

PROPRIETES ELECTRONIQUES DU ZnX (X=S, Se, Te) VIA DES APPROXIMATIONS QUANTIQUES: ETUDE PAR LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE

B. N. Brahmi ^(a, b,1), **A. E. Merad** ^(a, c,2), **M. R. Boufatah** ^(d)

^{a)} Equipe: Physique de l'Etat Solide, Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université A Belkaïd BP 119, 13000, Tlemcen, Algérie.

^{b)} Département d'Electronique, Faculté de Sciences et Sciences de l'Ingénieur, Université H Ben Bouali chlef, Algérie.

^{c)} Le Abdus Salam Internatinal Center for Theoretical Physics (ICTP), Strada Costiera 11 I-34014 Trieste, Italy

^{d)} Equipe: Calcul Parallèle, Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université A Belkaïd, BP 119, 13000 Tlemcen, Algérie

Email : ¹⁾ nbrahmi@gmail.com, b_brahmi@mail.univ-tlemcen.dz, ²⁾ k_merad@mail.univ-tlemcen.dz

Résumé

Récemment, il y a un intérêt considérable pour les semi-conducteurs II–VI et leurs alliages dû à leur application dans les appareils photovoltaïques, comme cristaux électro-optiques et opto-électronique et de leurs application à la réalisation récente de diodes lumière (LED a couleur verte basé sur ZnTe). Cela a motivé plusieurs théoriciens a faire l'étude sur ces compensée, leurs propriétés structurales et thermodynamiques dans cette famille et leurs alliages et réviser beaucoup de propriétés physiques fondamentales basé sur les calculs de l'Ab Initio et y compris le couplage $p-d$ qui leur sont associé[1],[2].

De ce fait, notre travail consiste à étudier et réviser au même temps la structure électronique des composés (ZnX : X=S, Se, Te) en utilisant les différentes approximations basées sur la densité locale (LDA) et le gradient généralisé (GGA). Ainsi les structures de bande, les énergies de gap et les densités d'états sont bien déterminées et améliorées. La comparaison de nos résultats avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux montre l'existence d'un très bon accord.

Mots clés

Approximations quantiques – Structure électronique – Semi-conducteurs ZnX (X=S,Se,Te) .

Introduction

Les monochalcogénides à base de zinc (ZnX : X=S, Se, Te) sont des prototypes des semi-conducteurs II-VI se cristallisant dans la phase zinc blende et sont caractérisés par une bande interdite large et une isotropie optique. Ils sont considérés comme d'excellents candidats dans la technologie des dispositifs optiques, des mémoires optiques à haute densité, des conducteurs transparents, des dispositifs lasers solides, des photo-détecteurs, des cellules solaires, ...etc.[1], [2].

Des études théoriques et expérimentales ont été effectuées afin de déterminer leurs différentes propriétés physiques. Ces études montrent soit un désaccord soit une insuffisance pour certaines propriétés comme le spectre de la réflectivité et l'effet de pression sur les constants diélectriques. D'un autre côté, la présence d'un fort couplage $p-d$ nécessite une sérieuse révision des propriétés en tenant compte des différentes approximations quantiques basées sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT). Nous pouvons citer : l'Approximation de la Densité Local LDA introduite par Perdew-Wang en 1992, l'approximation LDA+U (U est le potentiel du champ moyen multi orbital de Hubbard), l'Approximation du Gradient Généralisé GGA avec ces variantes GGA-PBE introduite par Perdew-Burke-Ernzerhof en 1996, Meta-GGA introduite par Tao al en 2003 et GGA-WC introduite par Wu-Cohen en 2006.

De ce fait, notre travail consiste à étudier et réviser au même temps la structure électronique des composés (ZnX : X=S, Se, Te) en utilisant l'approximation de la densité Locale (LDA), les approximations du gradient généralisé (GGA-PBE, GGA-WC). Ainsi on représentera les structures de bande et leurs densités d'états d'où on va comparais nos résultats avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux.

1. Détail De Calcul

Nous avons utilisé dans ce travail des méthodes d'approximation tels que l'Approximation de la Densité Local (LDA), l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA) avec ces variantes GGA-PBE et GGA-WC en utilisant le code Wien2k. Les calculs sont préformé par un $R_{MT} k_{max}=8$ (R est le plus petit Rayon de Muffin-Tin et le k_{max} est la valeur de coupure pour les ondes plane) pour le paramètre de la convergence pour que le calcul de stabilité et de convergence quant l'énergie est achever. D'autres valeurs de paramètres sont $G_{max} = 10$ (magnitude de plus grand vecteur dans densité de charge de l'expansion de Fourier ou les ondes plane sont coupé), $RMT(Zn) = 2.5a.u.$, $RMT(Se) = 2.33a.u.$, $RMT(S) = 1.638a.u$ et $RMT(Se) = 2.0a.u.$ (Rayon de Muffin-Tin). Le processus de

l'itération est répété jusqu'à l'énergie totale qui définit la séparation de valence et états du coeur a été choisie comme -6Ry.

Le calcul de l'énergie totale est obtenu à partir d'un calcul d'optimisation de l'équation de *Murnaghan Bish* à fin d'obtenir le paramètre de maille, le module de compression et la dérivée de la pression. Les résultats sont résumés dans le Tableau 1 en les comparant avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

Matériaux	Méthodes	Références	a_0 (Å)	B (GPa)	B'
ZnTe	GGA-PBE GGA-WC LDA	Exp(1)	6.089	50.9	5.04
		notre travail	6.2331	45.8682	2.8526
		notre travail	6.1236	50.5554	4.4461
		notre travail	6.052	56.1288	5.4647
		[1]	6.043	54.18	4.11
		[2]	6.049	–	–
ZnS	GGA-PBE GGA-WC LDA	Exp(3)	5.417	81.8	3.6
		notre travail	5.5336	74.8509	3.7839
		notre travail	5.4463	84.0959	4.037
		notre travail	5.3928	90.5737	4.77
		[3]	5.436	76.9	3.5
		[4]	5.411	–	–
ZnSe	GGA-PBE GGA-WC LDA	Exp(1)	5.681	66.2	3.7
		notre travail	5.79	59.0175	6.5357
		notre travail	5.7024	78.2933	8.9625
		notre travail	5.6466	74.4516	1.9881
		[3]	5.688	63.9	3.8
		[4]	5.669	–	–

Tableau 1 : Le paramètre de maille a_0 , le module de compression B et la dérivée de la pression B'

Pour le ZnTe, ZnS, ZnSe. Les résultats obtenus ont montré un très bon accord en les comparant à ceux obtenue par l'expérience,

Matériaux	Méthodes	Références	Pourcentage (%)
ZnTe	GGa-PBE	notre travail	2.36
	GGa-WC	notre travail	0.56
	LDA	notre travail	0.60
	LDA	Référence [1]	0.75
	LDA	Référence [2]	0.65
ZnS	GGa-PBE	notre travail	2.15
	GGa-WC	notre travail	0.54
	LDA	notre travail	0.44
	LDA	Référence [3]	0.35
	LDA	Référence [4]	0.11
ZnSe	GGa-PBE	notre travail	1.91
	GGa-WC	notre travail	0.37
	LDA	notre travail	0.60
	LDA	Référence [1]	0.12
	LDA	Référence [2]	0.21

Tableau 2 : Comparaison en pourcentage des paramètres de maille a_0 des méthodes utilise à celle de l'expérience

Nous pouvons constater que les deux méthodes GGA-WC et LDA donne une amélioration comparée à la GGA - PBE de point de vue structural.

2. Propriétés Électroniques

	Méthodes	Les Énergies (eV)						Références	
		$E_g(\Gamma^C - \Gamma^V)$	$E_g(X^C - \Gamma^V)$	$E_g(L^C - \Gamma^V)$	E_d	δE_d	UVBM		TVBM
ZnTe	GGA-PBE	0.938	2.360	1.690	-6.532	0.62	4.789	11.412	notre travail
	GGA-WC	1.044	2.194	1.657	-6.865	0.68	5.150	11.782	notre travail
	LDA	1.108	2.161	1.651	-6.910	0.70	5.374	12.047	notre travail
	LDA	1.16	2.11	1.65	-7.22	0.24	5.47	12.12	[1]
	Expt	2.38	-	-	-9.84	-	-	-	[5]
ZnS	GGA-PBE	1.781	3.603	3.144	-6.060	0.92	4.858	12.688	notre travail
	GGA-WC	1.834	3.326	3.106	-5.903	1.03	5.227	13.014	notre travail
	LDA	1.855	3.223	3.079	-6.117	1.11	5.450	13.196	notre travail
	LDA	2.37	-	-	-	0.67	-	-	[3]
	Expt	3.82	-	-	-	-	-	-	[6]
ZnSe	GGA-PBE	1.017	3.173	2.417	-6.072	0.73	4.843	12.886	notre travail
	GGA-WC	1.029	2.879	2.376	-6.484	0.81	5.178	13.206	notre travail
	LDA	1.048	2.792	2.352	-6.396	0.87	5.380	13.416	notre travail
	LDA	1.79	-	-	-	0.60	-	-	[3]
	Expt	2.87	-	-	-	-	-	-	[6]

Tableau 3 : Calcul des différentes énergies par les différentes méthodes d'approximation compare à d'autres résultats (eV)

Les énergies de la structure de Bande des différents composants ZnTe , ZnS, ZnSe sont représentés respectivement sur la *figure 1* et qui calculées à partir des différentes approximations (GGA-PBE, GGA-WC, LDA). En les comparant avec d'autres travaux, nous avons constaté l'obtention d'un très bon accord et cela peut être confirmé par la réalisation des densités d'états qui sont donnés dans la *figure 2*.

D'après les résultats obtenus nous pouvons conclure que les gaps obtenus par LDA sont plus important par rapport à celle obtenue par les méthodes de la GGA de point de vue électronique et cela au niveau de $\Gamma-\Gamma$, Donc le choix de la méthode d'approximation utilisée dans ce travail nous a permis de dire que les deux d'approximation LDA et GGA-WC donne des meilleures performances par rapport à celle donnée par la GGA - PBE . Le calcul de l'énergie de l'état « d » et sont épaisseur montre qu'il y a une variation pour les différentes méthodes, ce qui nous mènes à dire que pour adhéré le couplage $p-d$, il judicieux d'après les calculs d'utiliser l'approximation de la densité locale, et en comparant les résultats obtenues par rapport à ceux de l'expérience nous pouvons remarquer que la méthode de la LDA s'approche le plus des résultats expérimentaux.

Conclusion

En effet, la diversité des méthodes d'approximations est tells qu'il est important, pour résoudre correctement et dans les meilleurs conditions le problème de structure électronique ou de couplage entre les états p et les états d , d'avoir une idée de la méthode ou des méthodes les mieux appropriées pour déterminer les propriétés électroniques et structurales de ces composants, Nous pouvons dire que les deux méthodes d'approximation (LDA, GGA-WC) donne une amélioration à l'expérience.

Remerciement

L'auteur tien a remercier Le Dr B,Kanoun (Université de Namur, Belgique) Pour ces discussion qui on enrichies ce travail et sur tous ces différents critiques sur le manuscrit.

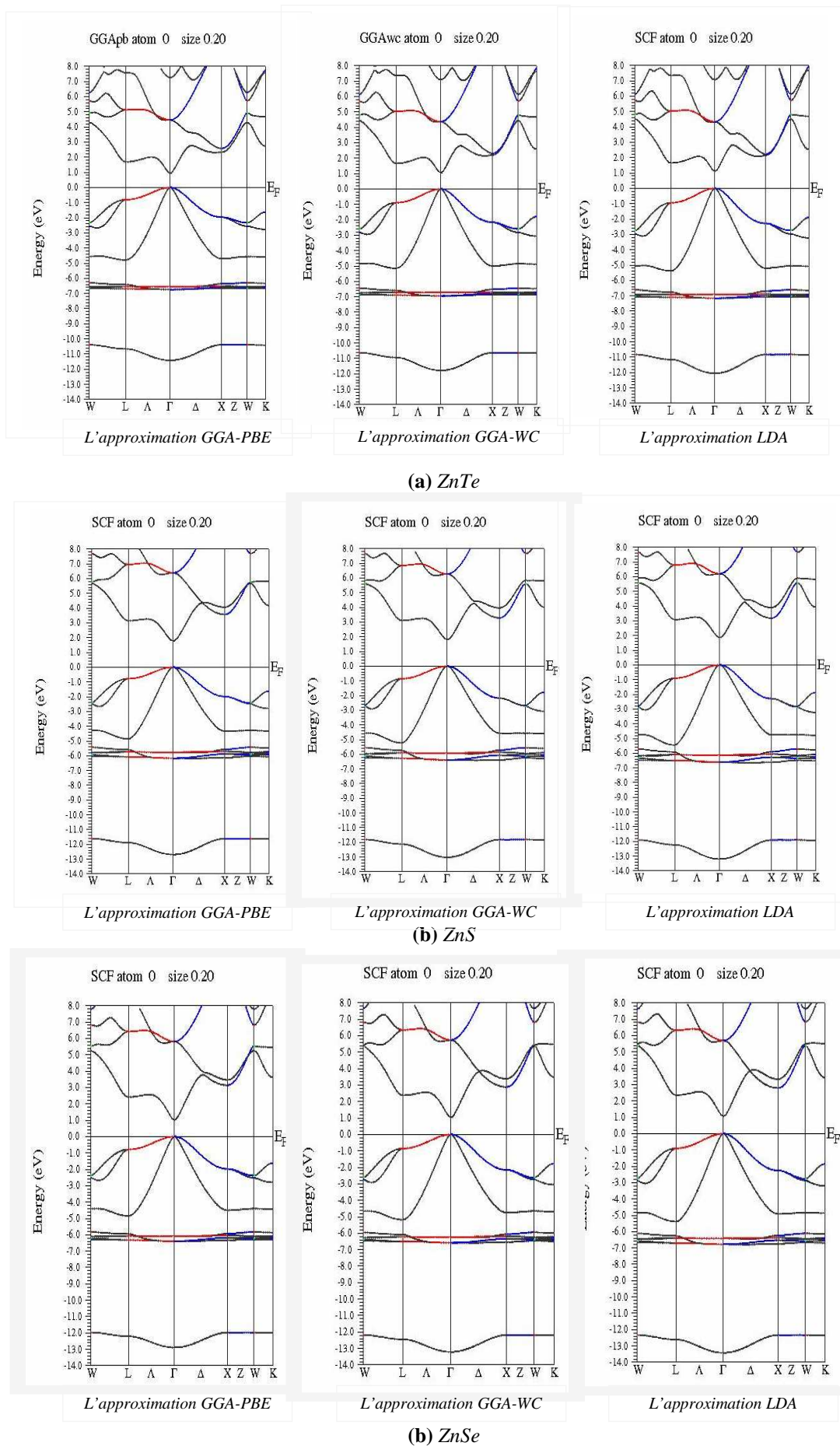


Figure 1 : Structure de Bande calculée par les approximations GGA-PBE, GGA-WC, LDA

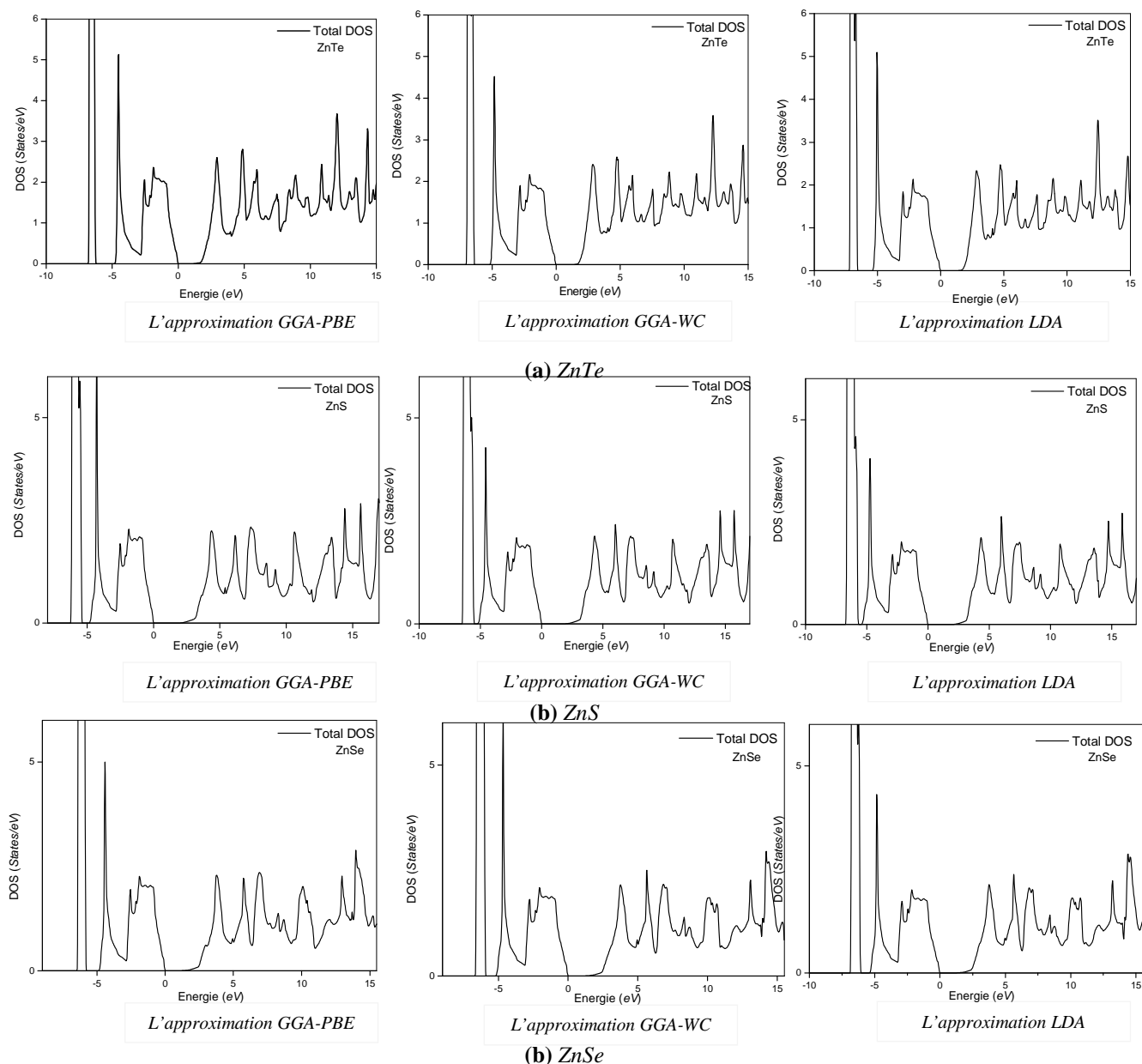


Figure 2 : Les densités d'état total calculé par les approximations GGA - PBE, GGA - WC, LDA

Références

- [1] A.E. Merad ,M.B.Kanoun , G. Merad , J. Cibert , H. Aourag, Full-potential investigation of the electronic and optical properties of stressed CdTe and ZnTe, Materials Chemistry and Physics Elsevier , 92 333–339. (2005)
- [2] A.E. Merad , M.B. Kanoun , S. Goumri-Said, Ab initio study of electronic structures and magnetism in ZnMnTe and CdMnTe diluted magnetic semiconductors. Journal of Magnetism and Magnetic Materials Elsevier, 302 536–542. (2006).
- [3] Sun-Ghil Lee and K.J.Chang, First principles study of the structural properties of MgS, MgSe, ZnS and ZnSe based superlattices, Phys review B Vol52, 3 (1995).
- [4] N.Kh. abrikosov, V.B.Bankina, L.V.Poretskaya, L. E.Shelimova, and E.V.Skudnova, Semiconducting II-VI, IV-IV and V-VI Compounds, P 2 (plenum, New York, 1969).
- [5] M. Lidner, G.F. Sch'otz, P. Link, H.P. Wagner, W. Kuhn, W. Gebhardt, J. Phys. Condens. Matter 4 (1992) 6401.
- [6] W.H.Strehlow and E.L.Cook, J. Phys. Chem. Ref. Data 2, 163 (1973)
- [7] D.J Chadi, Phys. Rev. Lett.72,534 (1994).
- [8] S.H.Wei and A.Zunger, Phys. Rev. B 37, 8958 (1988)
- [9] I.Brosier et al, in Physics of II-VI and VII compounds, Semimagnetic Semiconductors, edited by O.Madelung, M.Schulz, and H.Weiss, LAndolt-Bornstein, New Series, Goup III, Vol. 17, Pt. B (Springer, Berlin, 1982), and references therein.
- [10] Stephan Lany and Alex Zunge, Anion vacancies as a source of persistent photoconductivity in II-VI and chalcopyrite semiconductors, PHYSICAL REVIEW B 72, 035215 (2005).