énergétique [18.5, 9.30, 10.10eV] pour les composés ZnO, ZnTe, ZnS respectivement pour les deux approximations GGA et LDA. Ce résultat peut servir comme base théorique pour les expérimentateurs et pour des applications potentielles des ces composées dans le domaine de la conception des dispositifs optiques comme des boucliers de protection contre les radiations UV ou dans les cellules solaires.

Tableau III-6 : Valeurs des coefficients de réflectivité R_0 pour les composées ZnO, ZnS, ZnTe pour deux approximations GGA et LDA.

Composée	R_0	
	GGA	LDA
ZnO	0.289	0.307
ZnS	0.475	0.502
ZnTe	0.439	0.459

III-5.3. La conductivité

Les figures III-17, III-18, III-19 présentent l'évolution de la partie imaginaire et la partie réelle en fonction de l'énergie, respectivement, pour les composées ZnX ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Te}$).

✚ Pour ZnO

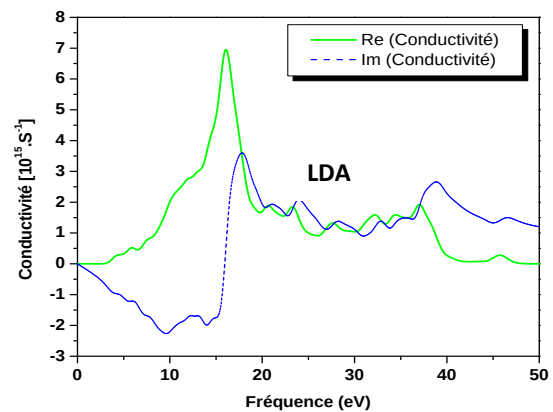
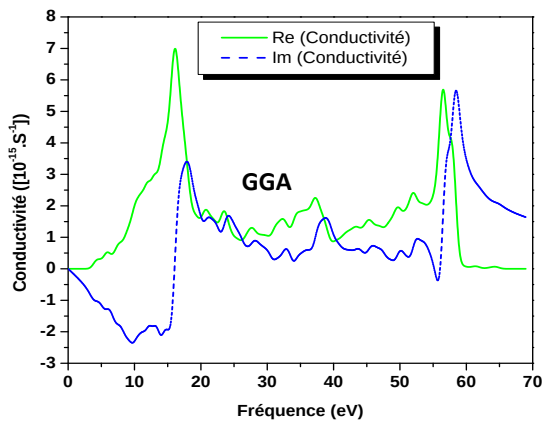


Figure III-17 : Variation de la conductivité de ZnO en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

✚ Pour ZnS

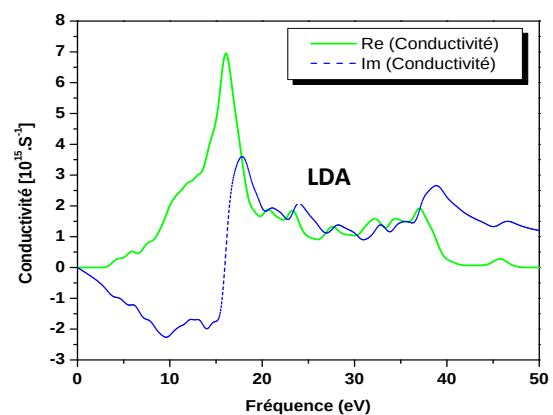
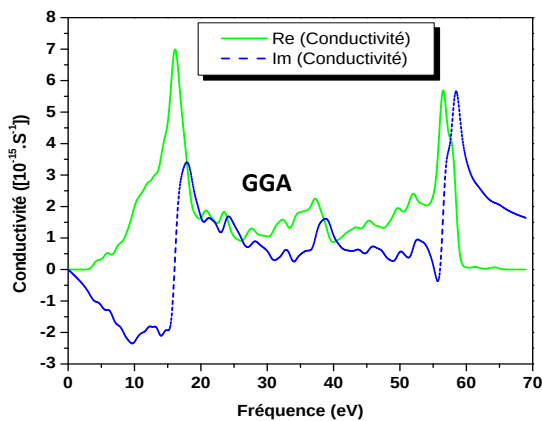


Figure III-18 : Variation de la conductivité de ZnS en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

✚ Pour ZnTe

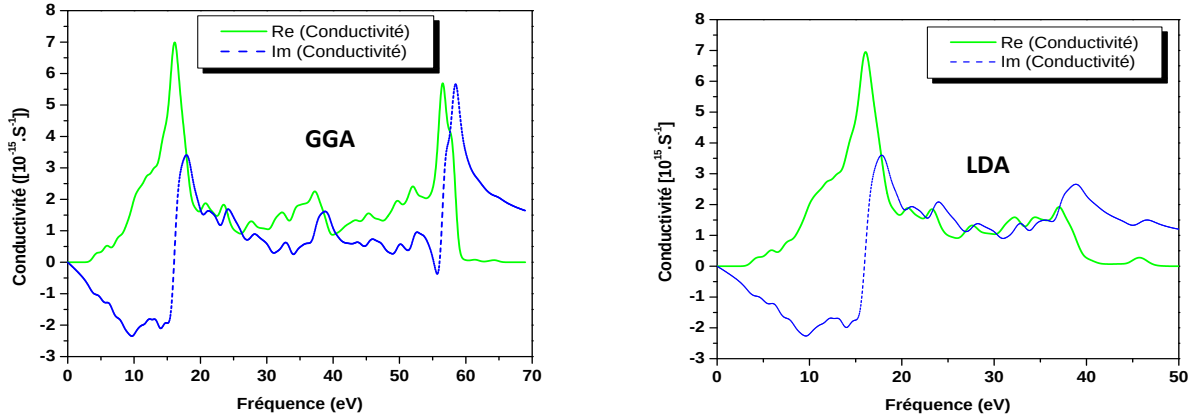


Figure III-19 : Variation de la conductivité de ZnTe en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

Les valeurs de la partie réelle du coefficient de conductivité $\sigma(\omega)$ sont regroupées dans le tableau III-7.

Tableau III-7 : Valeurs de la partie réelle du coefficient de conductivité $\sigma(\omega)$.

Composée	$\sigma(\omega)$		
	GGA	LDA	Autre Calcul
ZnO	6.99	6.95	5.72 ^[16]
ZnS	8.08	9.27	9.55 ^[17]
ZnTe	5.24	5.79	-

III-5.4. Fonction diélectrique des composés ZnX (X = O, S, Te)

La fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ est indispensable pour décrire le comportement des semi-conducteurs soumis à l'effet d'une excitation lumineuse extérieure. Cette fonction est complexe et elle s'écrit comme suit:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{III-6})$$

Tel que $\varepsilon_2(\omega)$ est donné par :

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{8}{3\pi\omega^2} \sum_{nn'} \int |P_{nn'}(K)|^2 \frac{dS_K}{\nabla_{\omega_{nnM}}(K)} \quad (\text{III-7})$$

$P_{nn}(k)$: sont les éléments de la matrice dipolaire entre un état initiale $|nK\rangle$ d'énergie $E_n(K)$ et un état finale $|nK'\rangle$ d'énergie $E_n'(k)$.

S_k : une surface équi-énergétique et $\omega_{nn'}(K) = E_n'(K) - E_n(K)$.

Les figures III-20, III-21, III-22 présentent l'évolution de la partie imaginaire et la partie réelle du constant diélectrique $\varepsilon(\omega)$ en fonction de l'énergie, respectivement, pour les composées ZnX (X = O, S, Te).

Les valeurs de la partie réelle du constant diélectrique $\varepsilon(0)$ sont regroupées dans le tableau III-8.

✚ Pour ZnO

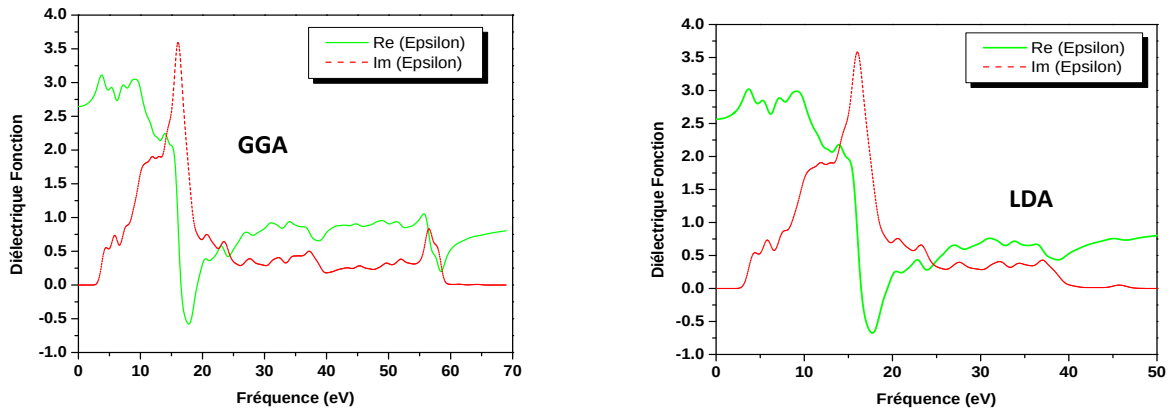


Figure III-20 : Variation du constant diélectrique de ZnO en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

✚ Pour ZnS

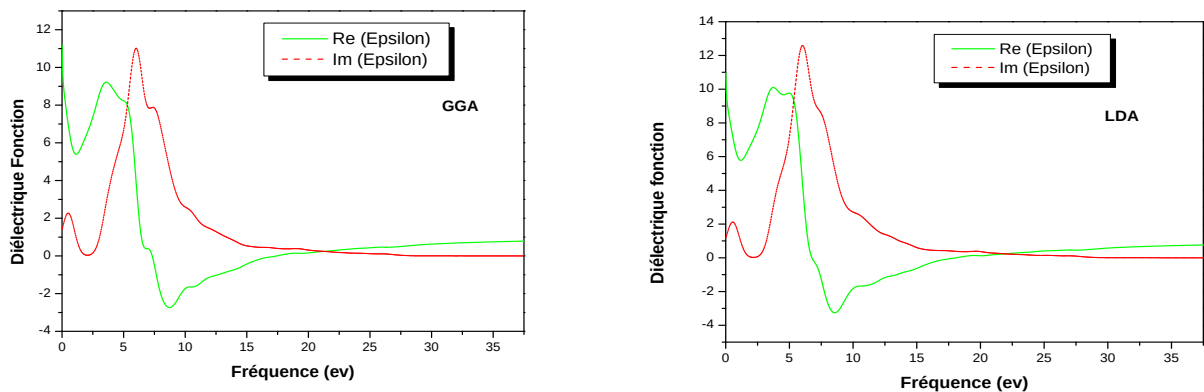


Figure III-21 : Variation du constant diélectrique de ZnS en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

✚ Pour ZnTe

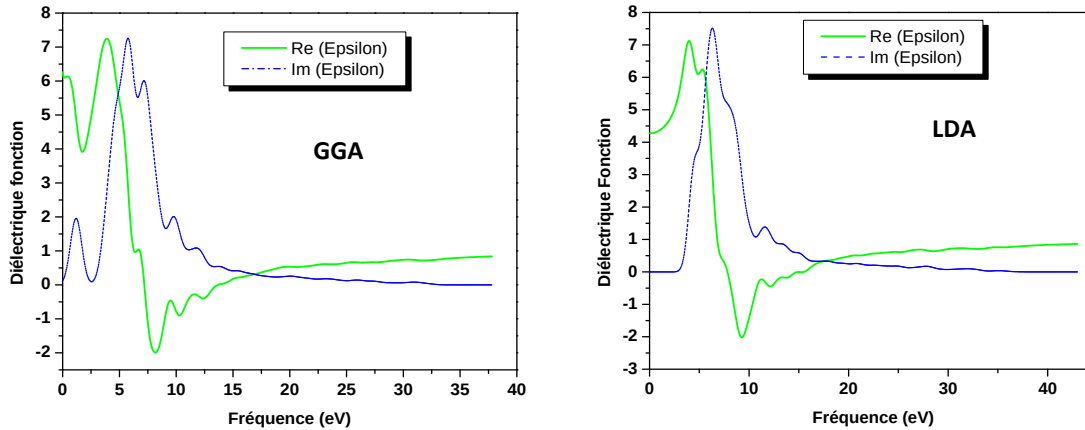


Figure III-22 : Variation du constant diélectrique de ZnTe en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

Les figures III-20, III-21, III-22 montre la partie réelle et imaginaire de la fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$ du semi-conducteurs ZnO, ZnS, ZnTe, calculées sous éclaircissement lumineux inférieur ou égale à 45 eV et à pression et à température nulles. La constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)$ obtenue à pression nulle a été d'environ 2.7, 11, 6.4 pour les composés ZnO, ZnS, ZnTe respectivement pour l'approximation GGA. Ainsi, les pics observés sont produits essentiellement de la transition des électrons de la bande de valence vers les états formant les orbitaux de la bande de conduction.

De plus, On note que nous n'avons pas s'intéressé aux transitions directes introduisant la vibration des phonons et contribuant faiblement à $\epsilon(\omega)$.

Tableau III-8 : Valeurs de la partie réelle du constant diélectrique $\epsilon(0)$ pour les composés ZnX (X = O, S, Te).

$\epsilon(0)$			
Composée	GGA	LDA	Autre Calcule
ZnO	3.11	3.02	3.32 ^[18]
ZnS	9.22	10.15	-
ZnTe	7.24	7.12	8.651 ^[19]

III-5.5. L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est une des constantes optiques les plus importantes. Il en général dépend de la longueur d'onde de l'onde électromagnétique. Le cas où une onde électromagnétique peut perdre son énergie pendant sa propagation, l'indice de réfraction devient complexe ; une partie réelle est habituellement l'indice de réfraction n et la partie imaginaire est dite le coefficient d'extinction k . Ils peuvent être obtenus comme :

$$n(\omega) = \left[\frac{\epsilon_1(\omega)}{2} + \frac{\sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2}}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{III-8})$$

$$k(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2}}{2} - \frac{\epsilon_1(\omega)}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{III-9})$$

La variation de l'indice de réfraction $n(0)$ en fonction de l'énergie est présentée dans les figures III-23, III-24 et III-25, respectivement, pour les composés ZnX (X = O, S, Te) pour les deux approximations GGA et LDA.

✚ Pour ZnO

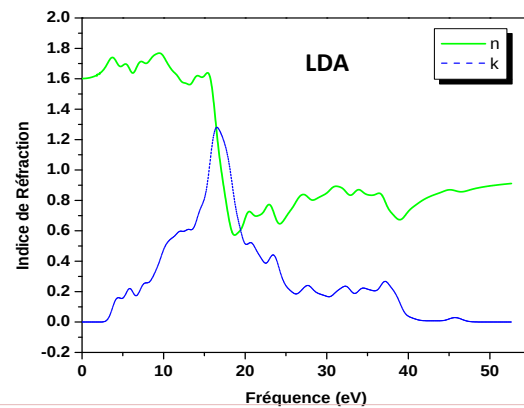
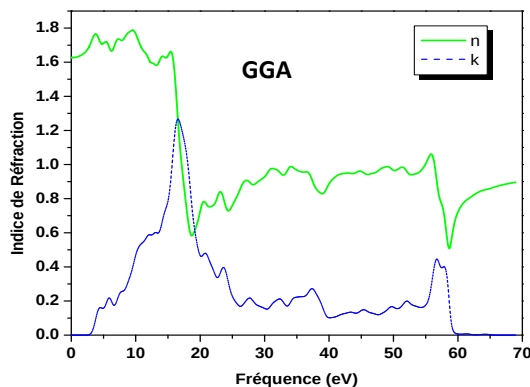


Figure III-23 : Variation de l'indice de réfraction de ZnO en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

Pour ZnS

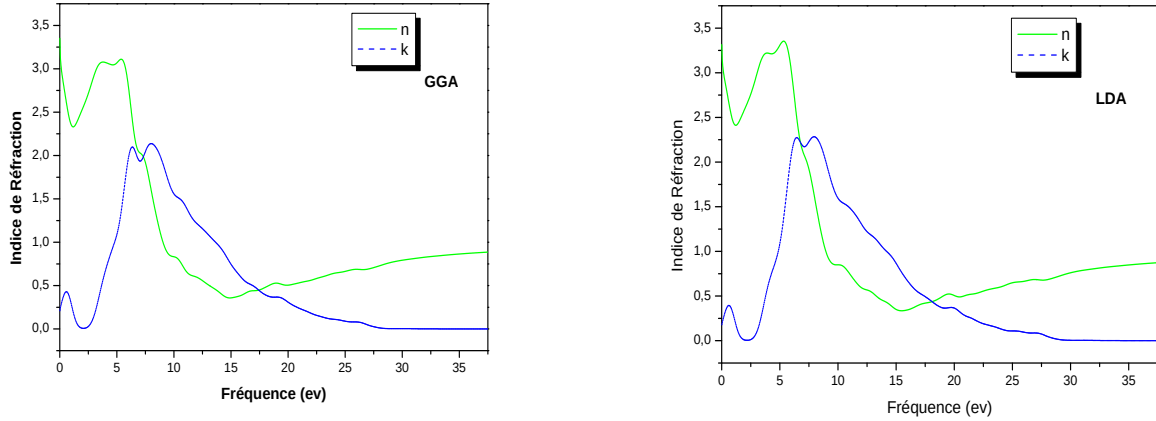


Figure III-24 : Variation de l'indice de réfraction de ZnS en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

Pour ZnTe

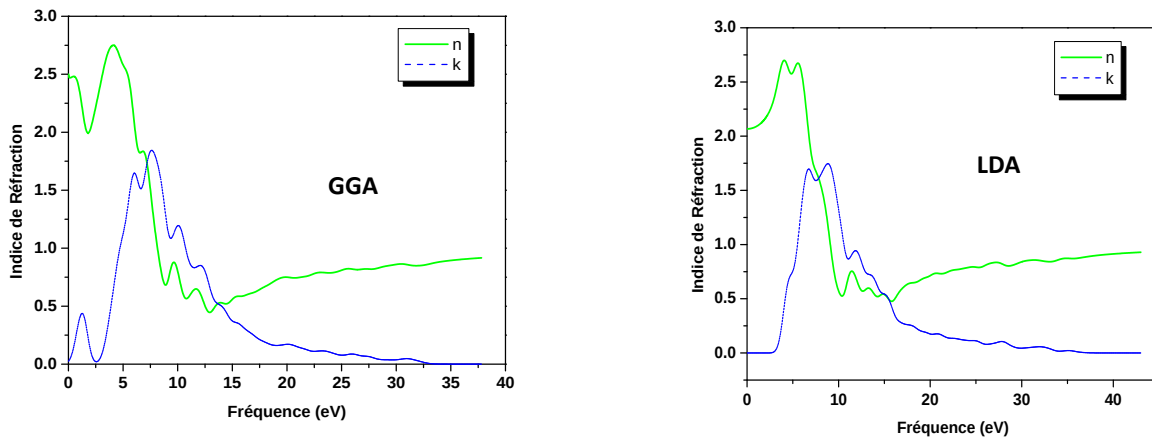


Figure III-25 : Variation de l'indice de réfraction de ZnTe en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.

Les figures III-23, III-24 et III-25 illustre les spectres des indices de réfraction $n(\omega)$ et d'extinction $K(\omega)$ de notre composé. À pression nulle, l'indice de réfraction statique $n(0)$ subie un maximum dans l'intervalle énergétique [1.65, 3.01, 2.85 eV] pour les composés ZnO,

ZnS, ZnTe respectivement pour les deux approximations GGA. De plus, le spectre d'indice de réfraction augmente avec l'évolution d'énergie des photons dans la gamme visible du spectre solaire ensuite un pic dans la région ultraviolette à environ 11.65 eV.

Les valeurs de l'indice de réfraction $n(0)$ sont regroupées dans le tableau III-9.

Tableau III-9 : Valeurs de l'indice de réfraction n_0 pour les composés ZnX (X = O, S, Te) pour les approximations LDA et GGA.

$n(0)$			
Composée	GGA	LDA	Autre Calcule
ZnO	1.796	1.769	1.86 ^[18]
ZnS	3.110	3.351	2.35 ^[20]
ZnTe	2.750	2.938	2.286 ^[19]

III-6. Conclusion

Dans ce chapitre on a réussi de calculer les propriétés structurales, électroniques et optiques des composés ZnO, ZnS et ZnTe par les deux approximations (GGA et LDA) en utilisant la technique du pseudo-potentiel et la méthode de la base des ondes planes et cela dans le cadre de la DFT implémentée dans le code CASTEP. Plusieurs remarques ont été tirées :

- Les propriétés structurales obtenues, à l'état d'équilibre, sont en bon accord avec ceux calculées par d'autres méthodes ab-initio et les données expérimentales. On a remarqué aussi que le paramètre de maille, le volume calculés dans notre travail, sont en bonne concordance avec d'autre calculs.
- On a remarqué que les composés ZnO, ZnS et ZnTe ont des gaps directes. Les valeurs calculées de gap de ces composés en utilisant l'approximation GGA sont plus proches avec ceux d'autre calculs ab-initio.
- Les propriétés optiques obtenus, telles que: la réflectivité, la fonction diélectrique, le coefficient d'absorption, le coefficient de conductivité et l'indice de réfraction sont meilleurs

et acceptables pour une application photovoltaïque. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats théorique, aussi expérimentaux disponibles au littérature.

III-7. Références

- [1] F. D. Murnaghan, N. Acad. Sci. U. S. A. 30, 5390 (1994).
- [2] T. H. Fischer, J. Almlof, "General methods for geometry and wavefunction optimization", J. Phys. Chem., 96, 9768-9774 (1992).
- [3] H. Zerfaoui, D. Dib, M. Rahmani, "Study by simulation of the SnO₂ and ZnO anti-reflection layers in n-SiC/p-SiC solar cells", AIP Conference Proceedings 1758, 030029 (2016).
- [4] K.Elmer. "Resistivity of polycrystalline zinc oxide: current status and physical limit". Journal of Physics D: Applied physics, vol. 34, no. 21, page 3097, 2001.30, 40.
- [5] Brahmi Badr-Eddine Nabil, "étude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc", thèse de doctorat, université Tlemcen (2013).
- [6] O.Boussoum, "Study of the effect of a thin layer of TiO₂ on the parameters of a silicon solar cell", Mémoire de magister, Mouloud Memmeri Tizi-Ouzou, 2011.
- [7] M. Schowalter, D. Lamoen, A. Rosenauer, Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 4938.
- [8] Inorganic Crystal Structure Database (Gmelin Institut, Karlsruhe, (2001).
- [9] S.H. Wei and A. Zunger, Phys. Rev. B **37**, 8958 -8981(1988).
- [10] R. Khenata, A. Bouhemadou, M. Sahnoun, Ali. H. Reshak, H. Baltache and M. Rabah, Computational Materials Science **38**, 29–38 (2006).
- [11] Y.S. Lee, Y.C. Peng, J.H Lu, Y.R Zhu, H.CWu, "Electronic and optical properties of Ga-doped ZnO" , Taipei 24301, TSF-33380; P 7.
- [12] S. Kumer, R.Monojitmilrra, "Micro wave semiconductor Devices" , P 189, New Delhi (2006).
- [13] N.A. Noor, N. Ikram, S. Ali, S. Nazir, S.M. Alay-e-Abbas, A. Shaukat, J. Alloys Compd. 507 (2010) 35.

- [14] S. M. Sze, K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley, Hoboken, New Jersey, 2007.
- [15] S.J. Demchenko, D. Alivisatos, A Paul, "Optical properties of ZnO/ZnS and ZnO/ZnTe heterostructures for photovoltaic application", *Nano Lett.*, 2007, 7 (8), pp 2377–2382.
- [16] E. Abdellah, : "Contribution au Développement des Matériaux Nano-Composites à Base de ZnO et Polymère Etude Structural et Optique", Master Thesis, Université Des Frere Mentouri Constantine, 2015.
- [17] F.Ozutok, K.Erturk, V.Bilgin, ; "growth, electrical, and optical study of ZnS : MnZ Thin films", *University physics, ACTA physica*, vol 121(2012), p 221.
- [18] Elkhalidi, Zahira, Hartiti, B.Fadili, S.Thevenin, P.Siadat, Maryam, "Propriétés structurales, optiques et électriques de ZnO préparé par Spray Pyrolysis", vol 13, p 250-258, (2017).
- [19] B. Bahloul, B. Deghfel, L. Amirouche, A. Bentabet, Y. Bouhadda, "Ab Initio Study of The Structural, Electronic and Optical Properties of ZnTe Compound", *LERMPS, AIP* 1653, 020019 (2015).
- [20] U. Gangopadhyay, K. Kim, S. K. Dhungel, H. Saha, J. Yi, "Application of CBD-zinc".