

Table des matières

Etude ab-initio des propriétés électroniques de CdTe/ ZnTe/ ZnSe/ZnS : effets de polarisation

INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 :	
Propriétés des matériaux semi-conducteurs II-VI : CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS	3
1. Introduction	4
2. Propriétés des matériaux semi-conducteurs II-VI	5
2.1 Propriétés structurales	5
2.2 Propriétés électroniques	7
2.3 Propriétés optiques	8
3. Propriétés des composées binaires ZnS, ZnSe, ZnTe et CdTe	9
4. Propriétés des alliages ternaires CdZn-VI	10
4.1 Propriétés de l'alliage ternaire CdZnS	10
4.2 Propriétés de l'alliage ternaire CdZnSe	11
4.3 Propriétés de l'alliage ternaire CdZnTe	13
5. Propriétés des hétérostructures à puits quantiques associés	14
6. Conclusion	15
7. Références	16

CHAPITRE 2 :

Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des matériaux II-VI, CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS. 18

1. Introduction	19
2. Présentation la méthode de calcul par le code Wien2k à base de la théorie DFT	20
3. Résultats numériques	21
3.1 Propriétés structurale et électronique du composé binaire ZnTe	21
a. Variation d'énergie en fonction du volume	21
b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de ZnTe	22
3.2 Propriétés structurale et électronique du composé binaire CdTe	27
a. Variation d'énergie en fonction du volume	27
b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de CdTe	28
3.3 Propriétés structurale et électronique du composé binaire ZnS	33
a. Variation d'énergie en fonction du volume	33
b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de ZnS	34
3.4 Propriétés structurale de composé ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$ pour différentes compositions en zinc ($x=0.25, 0.50$ et, 0.75)	37
a. Variation d'énergie en fonction du volume	37
b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de $Cd_{1-x}Zn_xTe$	38
3.5 Structure de bande (BC et BV) du $Cd_{1-x}Zn_xTe$ par l'approximation GGA	52
3.6 Energie de la bande interdite en fonction de la composition x de Zinc	53
3.7 Paramètre de maille en fonction de la composition x(Zn)	54
3.8 Coefficient c/a en fonction de la composition x(Zn)	55
4. Conclusion	55
5. Références	57

CHAPITRE 3 :

Etude des effets de polarisation et de ferroélectricité dans les matériaux II-VI CdZnTe. 58

1. Introduction 59
2. Etude des effets de polarisation de CdZnTe 60
3. Effets de la Ferroélectricité de CdZnTe 63
4. Conclusion 65
5. Références 66

CONCLUSION 67

INTRODUCTION

Dans ce travail de mémoire de Magister, nous proposons d'étudier les propriétés électroniques des matériaux semi-conducteurs II-VI qui présente une large gamme spectrale qui s'étend entre 1.5 eV et 3.8 eV de la famille de Cadmium (CdS, CdSe, CdTe) et du Zinc (ZnS, ZnSe et ZnTe).

L'objectif est de procéder à une étude d'optimisation basé sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) en utilisant le code wien2k qui fonctionne sous système exploitation l'UNIX pour déterminer les propriétés électroniques (la densité d'état et la structure de bande). Cela ce fait pour chaque composé binaire et pour les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt en utilisant les deux approximations GGA et LDA.

Dans les matériaux II-VI, les directions $\langle 111 \rangle$ sont des axes polaires, les plans $\{111\}$ sont formés d'atomes de la colonne II, alors que les plans $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$ sont formés d'atomes de la colonne VI. Une autre singularité directement liée à l'absence de centre de symétrie est le fait que se sont des matériaux piézoélectriques par conséquent on peut générer des charges électriques de signes opposés sur les faces A et B, en appliquant une contrainte le long de l'axe polaire $\langle 111 \rangle$. Ces résultats ressemblent aux résultats observés pour une structure hexagonale Würtzite. Les alliages ternaires à base de CdZnTe, CdZnS et CdZnSe présentent un effet extrêmement intéressant qui est l'effet ferroélectrique. Après une étude très détaillée faite au laboratoire LEMOP sur les matériaux II-VI à base de Cadmium, de Zinc et une panoplie d'hétérostructures, nous avons choisie l'hétérostructure CdZnTe/CdTe qui présente une série d'avantage c'est une

hétérostructure de type I qui présente un bon confinement d'électron et des effets de polarisations piézoélectrique suivant la direction (111). En particulier cette structure est le siège d'un effet extrêmement important qui est l'effet ferroélectrique. Cette ferroélectricité induit des polarisations internes alternées de signe sur les différentes couches. Ce qui se traduit par un effet Stark bidimensionnel sur le puits quantique de CdTe entraînant un red-shift de la transition excitonique.

L'objectif de ce travail est d'étudier l'origine physique de la ferroélectricité dans CdZnTe. Pour cela, nous utilisons la théorie ab-initio qui permet de décrire la distribution de la densité de charge et par conséquent la ferroélectricité.

Ce mémoire est composé de 3 chapitres organisés comme suit :

- Le chapitre I est dédié à l'étude des propriétés électroniques et structurales des matériaux II-VI à base de cadmium (CdTe, CdS, CdSe) et de zinc (ZnS, ZnSe, ZnTe) ensuite les alliages ternaires et les principales hétérostructures à puits quantiques à base de ces systèmes. Nous concluons dans ce chapitre le choix de la meilleure structure pour étudier les effets de polarisation.
- Le chapitre II est réservé à la méthode et la procédure de calcul qui utilise le code Wien2k à base de la théorie FP-LAPW pour les trois phases (Zinc blende, wurtzite et rocksalt) dans les deux approximations LDA et GGA pour les binaires ZnTe, ZnS et CdTe et les alliages ternaires $Cd_xZn_{1-x}Te$ pour différentes compositions en zinc ($x=0.25, 0.75$ et 0.5).
- Le chapitre III nous présentons les résultats de simulations pour la structure choisie CdZnTe/CdTe qui est le siège de deux effets combinés des effets de polarisations et des effets piézoélectrique. Nous utilisons des programmes scientifiques spécialement réalisés au Laboratoire LEMOP. Nous étudions les effets de polarisation et les effets ferroélectriques pour la structure CdZnTe dans la phase rhomboédrale qui présente une transition de phase de second ordre.

Chapitre 1

Propriétés des matériaux semi-conducteurs II-VI :

CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS

1. Introduction	4
2. Propriétés des matériaux semi-conducteurs II-VI	5
2.1. Propriétés structurales	5
2.2. Propriétés électroniques	7
2.3. Propriétés optiques	8
3. Propriétés des matériaux binaires ZnS, ZnSe, ZnTe et CdTe	9
4. Propriétés des alliages ternaires CdZn-VI	10
4.1. Propriétés de l'alliage ternaire CdZnS	10
4.2. Propriétés de l'alliage ternaire CdZnSe	11
4.3. Propriétés de l'alliage ternaire CdZnTe	13
5. Propriétés des hétérostructures à puits quantiques associés	14
6. Conclusion	15
7. Références	16

1. Introduction :

Les matériaux semi-conducteurs II-VI suscitent un intérêt particulier à cause de leurs propriétés remarquables la plus intéressante est l'énergie de la bande interdite comprise entre le visible et l'ultraviolet. Les matériaux II-VI présentent la particularité d'être des matériaux à gap direct, dans la probabilité de transition bande à bande pour les porteurs est considérable, d'où l'intérêt dans le domaine d'application pour l'optique [1].

Les semiconducteurs II-VI sont constitués par l'association d'un élément de la colonne II et un élément de la colonne VI, notre étude est basée sur les composés II-VI à base de Zinc (ZnS, ZnSe, ZnTe) et les composés à base de Cadmium (CdTe, CdS, CdSe), et ces alliages, qui fonctionnent dans la gamme des longueurs d'onde visible jusqu'à l'ultraviolet. L'étude des matériaux II-VI à grand gap en particulier ZnSe ont été initiées dans le but de réaliser des dispositifs émettant dans le bleu et du proche ultraviolet pour le stockage de l'information et dans la gamme du spectre visible en vue d'application pour l'affichage [2]. D'autres études sont orientées vers le domaine des cellules solaires à haute rendement.

Nous commençons par étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires que nous avons choisis à base de Zinc (ZnS, ZnSe, ZnTe) et à base de Cadmium CdTe ensuite nous étudions les différents alliages ternaires après on passe aux alliages ternaires CdZnS, CdZnSe et CdZnTe et enfin les hétérostructures correspondantes CdZnS/CdTe, CdZnSe/CdTe et CdZnTe/CdTe.

2. Propriétés des matériaux semiconducteurs II-VI :

2.1. Propriétés structurales :

Les composés II-VI cristallisent, soit dans la phase cubique Zinc-blende où bien dans la phase hexagonale Würtzite.

2.1.a) Structure Zinc-blende :

La structure cubique se compose des deux réseaux cubiques faces centrées, formées respectivement des atomes de la colonne II et VI décalés l'un de l'autre du quart d'une diagonale égale $a\sqrt{3}/4$ et le taux de remplissage de cette structure égale 0.34.

Cette structure est décrite par un réseau cubique à face centrée et d'un empilement de type ABCABC dans la direction [111] et La base est formée de deux atome en (000) et $(1/4, 1/4, 1/4)$. La maille de bravais contiens 4 atomes du groupe II (Zn, Cd, Hg) dans les coordonnées $(0, 0, 0)$; $(0, 1/2, 1/2)$; $(1/2, 0, 1/2)$; $(1/2, 1/2, 0)$ et Quatre atomes de groupe VI (O, S, Se, Te) dans les positions : $(1/4, 1/4, 1/4)$; $(1/4, 3/4, 3/4)$; $(3/4, 1/4, 3/4)$; $(3/4, 3/4, 1/4)$ et Chaque atome se trouve ainsi au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce et Chaque atome de (Cd) est entouré de quatre atomes de (Te, Se, S).

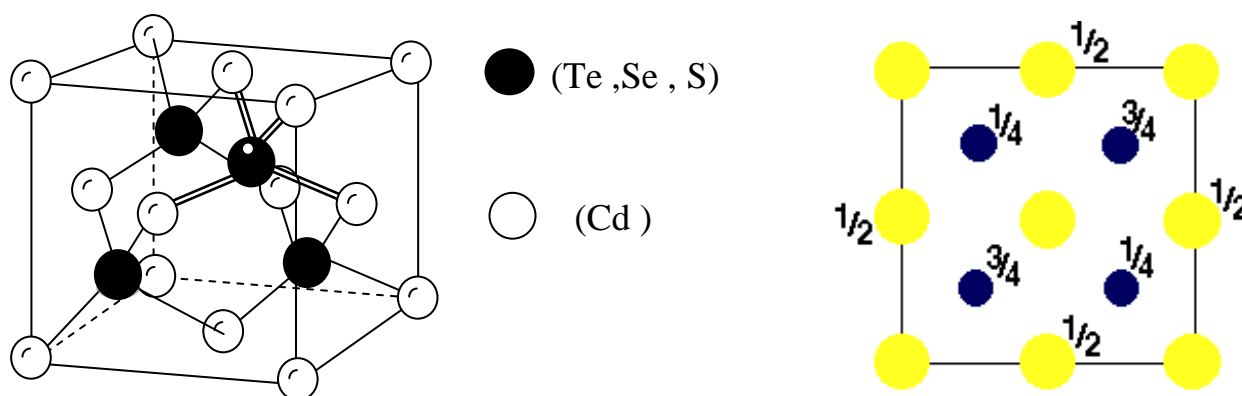


Figure I-1 : La structure cristalline Zinc-blende et Projection de la structure sur le plan (001)

2.2.b) Structure Würtzite (Hexagonal):

La structure hexagonale est constituée de deux réseaux hexagonaux décalés l'un par rapport à l'autre de $3/8$ du paramètre C . La maille élémentaire est constituée deux atomes de groupe II occupant les sites $(0, 0, 5/8)$ et $(2/3, 1/3, 1/8)$ et deux atome de groupe VI occupant les sites $(0, 0, 0)$ et $(2/3, 1/3, 1/2)$. Par conséquent un atome du type II est entouré de quatre atomes du type VI disposés aux sommets d'un tétraèdre régulier. La structure Würtzite possède un empilement de type ABABAB dans la direction $[0001]$.

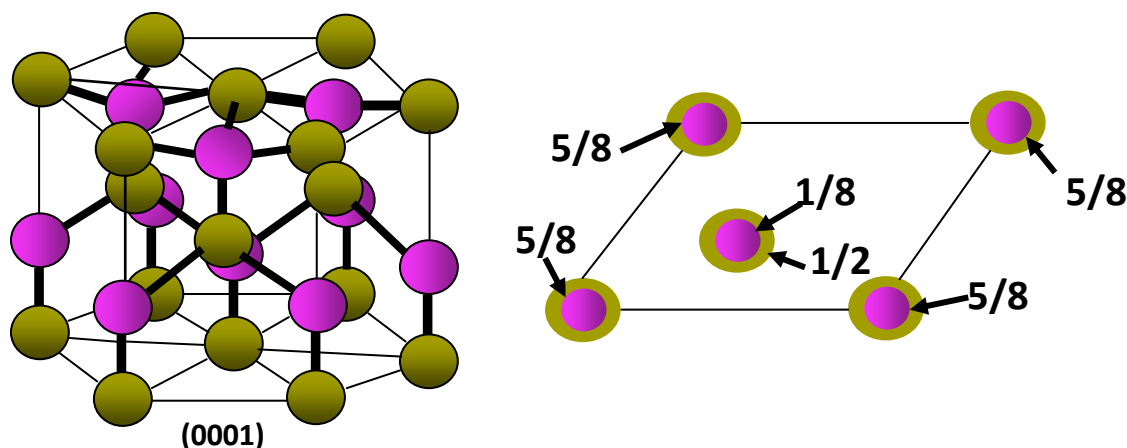


Figure. I.2: La structure Würtzite et Projection de la maille élémentaire de la structure sur le plan $[0001]$ [5]

Les différents paramètres des binaire sont regroupées dans le tableau I.1

Composé	Zinc Blende		Würtzite	
	a (Å)	Eg (eV)	a (Å)	c (Å)
ZnS	5.410 ^[4]	3.741 ^[4]	3.823 ^[3]	6.253 ^[3]
ZnSe	5.573 ^[3]	2.721 ^[6]	3.886 ^[3]	6.625 ^[3]
ZnTe	6.101 ^[3]	2.283 ^[7]	4.314 ^[3]	7.044 ^[3]
CdS	5.832 ^[3]	2.42 ^[9]	4.583 ^[3]	7.484 ^[3]
CdSe	6.050 ^[3]	1.70 ^[9]	4.301 ^[3]	6.007 ^[3]
CdTe	6.479 ^[8]	1.525 ^[9]	4.583 ^[3]	7.484 ^[3]

Tableau I-1 : Paramètres de maille des différents composés semi-conducteurs Cd-VI et Zn-VI dans la phase cubique et würtzite [3][4][5][6][7][8][9].

2.2. Propriétés électroniques :

Les semi-conducteurs II-VI à base de Cadmium et à base de Zinc sont caractérisés par une grande largeur de bande interdite, correspond à des longueurs d'onde situées dans le domaine du visible jusqu'à l'ultraviolet.

Ces matériaux semi-conducteurs possèdent un gap direct qui varie de 3.741 eV (ZnS [3]) à 1.525 eV (CdTe [7]).

Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent au centre de la zone de Brillouin voir la figure I.3.

La bande de valence à $\vec{k} = \vec{0}$ se compose de trois courbures différentes :

- Bande de trous lourds (*hh* pour heavy hole) ;
- Bande de trous légers (*lh* pour light hole) ;
- Bande spin-orbite Δ_{so} .

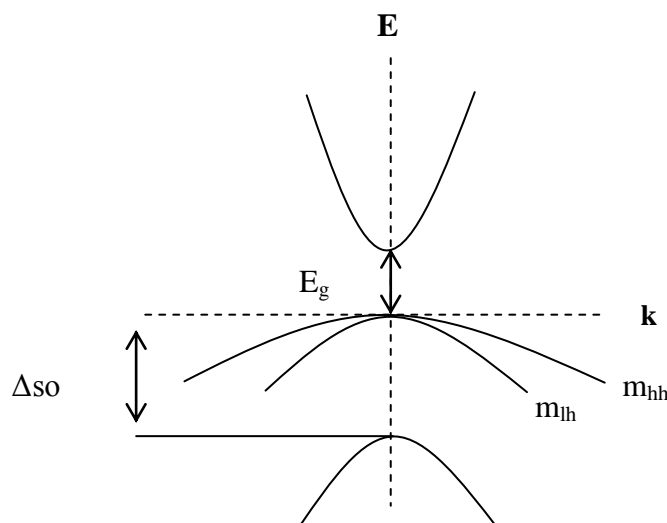


Figure I-3 : Structure de Bande d'un semi-conducteur à gap directe

2.3. Propriétés optiques:

Les propriétés optiques des semi-conducteurs dépendent de leur structure électronique car elles mettent en jeu des transitions entre différents états électroniques.

Cette transition peut se faire sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect.

Selon ces propriétés, le choix des matériaux se fait pour les différentes applications désirer.

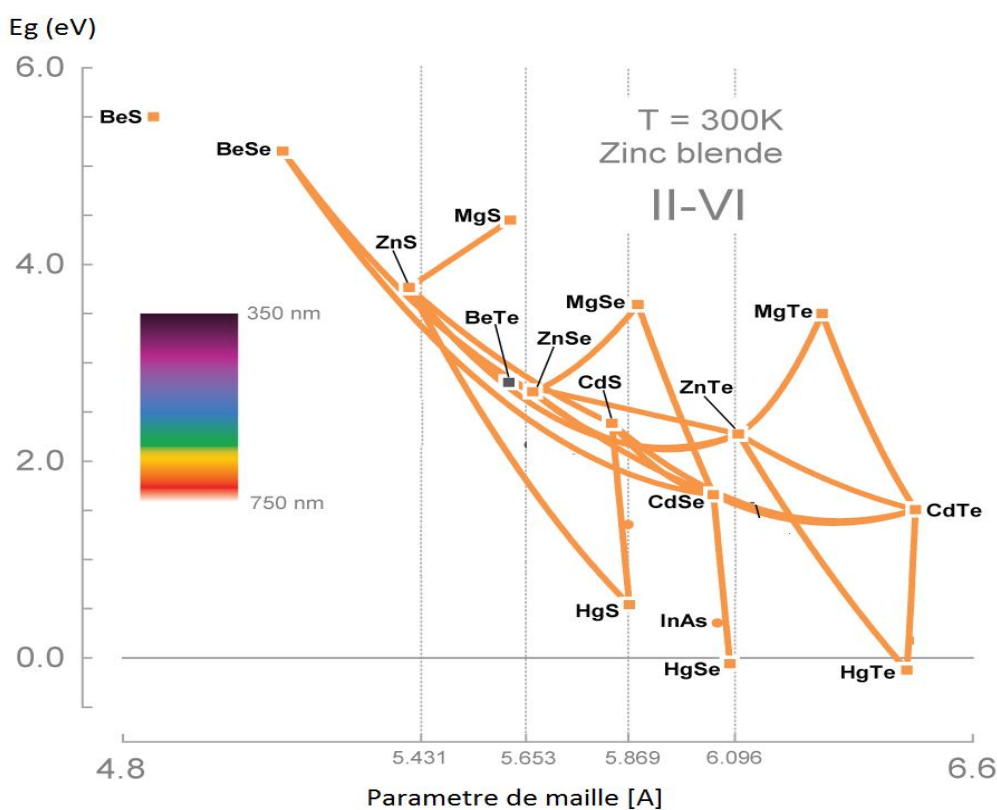


Figure I-4 : Bande interdite des semi-conducteurs II-VI en fonction du paramètre de maille [13].

La figure I-4 montre que la principale utilisation des matériaux II-VI à base de Zinc et Cadmium, est la réalisation des dispositifs fonctionnant dans le domaine du visible jusqu'à l'ultraviolet, tels que les diodes électroluminescentes les diodes lasers ou les détecteurs [10].

Ne remarquons aussi que l'incorporation de mercure permet de diminuer considérablement le gap pour réaliser des dispositifs qui fonctionnent dans l'infrarouge moyen jusqu'à l'infrarouge lointain. Ces matériaux sont très utilisés pour des applications militaires.

3. Propriétés des composés binaires ZnS, ZnSe, ZnTe et CdTe

Les matériaux II-VI à base de Zinc et à base de Cadmium sont très utilisés dans plusieurs domaines tels que l'affichage moderne sur des écrans plats, des sondes, et des lasers. Ces matériaux possèdent des gaps directs allant de 1,525 eV pour le CdTe jusqu'à 3.765 eV pour le ZnS. Ces matériaux possèdent aussi des coefficients d'absorptions optiques élevées.

propriétés	ZnS	ZnSe	ZnTe	CdTe
a [Å]	5.410 ^[3]	5.573 ^[3]	6.101 ^[3]	6.479 ^[8]
E _g [eV]	3.765 ^[4]	2.704 ^[6]	2.276 ^[7]	1.525 ^[9]
$e\chi$ [eV]	3.9 ^[4]	4.09 ^[6]	3.5 ^[7]	4.7 ^[11]
Δ_{so} [eV]	0.067 ^[4]	0.42 ^[4]	0.97 ^[7]	0.90 ^[11]
m^*_{e}/m_0	0,28 ^[4]	0,17 ^[6]	0,15 ^[7]	0.102 ^[11]
m^*_{lh}/m_0	0,23 ^[4]	0,149 ^[6]	0,154 ^[7]	0.103 ^[11]
m^*_{hh}/m_0	1,76 ^[4]	1,44 ^[6]	1,27 ^[7]	1.380 ^[11]
μ_e [cm ² /Vs]	230 ^[16]	400 ^[18]	1500 ^[20]	4×10 ⁴ ^[11]
μ_h [cm ² /Vs]	40 ^[17]	110 ^[19]	102 ^[21]	3.8×10 ⁴ ^[11]

Tableau I-2 : Les différentes propriétés des composés binaires II-VI Structure

Zinc Blende.

A partir du tableau I.2, nous observons une forte dépendance des propriétés avec la taille des atomes constituant le composé binaire.

- le paramètre de maille augmente dans les atomes lourds

- l'énergie de la bande interdite est inversement proportionnelle à la taille de l'atome et au nombre atomique.
- Ces variations sont directement liées à la nature de la liaison.

4. Propriétés des alliages ternaires CdZn-VI :

Les propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires II-VI peuvent être déduites à partir de leurs constituants binaires.

- La variation de l'énergie du gap :

La variation de l'énergie de la bande interdite est donnée par la relation suivante :

$$E_g(A_x B_{1-x} C) = xE_g(AC) + (1 - x)E_g(BC) - x(1 - x)b \quad (I.1)$$

b : est le paramètre du bowing «il exprime l'effet du désordre».

- La variation du paramètre de maille :

La variation du paramètre de maille des alliages ternaires est donnée par la loi de variation du cristal virtuel:

$$a_{ABC}(x) = xa_{AB} + (1 - x)a_{BC} \quad (I.2)$$

4.1. Propriétés de l'alliage ternaire CdZnS :

La variation de l'énergie du gap de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xS$ est donnée par [14] :

$$E_g(Cd_{1-x}Zn_xS) = xE_g(ZnS) + (1 - x)E_g(CdS) - x(1 - x)b \quad (I.3)$$

$$E_g(Cd_{1-x}Zn_xS) = 2.384x + 3.765(1 - x) - x(1 - x)0.45 \quad (I.4)$$

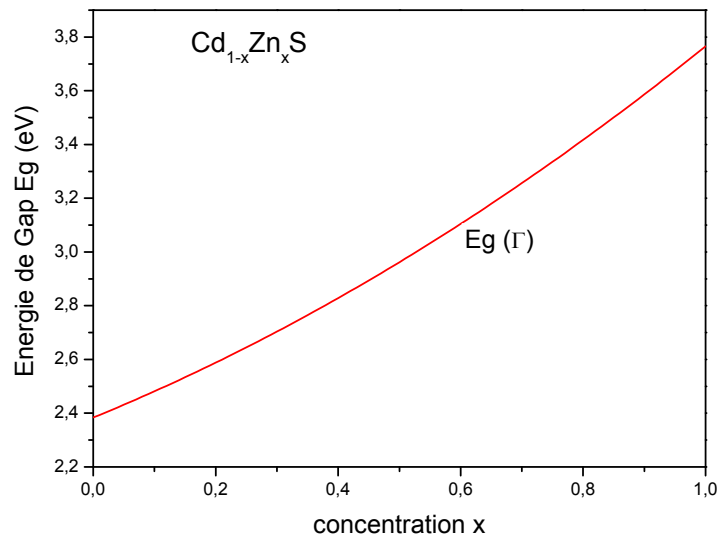


Figure I-5: Variation de l'énergie du gap en fonction de la composition de l'alliage CdZnS à 300K.

La variation du paramètre de maille de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xS$ est donnée par :

$$a(CdZnS) = x \cdot a(ZnS) + (1 - x) \cdot a(CdS) \quad (I.5)$$

$$a(CdZnS) = 5.410x + 5.835(1 - x) \quad (I.6)$$

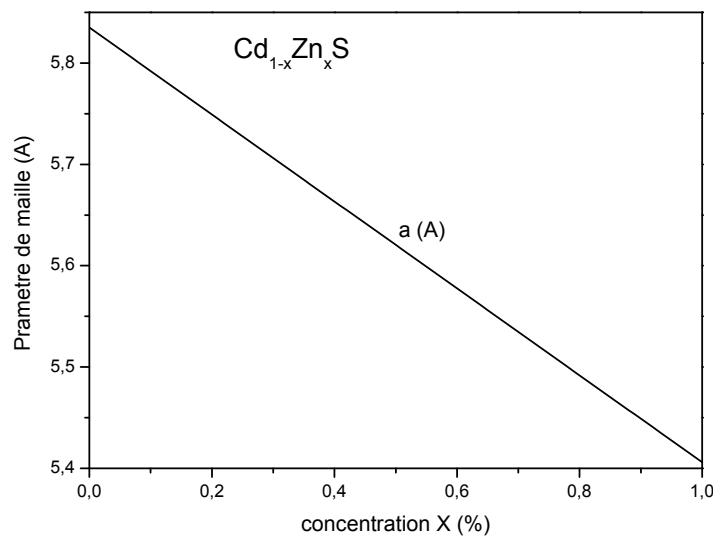


Figure I-6: Variation du paramètre de maille en fonction de la composition de l'alliage CdZnS à 300K.

4.2. Propriétés de l'alliage ternaire CdZnSe

La variation de l'énergie du gap de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xS$ est donnée par [14] :

$$Eg(Cd_{1-x}Zn_xSe) = xEg(ZnSe) + (1 - x)Eg(CdSe) - x(1 - x)b \quad (I.7)$$

$$Eg(Cd_{1-x}Zn_xSe) = 2.721x + 1.658(1 - x) - x(1 - x)0.33 \quad (I.8)$$

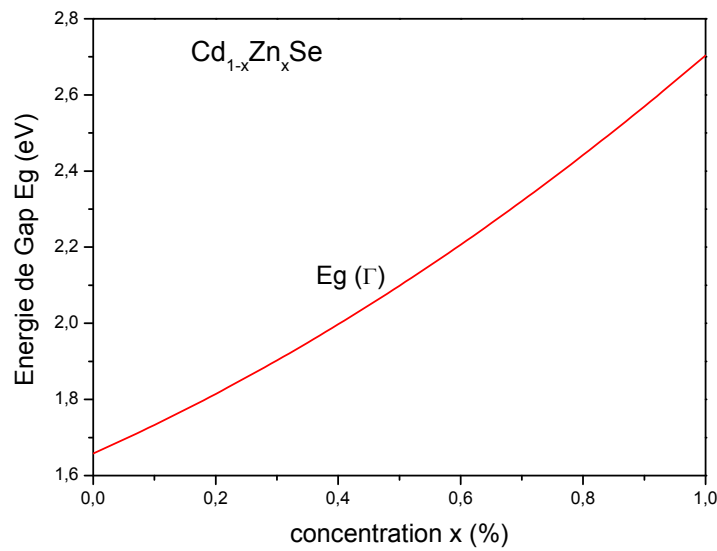


Figure I.7: Variation de l'énergie du gap en fonction de la composition de l'alliage CdZnSe à 300°K.

La variation du paramètre de maille de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xS$ est donnée par :

$$a(CdZnSe) = x.a(ZnSe) + (1 - x).a(CdSe) \quad (I.9)$$

$$a(CdZnSe) = 5.573x + 6.050(1 - x) \quad (I.10)$$

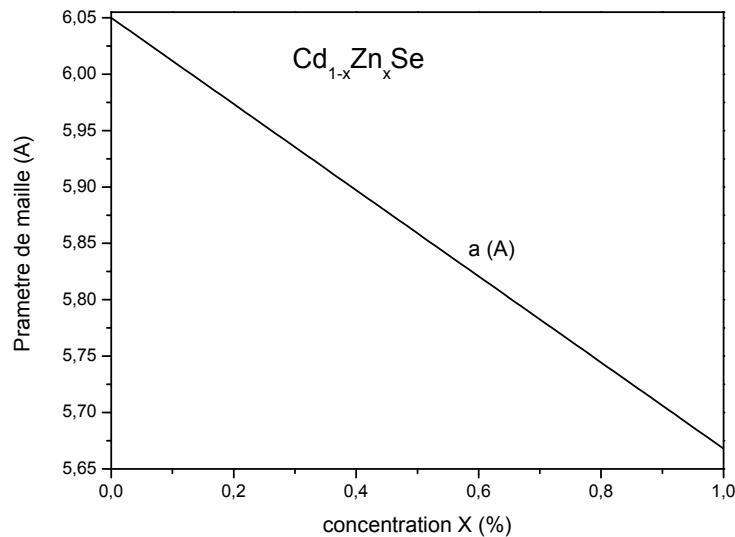


Figure I-8: Variation du paramètre de maille en fonction de la composition de l'alliage CdZnSe à 300°K.

4.3. Propriétés de l'alliage ternaire CdZnTe :

La variation de l'énergie du gap de l'alliage Cd_{1-x}Zn_xTe est donnée par [14] :

$$Eg(Cd_{1-x}Zn_xTe) = xEg(ZnTe) + (1 - x)Eg(CdTe) - x(1 - x)b \quad (I.11)$$

$$Eg(Cd_{1-x}Zn_xTe) = 2.271x + 1.506(1 - x) - x(1 - x)0.32 \quad (I.12)$$

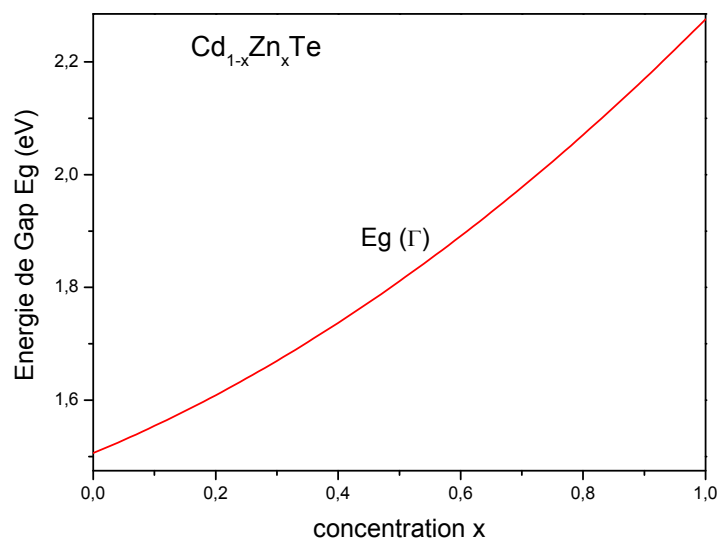


Figure I-9 : Variation de l'énergie du gap en fonction de la composition de l'alliage CdZnTe à 300°K.

La variation du paramètre de maille de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$ est donnée par :

$$a(CdZnTe) = x.a(ZnTe) + (1 - x).a(CdTe) \quad (I.13)$$

$$a(CdZnTe) = 6.4033x + 6.478(1 - x) \quad (I.14)$$

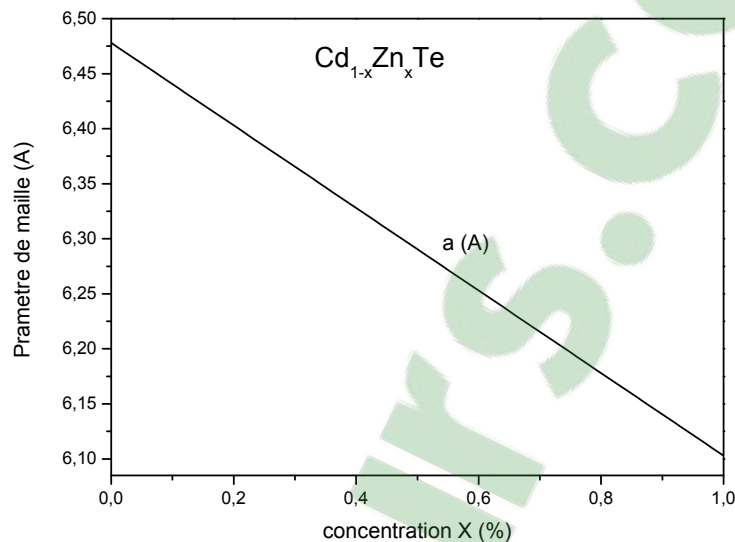


Figure I-9: Variation du paramètre de maille en fonction de la composition de l'alliage CdZnTe à 300°K.

5. Propriétés des hétérostructures à puits quantiques associés :

Après une étude très détaillée sur les hétérostructures II-VI CdS/ $Cd_{1-x}Zn_xTe$, CdSe/ $Cd_{1-x}Zn_xTe$ et CdTe/ $Cd_{1-x}Zn_xTe$ présentée dans la thèse [15], ils ont déduit les résultats suivant que l'hétérostructure CdS/ $Cd_{1-x}Zn_xTe$ est de type II quelque soit la composition x, et elle présente un désaccord de maille supérieure à 5%, l'hétérostructure CdSe/ $Cd_{1-x}Zn_xTe$ est de type II quelque soit la composition x, et elle présente un désaccord de maille entre 0.5% (CdSe/ZnTe) $< \Delta a/a < 7%$ (CdSe/CdTe).

Par contre notre étude va porter sur l'hétérostructure CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe qui est de type I quelque soit la composition x et sous compression avec un désaccord de paramètre de maille de l'ordre de $\frac{\Delta a}{a} \sim 2\%$ pour x(Zn) égale à 0.344.

6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les différentes propriétés physiques des matériaux II-VI à base de Zinc et à base de Cadmium, et ces alliages ternaires. Ces matériaux existent sous deux forme différentes la plus répandue est la structure Würtzite pour ces deux composés (CdSe et CdS) et la phase cubique pour la structure CdTe.

La préparation des couches minces de CdSe et CdS en phase cubique est possible grâce à l'épitaxie par jet moléculaire. Les structures Zinc-blende et Würtzite coexistent, on peut trouver le cristal ZnS et ZnSe dans la structure cubique et dans la structure hexagonale par contre le ZnTe cristallise dans la phase Zinc-blende.

Pour l'étude des hétérostructures nous avons choisie l'hétérostructure CdTe/CdZnTe qui est une hétérostructure de type I et qui présente des effets de polarisation piézoélectrique suivant la direction (111) directement liée à l'absence de centre de symétrie.

7. Référence :

- [1] M. Lomascolo, GH. Li, K. Syassen , R.Cingolani ,I. Suemune , Phys Rev B, Vol 50, p14635, (1994).
- [2] C. G. Van de Walle, "Wide-Band-Gap Semiconductors," North Holland, Amsterdam, (1993).
- [3] P.Baranski, V.Klotchkov, I.Potykeritch, « électronique des semi-conducteurs », Ed. Mir Moscow , (1978).
- [4] Haitao Chen, Yipei Hu, Xianghua Zeng; Green photoluminescence mechanism in ZnS nanostructures, Springer, (2010).
- [5] NESLIHAN ÜZAR; M ÇETIN ARIKAN; Synthesis and investigation of optical properties of ZnS nanostructures; Bull. Mater. Sci., Vol. 34, No. 2, April (2011), pp. 287–292.
- [6] Chung-Liang Cheng, Yang-Fang Chen; Low temperature synthesis of ZnSe nanowires by self-catalyticliquid-solid growth ; Materials Chemistry and Physics 115 (2009) 158–160.
- [7] I. Hernández.Calderón, "Optical properties and electronic structure of wide band gap II-VI semiconductors", in II-VI Semiconductor Materials and their Applications, Taylor and Francis New York, 113 –170 (2002).
- [8] H. Okoyama, Y. Kishita and A. Ishibashi, Phys. Rev. B57, 2257 (1998).
- [9] Rogalski, Antoszewski, and Faraone, Third-generation infrared photodetector arrays, J. Appl. Phys. 105, 091101 (2009).
- [10] F. Tinjoux, Thèse de doctorat, université Joseph Fourier, Grenoble I (2003).

- [11] M.Penna & al, Journal of Electronic Materials, Empirical Pseudopotential and Full-Brillouin-Zone kp Electronic Structure of CdTe, HgTe, and $Hg_{1-x}Cd_xTe$, 10.1007/s11664-009-0798-z, (30 Avril 2009).
- [12] S. Adachi, "Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V, and II-VI Semiconductors", (2009).
- [13] Y. Yao, T. Kuroda, D. N. Dirin, A. A. Irkhina, R. B. Vasiliev, and K. Sakoda, Exciton states of II–VI tetrapod-shaped nanocrystals, Vol. 3, Issue 7, pp. 977-988 (2013).
- [14] I. Hernández-Calderón, "Optical properties and electronic structure of wide band gap II-VI semiconductors", in II-VI Semiconductor Materials and their Applications, Taylor and Francis New York, 113 –170 (2002).
- [15] KHIATI Amar, thèse de magister soutenu en, (2013), Université d’Oran Es-senia.
- [16] Ruda, H.E., Lai, B.: J. Appl. Phys. 68 (1990) 1714.
- [17] Iida, S., Yatabe, T., Kinto, H.: Jpn. J. Appl. Phys. 28 (1989) L535.
- [18] Ruda, H.E.: J. Phys. D 24 (1991) 1158.
- [19] Nishio, M., Nakamura, Y., Ogawa, H.: Jpn. J. Appl. Phys. 22 (1983) 1101.
- [20] Skromme, B.J., Shibli, S.M., de Miguel, J.L., Tamargo, M.C.: J. Appl. Phys. 65 (1989) 3999.
- [21] Ruda, H.E.: J. Appl. Phys. 59 (1986) 3516.

Chapitre 2

Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des matériaux II-VI, CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS.

1. Introduction	19
2. Présentation la méthode de calcul par le code Wien2k à base de la théorie DFT	20
3. Résultats numériques	21
3.1 Propriétés structurale et électronique de composé binaire ZnTe	21
3.2 Propriétés structurale et électronique de composé binaire CdTe	27
3.3 Propriétés structurale et électronique de composé binaire ZnS	33
3.4 Propriétés structurale et électronique de composé ternaire $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ pour différentes compositions en zinc ($x=0.25, 0.5$ et 0.75)	37
a. Variation d'énergie en fonction du volume	37
b. Propriétés électronique (SB, DOS) pour l'alliage $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$	38
3.5 Structure de bande (BC et BV) du $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ par l'approximation GGA	52
3.6 Energie de la bande interdite en fonction de la composition x de Zinc	53
3.7 Paramètre de maille en fonction de la composition x(Zn)	54
3.8 Coefficient c/a en fonction de la composition x(Zn)	55
4. Conclusion	55
5. Références	57

1. Introduction

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des matériaux II-IV à base de cadmium CdTe et de zinc ZnTe, ZnS et leurs alliages ternaires $Cd_{1-x}Zn_xTe$ pour différentes compositions d'alliages ($x=0.25$, $x=0.50$, $x=0.75$) en utilisant le code Wien2k à base de la théorie DFT.

La première étape de calcul consiste à calculer l'énergie en fonction du volume pour déterminer les paramètres d'équilibre correspondant au volume. Cela nous permet de donner la valeur de paramètre de maille $a(\text{Å})$ pour chaque composé binaire CdTe, ZnTe, ZnS et pour l'alliage ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$.

La 2^{ème} étape du travail consiste à calculer la structure de bande (SB) et la densité d'état (DOS) pour chaque composé binaire pour les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt par l'approximation GGA et LDA. Ensuite pour l'alliage ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$. Le code utilisé pour ce calcul est le code Wien2k basé sur la méthode **DFT** qui fonctionne sous système exploitation l'UNIX.

2. Présentation la méthode de calcul par le code Wien2k à base de la théorie DFT :

La procédure de calcul dans ce travail repose sur l'utilisation du code Wien2k, basée sur la théorie de la Fonctionnelle Densité (DFT), cette méthode est capable de décrire avec bonne précision les propriétés à l'état fondamental. Le calcul de la structure électronique a été effectué en utilisant la méthode FP-LAPW (*Full Potential Linearized Augmented Plane Waves*) qui est basée sur ces deux approximations.

La première approximation dit GGA (*Generalized Gradient Approximation*), dans cette approximation l'énergie d'échange-corrélation dépend du gradient de la densité par contre dans la deuxième approximation LDA, la densité électronique varie lentement à l'intérieur du système (*Local Density Approximation*). La première étape de calcul consiste à déterminer la courbe énergie totale en fonction de volume par conséquent le paramètre de maille a . Nous avons pris les valeurs expérimentaux du paramètre de maille données dans les références [1,3,7,9,10] et nous introduisons ces valeurs pour chaque composé binaire ou bien pour chaque composé ternaire dans la configuration StructGen.

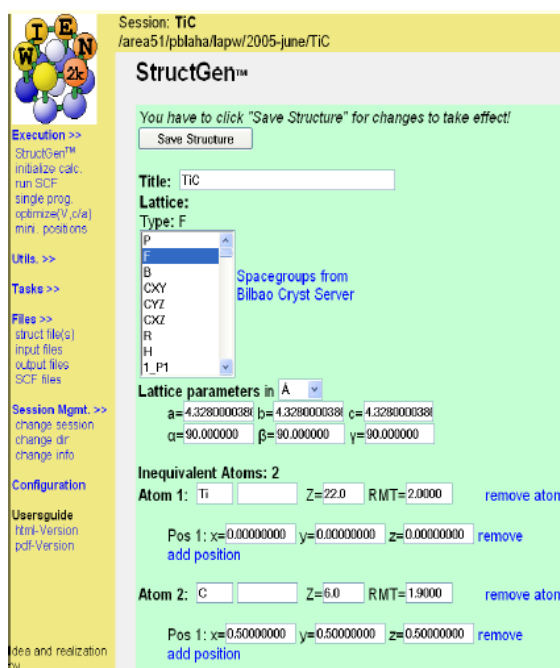


Figure II-1 : Matrice de configuration de la StructGen [11].

Dans cette structure nous introduisons toutes les informations concernant cette structure pour chaque composé binaire et ternaire (la position des atomes, les conditions sur les axes et angles des mailles, le nombre des électrons pour chaque atome élémentaire et le rayon RMT (Rayon Muffin Tin). Ensuite nous initialisons le calcul qui utilise l'équation Murnaghan, donnée par cette relation :

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{B_0 V}{B'_0 (B'_0 - 1)} \right] \times \left[B'_0 \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right]$$

$E(V)$: Représente l'énergie de l'état fondamental en fonction du volume V .

V_0 : Volume de la maille unité à une pression nulle.

B_0 : Le module de compressibilité à l'équilibre.

B'_0 : La dérivée première de module de compressibilité.

Après initialisation nous obtenons une courbe d'optimisation du paramètre de maille et l'énergie totale. Ce qui nous donne les propriétés structurales et électroniques (structure de bande, densité d'état et densité de charge pour avoir les informations sur la polarisation) et pour chaque composé binaire et ternaire pour différentes phases.

3. Résultats numériques :

3.1 Propriétés structurale et électronique du composé binaire ZnTe :

a. Variation d'énergie en fonction du volume :

Nous représentons sur la Figure (II-2) la variation de l'énergie totale en fonction du volume du ZnTe suivant l'équation de Murnaghan pour les deux approximations (LDA et GGA). A partir de cette figure nous remarquons que la phase la plus stable pour le binaire ZnTe c'est la phase Zinc-blende dans l'approximation LDA par contre c'est la phase Würtzite dans l'approximation GGA. Nous concluons que l'approximation LDA donne de bon résultat comparé aux résultats de la recherche bibliographiques [3] qui donne la structure Zinc-blende pour le binaire ZnTe.

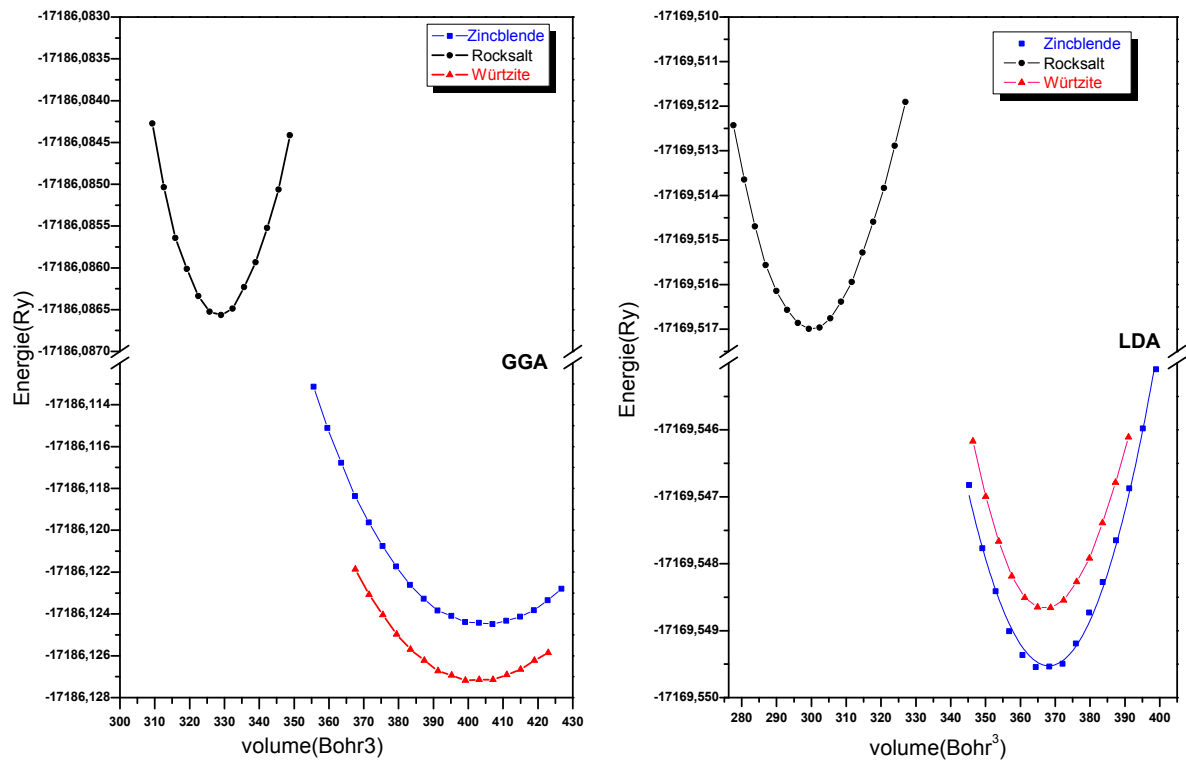


Figure II-2: Variation de l'énergie en fonction du volume du **ZnTe** dans les phases **Zinc-blende**, **Würtzite** et **Rocksalt** calculée par **GGA** et **LDA**.

b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de ZnTe :

Nous représentons sur les trois Figure II-3-a ,II-3-b , II-3-c, la structure de bande et la densité d'état pour le composé binaire ZnTe dans les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt calculée par l'approximation GGA et LDA. Nous remarquons que la structure de bande présente un gap direct qui se situe au point Γ ($\vec{k} = \mathbf{0}$) pour les deux phases Zinc-blende (0.97921eV) et Würtzite (1.02888 eV), pour la phase Rocksalt nous avons trouvé le maximum de bande de valence se situe dans le point **L** et le minimum de la bande de conduction se situe dans le point **X**, l'énergie de bande interdit est de l'ordre de (-1.79711 eV).

Pour la densité d'états pour le binaire ZnTe dans l'approximation GGA et LDA dans les trois phases, nous remarquons que la contribution des atomes du Zinc et du Tellure sont très proches dans la bande de conduction dans l'approximation GGA. Par contre dans l'approximation LDA pour les deux phases Zinc-blende et Würtzite pour la bande de valence, nous remarquons que la contribution des atomes de Te est plus importante par

rapport à la contribution du Zinc cela est du à l'atome du Te qui est plus lourd que l'atome du Zinc.

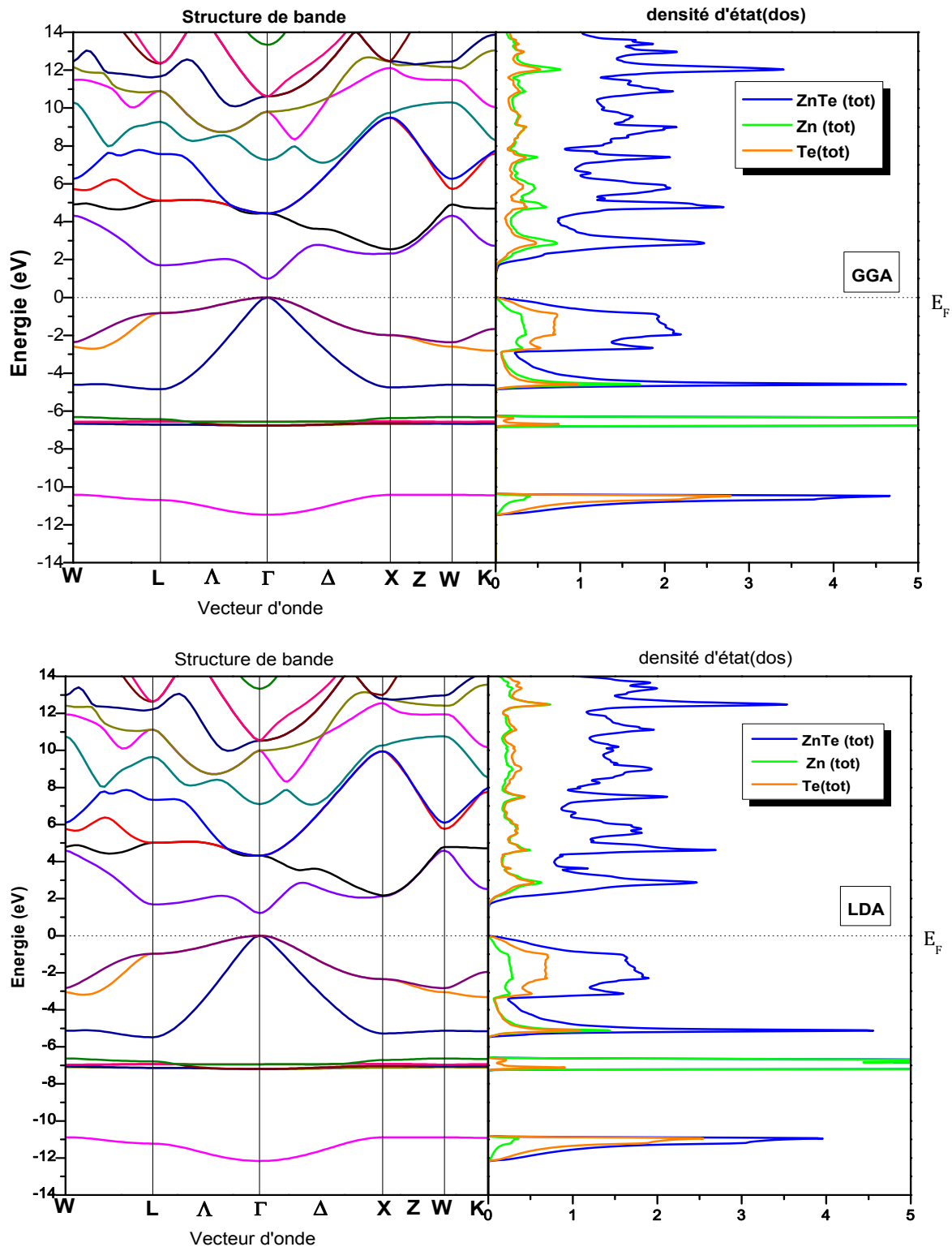


Figure II-3 -a: Structure de bande et densité d'état de **ZnTe** dans la phase **Zinc-blende** calculées par **GGA** et **LDA**.

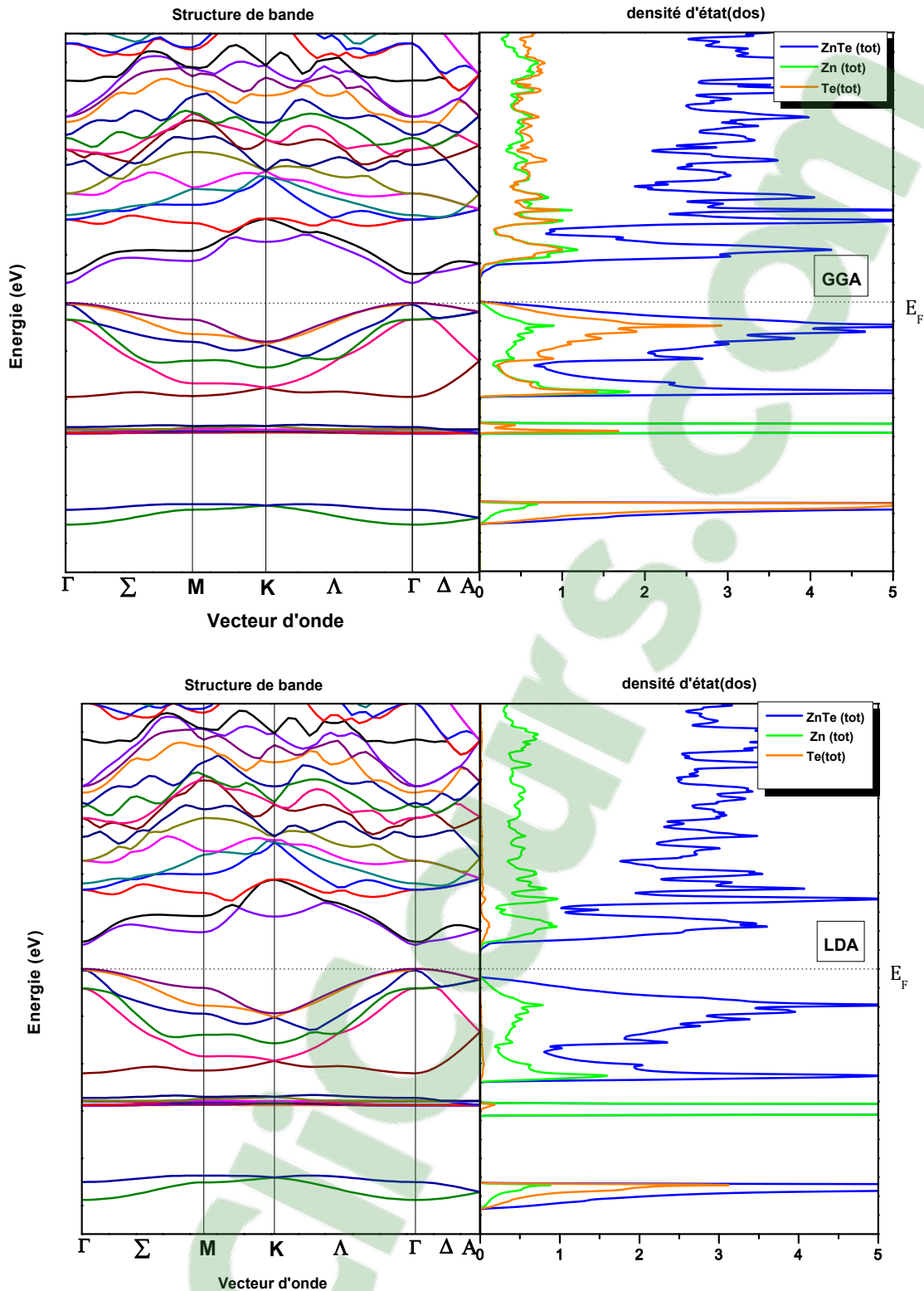


Figure II-3-b: Structure de bande et densité d'état de **ZnTe** dans la phase **Würtzite** calculées par **GGA** et **LDA**.

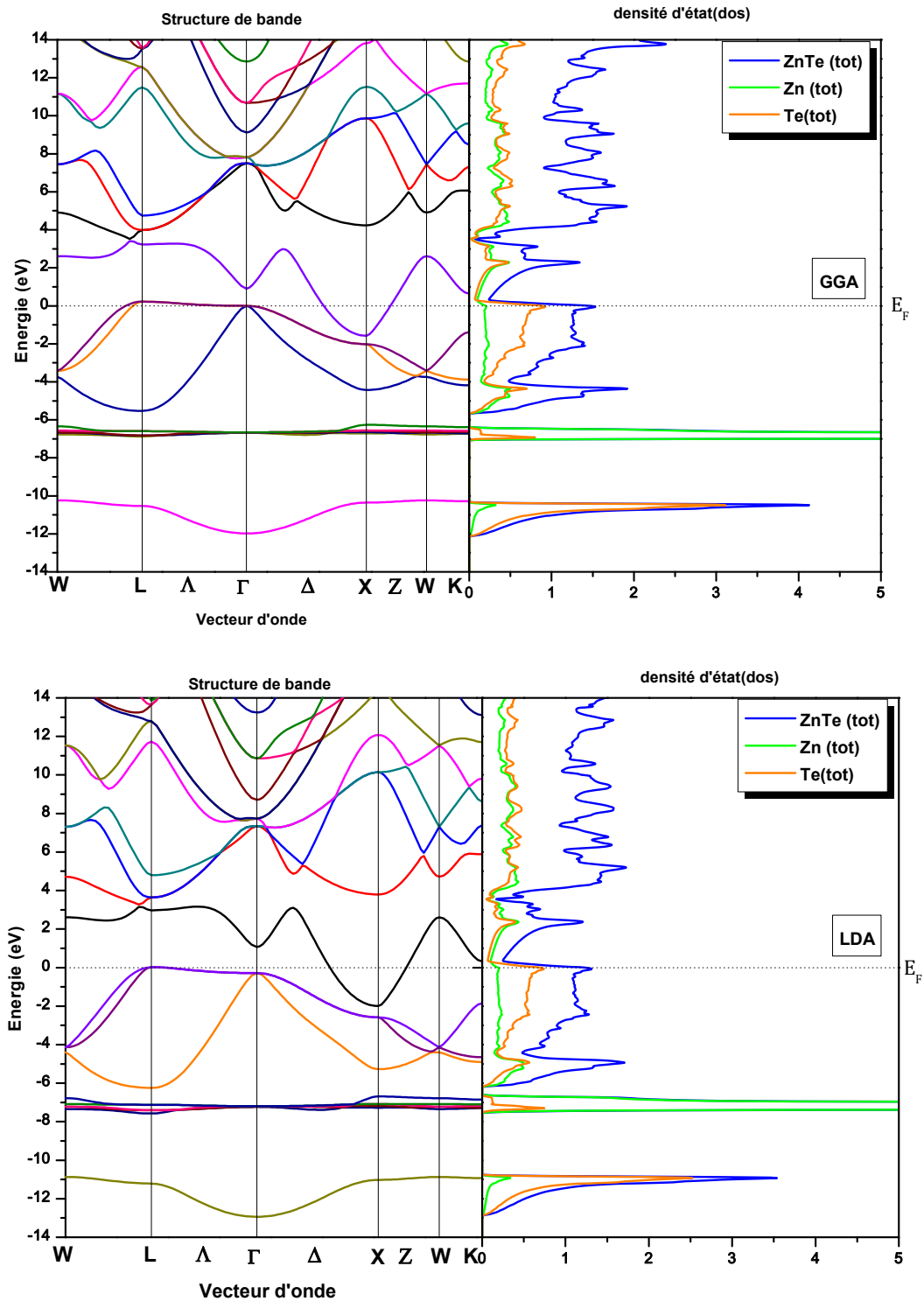


Figure II-3-c: Structure de bande et densité d'état de **ZnTe** dans la phase **Rocksalt** calculées Par **GGA** et **LDA**.

Dans le tableau suivant nous avons reporté nos calculs obtenus par les deux approximations LDA et GGA et d'autres calculs expérimentaux et théoriques pour les trois phases. Ensuite nous avons calculé l'erreur en pourcentage pour les propriétés structurales et électroniques.

Tableau II-1 : Différents paramètres du **ZnTe** dans les trois phases.

paramètre	phase	Nos valeurs		Valeurs théorique		Valeur expérimental	comment	
		GGA	LDA	GGA	LDA		GGA	LDA
a(Å)	WZ	4,37837 c/a=1.5725	4,24996 c/a=1.54655	-	4.234 ^[3] c/a=1.648 ^[3]	4.27 ^[1] c/a=2.299 ^[2]	2.5379% Theo : - Exp : 29.2740%	0.4693% Theo : 0.3769% Exp : 32.7294%
		u=0.375	u=0.375	-	u=0.373 ^[3]		0.5361%	0.5361%
		ZB	6,21370	6,01440	-		6.002 ^[3]	6.089 ^[1]
	rock	5,79502	5,62134	-	-	5.749 ^[2]	0.800%	2.220%
V ₀ (Å ³)	WZ	59,67780	54,40511	-	-	52.96 ^[2]	12.684%	2.728%
	ZB	59,97878	54,38939	-	-	58.39 ^[2]	2.7209%	6.851%
	rock	48,65243	44,41455	-	-	47.51 ^[2]	2.404%	6.5153%
B'	WZ	4,37	5,32	-	-	4.5 ^[2]	2.888%	18.222%
	ZB	3,89	4,7121	-	-	4.7 ^[2]	17.234%	0.257%
	Rock	4,46	4,79	-	-	5.4 ^[2]	17.104%	11.296%
E _{tot} (Ry)	WZ	34372,2536	34339,0973	-	-	-	-	-
	ZB	17186,12456	34339,0973	-	-	-	-	-
	Rock	17186,086615	17169,5163	-	-	-	-	-
E _{fer} (Ry)	WZ	0,23083	0,28506	-	-	-	-	-
	ZB	0,23152	0,28278	-	-	-	-	-
	Rock	0,34284	0,40645	-	-	-	-	-
E _{gap}	WZ	1.02888	1.26630	-	1.32 ^[3]	-	-	Theo : 4.0681%
	ZB	0.97921	1.21232	-	1.30 ^[3]	2.35 ^[3]	Theo : - Exp : 58.3315%	Theo : 6.7446% Exp : 48.4119%
	Rock	1.79711	2.01101	-	-	-	-	-

[1] O. Zakharov, A. Rubio, X.Blase, M. L .Cohen, et S. G. Louie, Phys. Rev. B, Vol 50,N°15,(1994).

[2] R. Franco, P. Mori-Sanchez, J.M. Recio, Theoretical compressibilities of high-pressure ZnTe polymorphs, Physical Review B 68 (2003) 195208.

[3] Ji-Hui Yang, Shiyu Chen, Wan-Jian Yin, and X. G. Gong, Electronic structure and phase stability of MgTe, ZnTe, CdTe, and their alloys in the B3, B4, and B8 structures, PHYSICAL REVIEW B 79, 245202_(2009).



Nous remarquons d'après ce tableau II-1 que l'erreur obtenue sur le rapport c/a en le comparant aux résultats expérimentaux est différente, elle est surestimée d'une valeur égale à 29% dans l'approximation GGA et 32% dans l'approximation LDA. Par contre pour le paramètre de maille pour les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt dans les deux approximations GGA et LDA, nous obtenons de bon résultat comparé aux résultats expérimentaux avec une erreur inférieure ou égale 2.5%.

3.2 Propriétés structurale et électronique du composé binaire CdTe :

a. Variation d'énergie en fonction du volume :

Pour la composé binaire de Cadmium de Tellurure nous avons calculé la variation de l'énergie totale en fonction du volume dans les trois phases (Zinc-blende, Würtzite, Rocksalt) chaque phase est calculé dans les deux approximations (GGA-LDA).

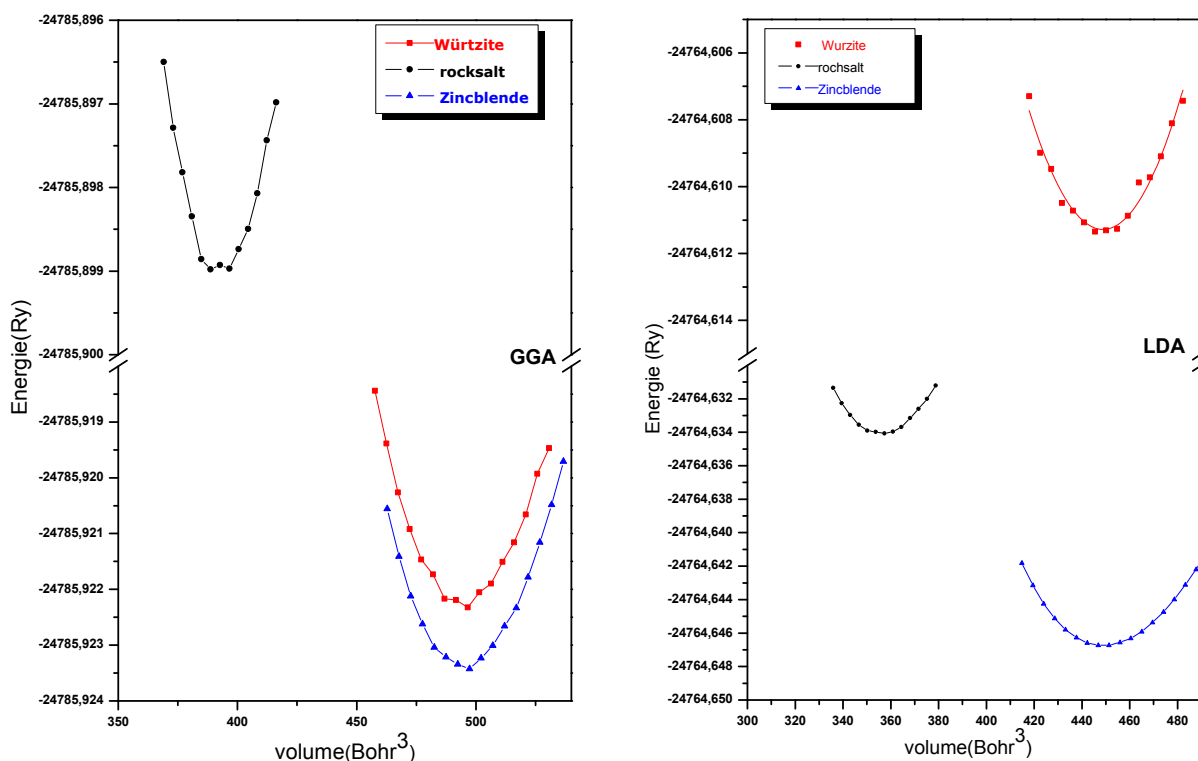


Figure II-4 : Variation de l'énergie en fonction du volume du CdTe dans les phases Zinc-blende, würtzite et Rocksalt calculée par la GGA et LDA.

Sur cette figure (II-4), nous constatons que le binaire CdTe cristallise dans la phase Zinc-blende qui est la phase la plus stable et cela est confirmé dans les deux approximations.

b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de CdTe :

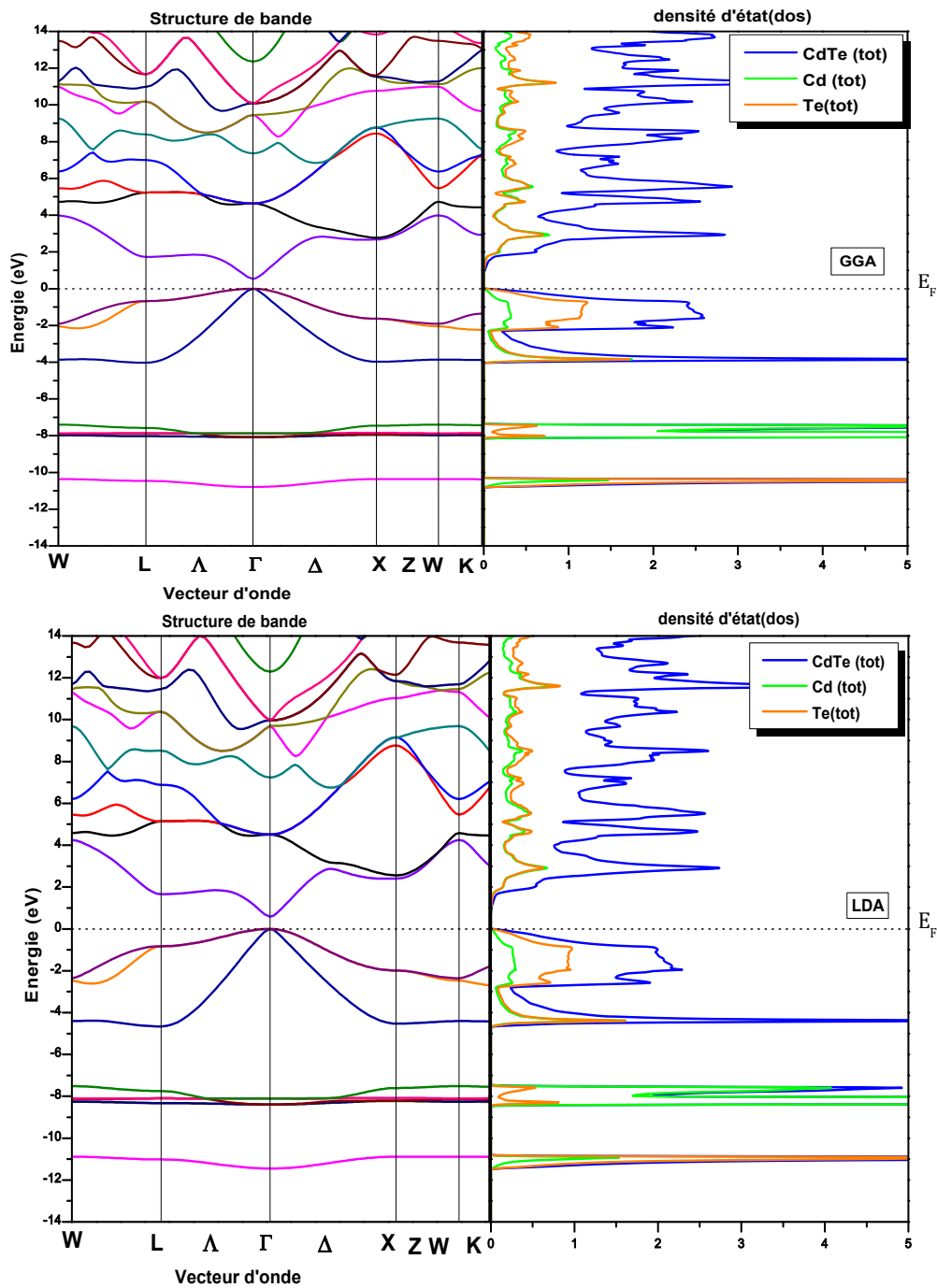


Figure II-5-a : Structure de bande et densité d'état de CdTe dans la phase Zinc-blende calculée par GGA et LDA.

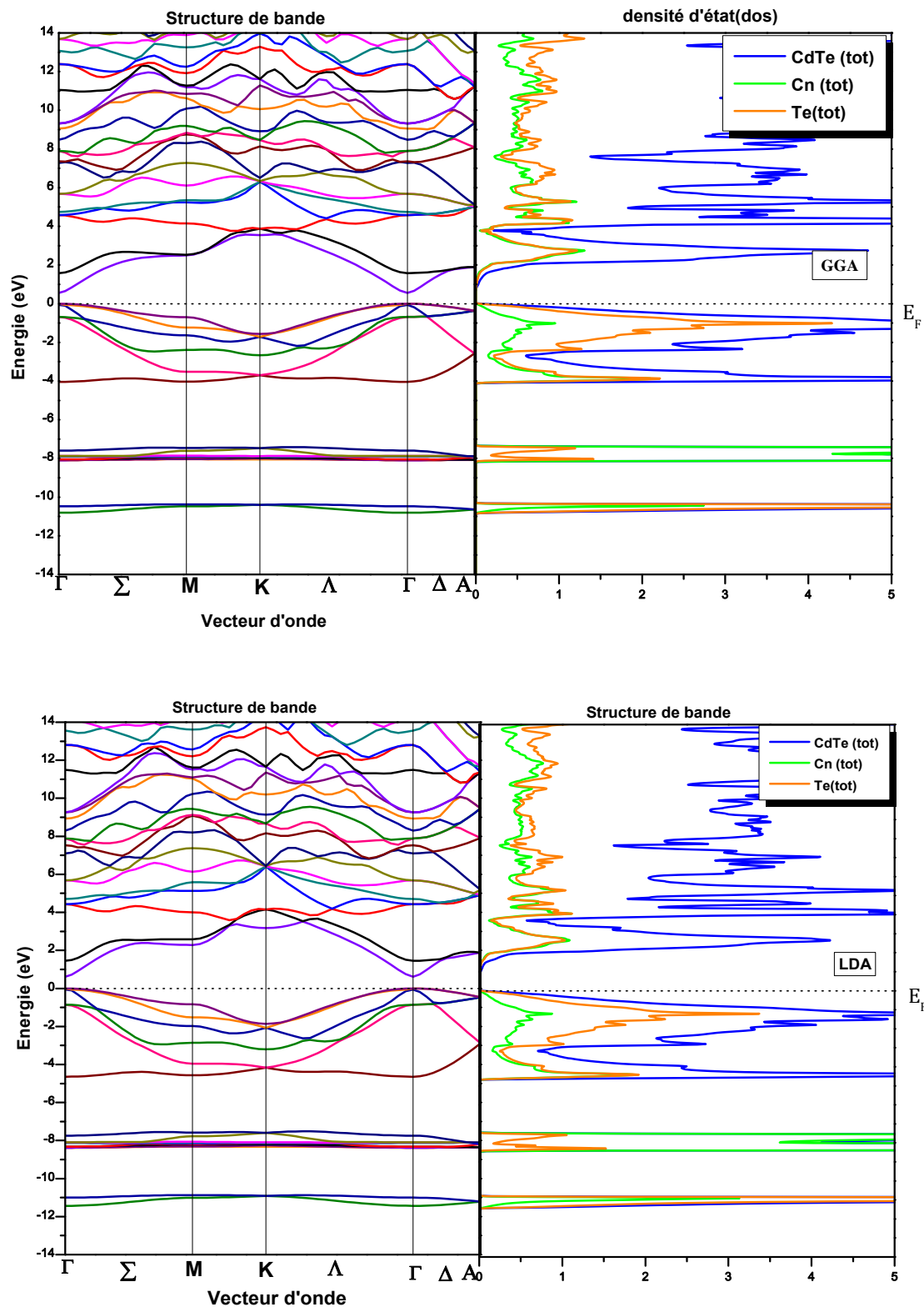


Figure II-5-b: Structure de bande et densité d'état de CdTe dans la phase Würtzite calculées par GGA et LDA.

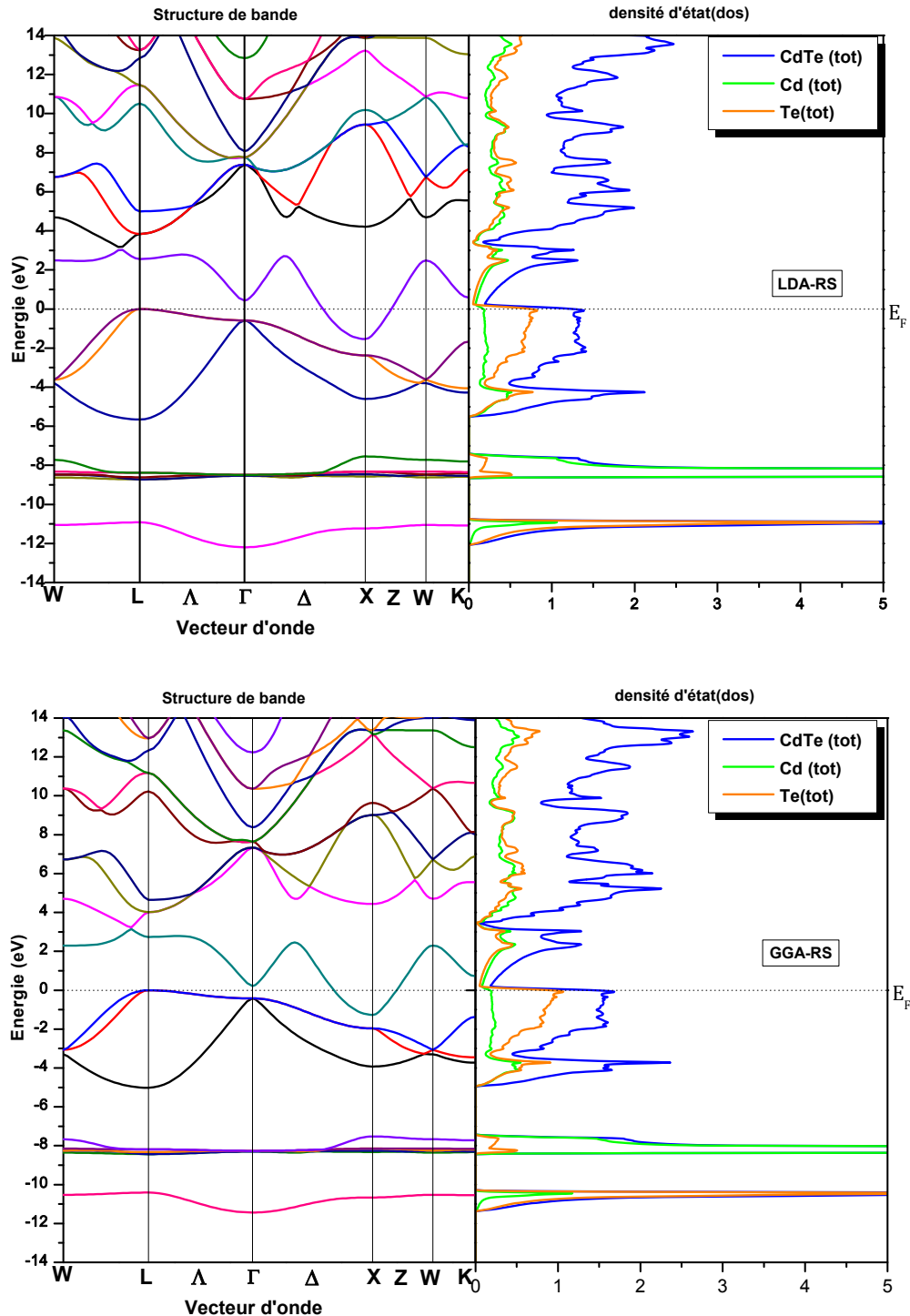


Figure II-5-c: Structure de bande et densité d'état de CdTe dans la phase Rocksalt calculées par GGA et LDA.

Sur les trois figures II-5 (a, b et c) nous présentons la structure de bande et la densité d'état pour les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt dans les deux approximations GGA et LDA.

Nous déduisons à partir de ces figures, que le composé binaire CdTe présente un gap direct qui se situe au point Γ ($\vec{k} = \mathbf{0}$) pour les deux phases Zinc-blende et Würtzite. L'énergie de la bande interdite pour la structure Zinc-blende est de l'ordre de (GGA :0.53054eV, LDA :0.58244eV) et pour la structure Würtzite est de l'ordre de (GGA :0.55867eV, LDA :0.61881eV), pour la phase Rocksalt nous avons trouvé que l'énergie de la bande interdite est négative de l'ordre de (GGA :-1.27007eV, LDA :-1.27819eV).

Pour la densité d'états pour le binaire CdTe dans l'approximation GGA et LDA dans les trois phases, nous remarquons que la contribution des atomes du Cadmium et du Tellure sont très proches dans la bande de conduction dans l'approximation GGA. Par contre dans l'approximation LDA pour les deux phases Zinc-blende et Würtzite pour la bande de valence, nous remarquons que la contribution des atomes de Te est plus importante par rapport à la contribution du Cadmium.

Tableau II-2: Différents paramètres du CdTe dans les trois phases

paramètre	phase	Nos valeurs		Valeurs théorique		Valeur expérimental	comment	
		GGA	LDA	GGA	LDA		GGA	LDA
a(Å)	WZ	3.85382	4,54890	-	4.536 ^[3]	4,57 ^[1]	Exp :2,5529%	Exp :0,4617% Theo :0,4873%
		c/a=1.63955	c/a=1,6322	-	c/a=1,642 ^[3]	-	-	Theo : 0.005%
		u=0.375	u=0.375	-	u=0.374 ^[3]	U=0.375 ^[1]	-	Theo :0.0026 %
	ZB	6.64119	6.42117	6.631 ^[5]	6.421 ^[5]	6,089 ^[1]	Exp :9.0686 % Theo :3.4292%	Exp :5.4552 % Theo :0.0026 %
rock	6.15165	5.95219	6.11 ^[6]	5.94 ^[6]	-	Theo :0.6816 %	Theo :0.2052%	
V ₀	WZ	548.4045	506.5690	-	-	-	-	-
	ZB	275.3090	254.3273	-	-	-	-	-
	rock	226.9274	208.8582	-	-	-	-	-
B'	WZ	4,87		-	-	-	-	-
	ZB	4.1350	4.09	-	-	6.4 ^[3]	Exp :35.3906%	Exp :36.0937%
	Rock	4.91	5.12	-	-	-	-	-
E _{tot} (Ry)	WZ	49571.8468	49529.2935	-	-	-	-	-
	ZB	24785.92228	24764.647229	-	-	-	-	-
	Rock	24785.91631	24764.63407	-	-	-	-	-
E _{fer} (Ry)	WZ	0.15836	0.21217	-	-	-	-	-
	ZB	0.15760	0.21674	-	-	-	-	-
	Rock	0.27576	0.34579	-	-	-	-	-
E _g (eV)	WZ	0.55867	0.61881	-	0.67 ^[3]	-	-	Theo :7.6409 %
	ZB	0.53054	0.58244	-	0.63 ^[3]	1.48 ^[4]	Exp : 64.1527%	Exp :60.6459 % Theo :7.5493%
	Rock	1.27007	1.27819	-	-	-	-	-

[1] O. Zakharov, A. Rubio, X.Blase, M. L .Cohen, et S. G. Louie, Phys. Rev. B, Vol 50,N°15,(1994).

[3] Ji-Hui Yang, Shiyou Chen, Wan-Jian Yin, and X. G. Gong, Electronic structure and phase stability of MgTe, ZnTe, CdTe, and their alloys in the B3, B4, and B8 structures, PHYSICAL REVIEW B 79, 245202_(2009).

[4]: O. M. Madelung, Semiconductors: Data Handbook, 3rd ed. Springer, Berlin, (2004).

[5]: Ouendadji, S., Ghemid, S., Meradji, H., Hassan, F.E.H.: Comput. Mater. Sci. 50 (2011) 460.

[6]: Zerroug, S., Sahraoui, F.A., Bouarissa, N.: Eur. Phys. J. B 57 (2007) 9.

Nous remarquons d'après ce tableau que l'erreur obtenue dans l'approximation LDA sur le paramètre de maille est faible comparé aux résultats expérimentaux elle est de l'ordre de 0.46%. Donc nous concluons que l'approximation LDA donne de bon résultat comparé à l'approximation GGA.

3. 3 Propriétés structurale et électronique du composé binaire ZnS :

a. Variation d'énergie en fonction du volume :

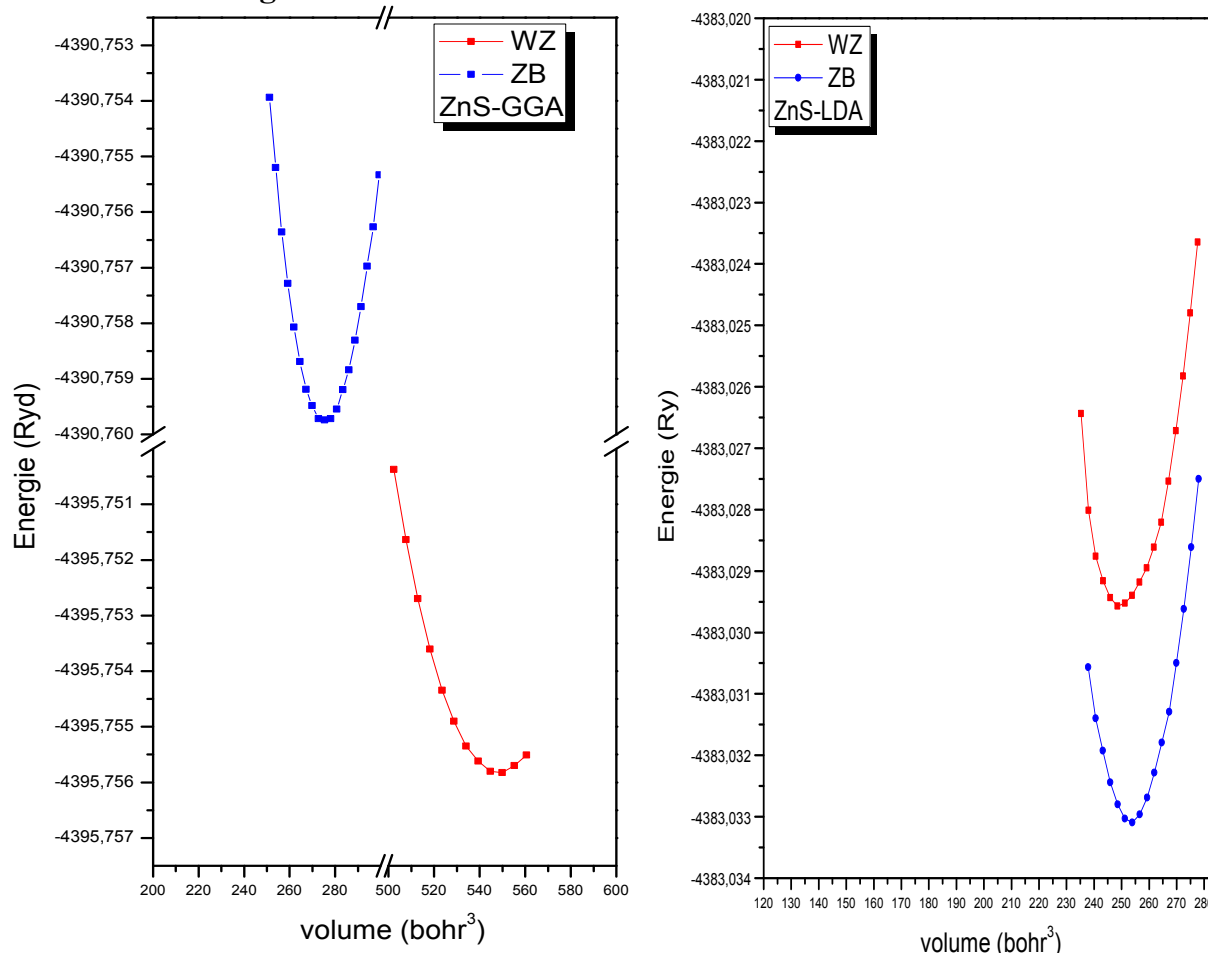


Figure II-6 : Variation de l'énergie en fonction du volume de **ZnS** dans les phases **Zinc-blende** et **Würtzite** calculée par l'approximation **GGA** et **LDA**.

Sur cette figure (II-6) nous présentons la variation d'énergie totale en fonction du volume par l'approximation LDA pour les deux phases Würtzite et Zinc-blende. Nous remarquons que le binaire ZnS cristallise au même temps soit dans la phase Zinc-blende ou bien dans la phase Würtzite.

b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de ZnS :

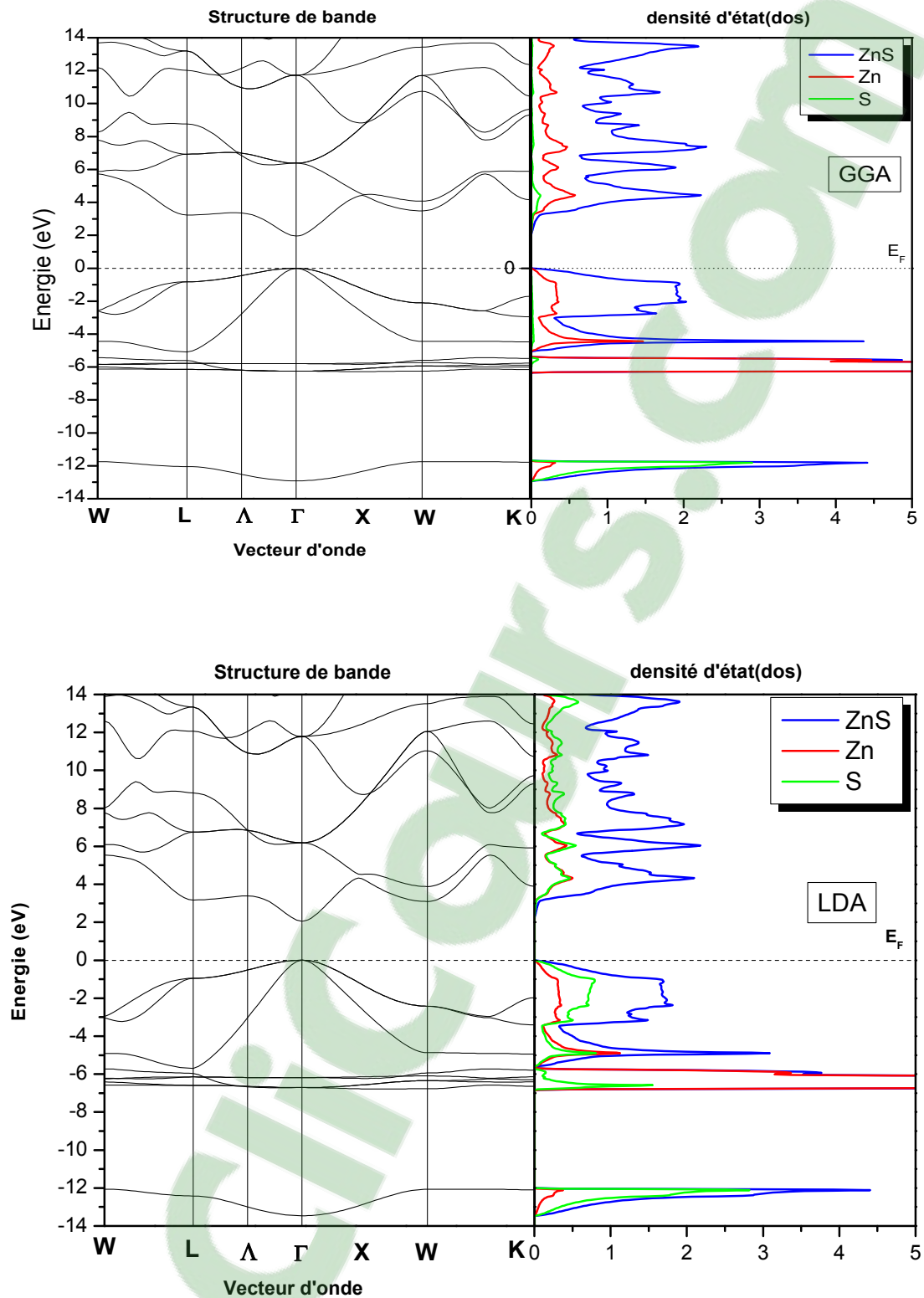


Figure II-7-a : Structure de bande et densité d'état de **ZnS** dans la phase **Zinc-blende** calculées par **GGA** et **LDA**.

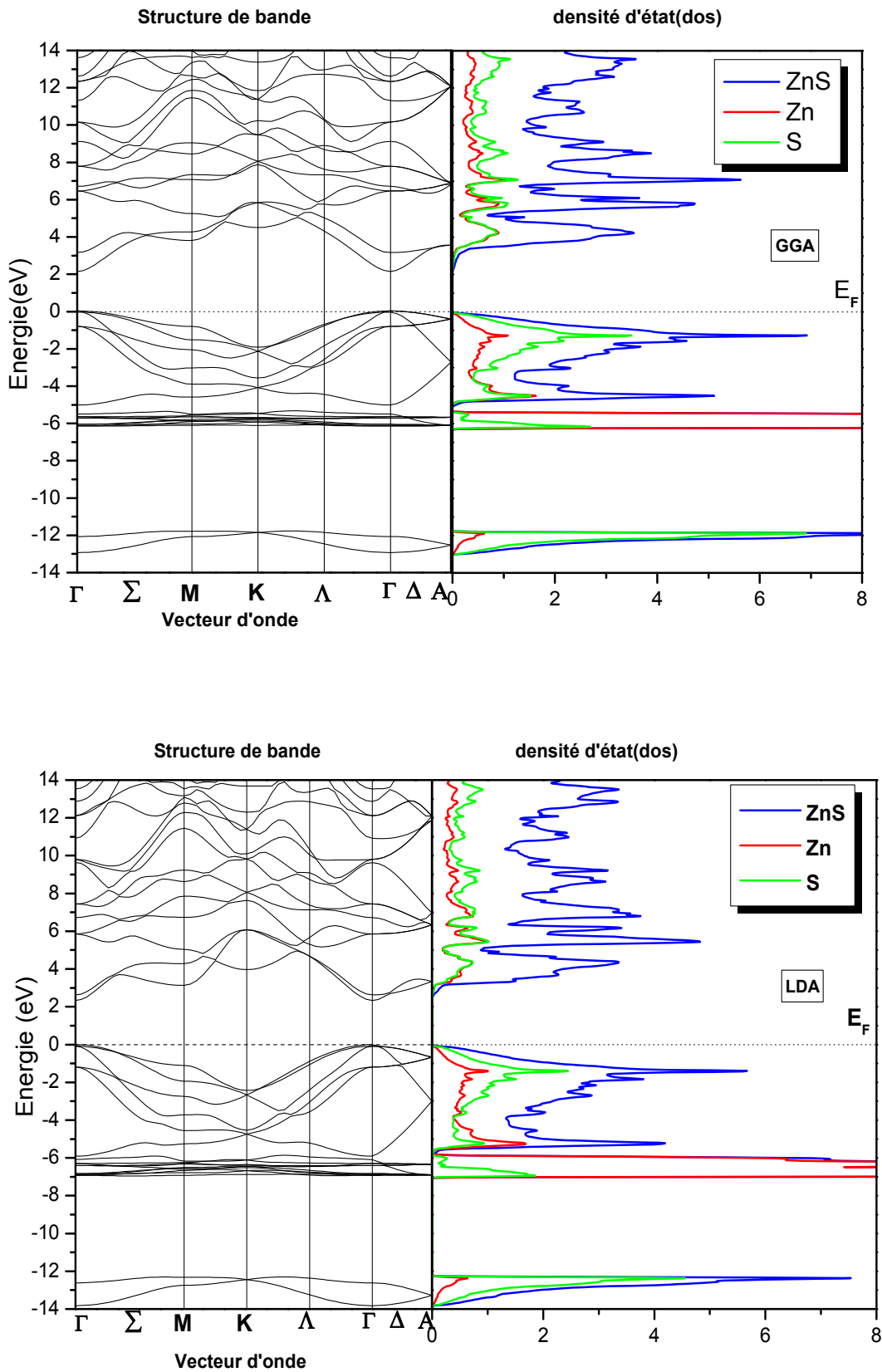


Figure II-7-b : Structure de bande et densité d'état de **ZnS** dans la phase **Würtzite** calculée par **GGA** et **LDA**.

Tableau II-3 : les différents paramètres du **ZnS** dans les trois phases

paramètre	phase	Nos valeurs		Valeurs théorique		Valeur expérimental	comment	
		GGA	LDA	GGA	LDA		GGA	LDA
a(Å)	WZ	3.442502 c/a=1,490 u=0.375	3.3481 c/a=1,6322 u=0.375	-	-	3.814 ^[1] c/a=1,7113 ^[1] U=0.375 ^[1]	Exp :9.7403 % 12.9316%	Exp : 12.2155% 4.6222%
	ZB	5.4646	5.3221	-	-	5.409 ^[9]	Exp : 1.0279%	Exp : 1.6065%
	rock	5.4886	4.9839	-	-	-	-	-
V ₀	WZ	548.4045	506.5690	-	-	-	-	-
	ZB	275.3090	254.3273	-	-	-	-	-
	rock	226.9274	208.8582	-	-	-	-	-
B'	WZ	3.82	4.6557	-	-	-	-	-
	ZB	3.7341	4.9201	-	4.20 ^[7]	4.00 ^[7]	Exp :6.647%	Exp :6.6475 % Theo :17.1452%
	Rock	3.6482	4.3455	-	-	-	-	-
E _{tot} (Ry)	WZ	-8781.511636	-8766.059112	-	-	-	-	-
	ZB	-4390.759760	-4383.033088	-	-	-	-	-
	Rock	-4390.711273	-4390.711273	-	-	-	-	-
E _{fer} (Ry)	WZ	0.21761	0.31834	-	-	-	-	-
	ZB	0.22205	0.27005	-	-	-	-	-
	Rock	0.34000	0.40384	-	-	-	-	-
E _g (eV)	WZ	0.55867	0.61881	-	-	-	-	-
	ZB	1.95166	2.05643	-	2.37 ^[1]	3.765 ^[10]	Exp :48.1630%	Exp : 45.3803% Theo :13.2308 %
	Rock	-	-	-	-	-	-	-

[1] O. Zakharov, A. Rubio, X.Blase, M. L .Cohen, et S. G. Louie, Phys. Rev. B, Vol 50,N°15,(1994).

[7] S. Ves, U. Schwarz, N.E. Christensen, K. Syassen, M. Cardona, Phys. Rev. B 42 (1990) 9113.

[9] P.Baranski, V.Klotchkov, I.Potykeritch, « électronique des semi-conducteurs », Ed. Mir Moscow (1978).

[10] Haitao Chen, Yipei Hu, Xianghua Zeng; Green photoluminescence mechanism in ZnS nanostructures, Springer, (2010).

Le tableau II-3 présente les différents paramètres structuraux pour les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt par les deux approximations GGA et LDA.

D'après ces résultats l'approximation GGA sous estime les valeurs de paramètre de maille et la valeur du module de compressibilité, par contre l'approximation LDA elle surestime la valeur de l'énergie de la bande interdite.

3.4 Propriétés structurale de composé ternaire Cd_{1-x}Zn_xTe pour différentes compositions en Zinc (x=0.25, 0.50 et, 0.75) :

Pour x =0.25

a. Variation d'énergie en fonction du volume :

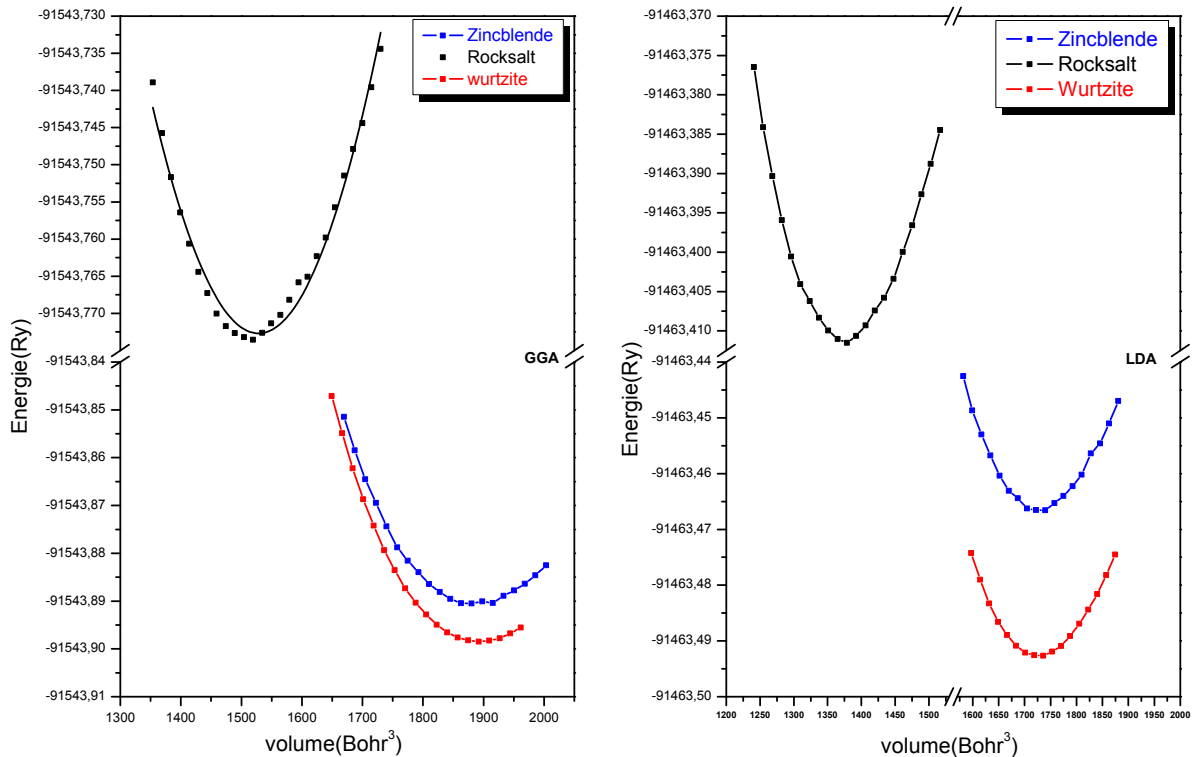


Figure II-8 : Variation d'énergie en fonction de volume de l'alliage Cd_{0.75}Zn_{0.25}Te dans les **Zinc-blende**, **Würtzite** et **Rocksalt** calculées par **GGA** et **LDA**.

Nous remarquons à partir de cette figure II-8 que pour cette composition d'alliage x=0.25 la phase Würtzite est la phase la plus stable pour les deux approximations.

b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de $\text{Cd}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{Te}$:

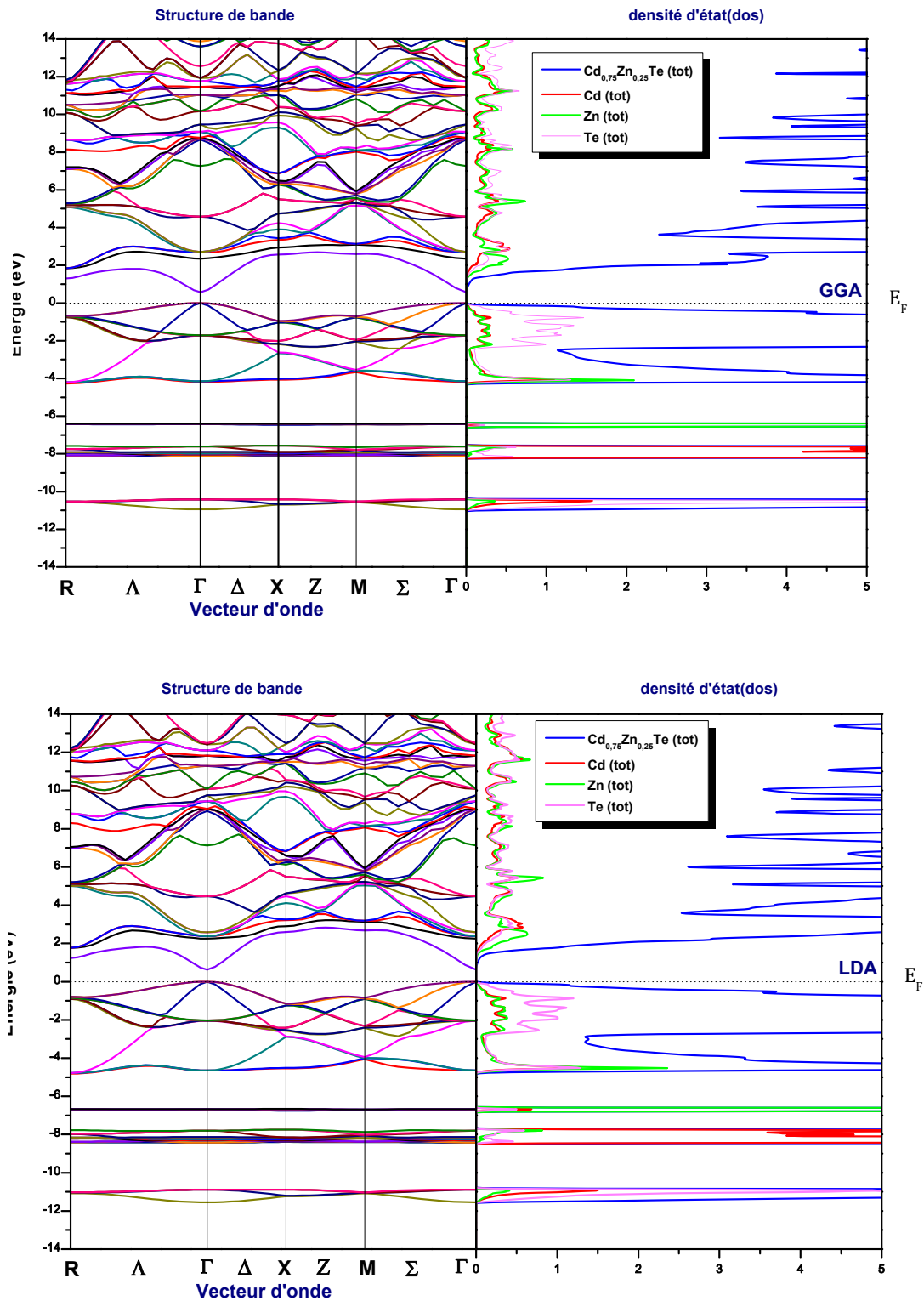


Figure II-9-a : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{Te}$ dans la phase Zinc-blende calculées par GGA et LDA.

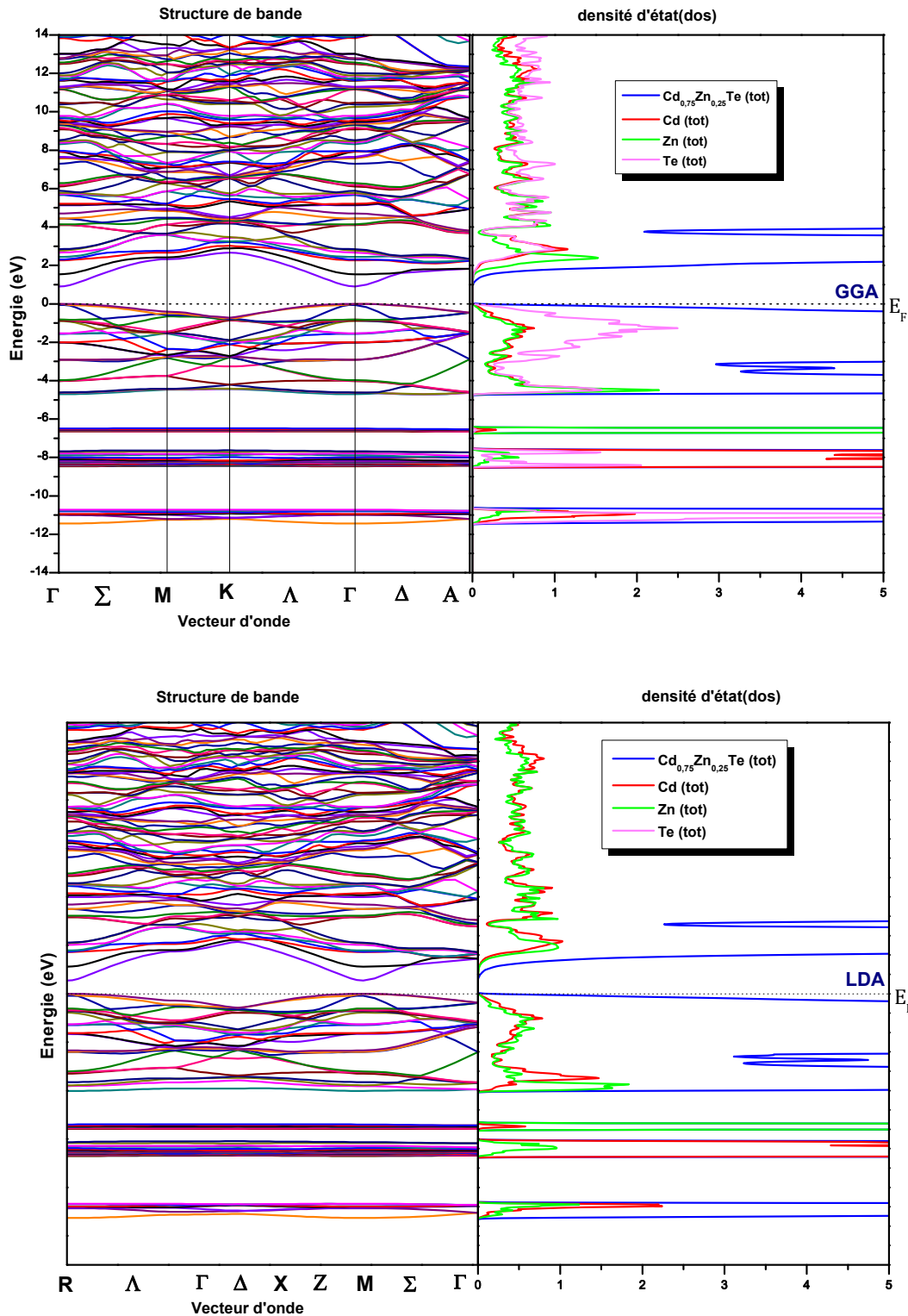


Figure II-9-b : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{Te}$ dans la phase Würtzite calculées par GGA et LDA.

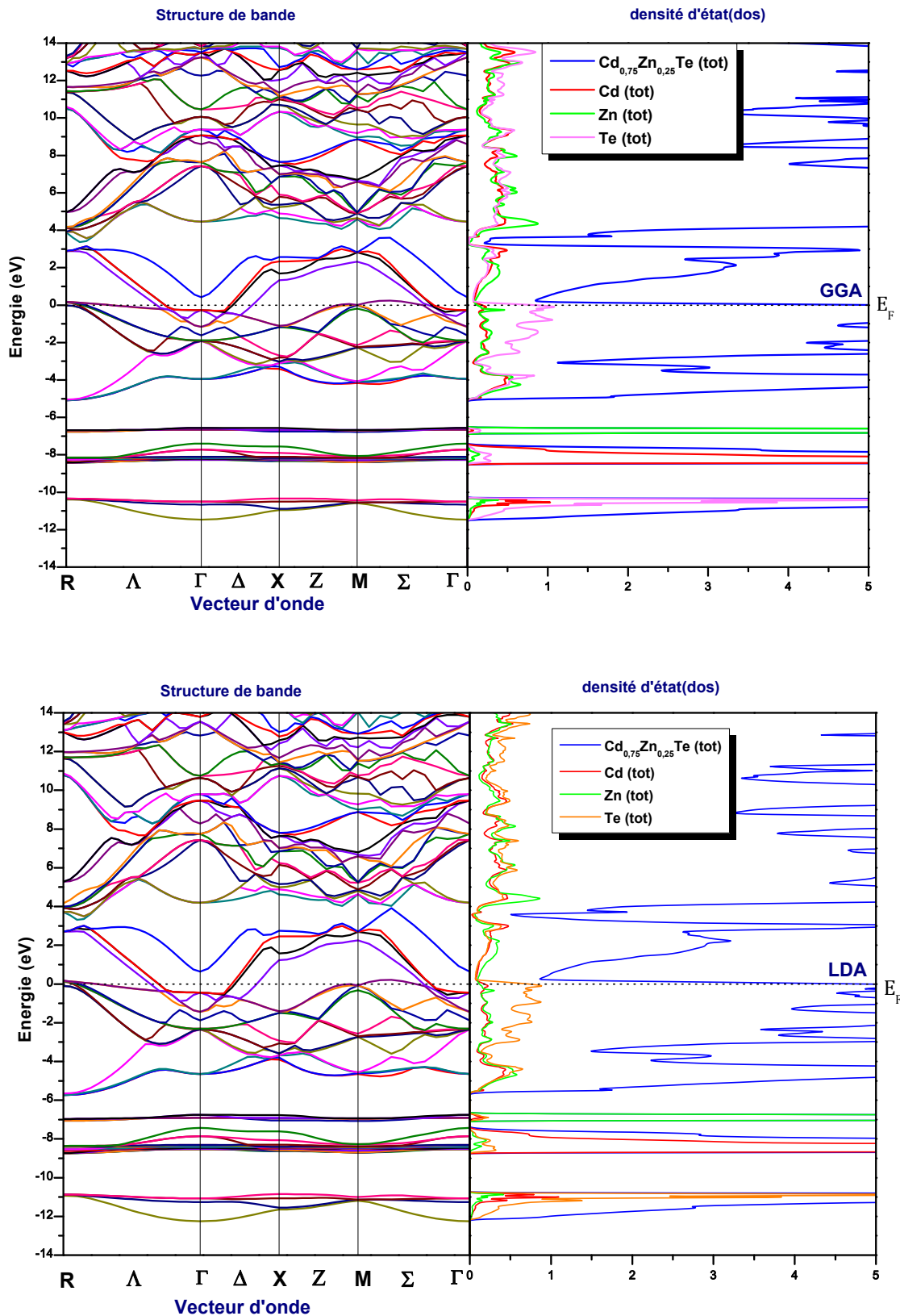


Figure II-9-c : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{Te}$ dans la phase **Rocksalt** calculés par **GGA** et **LDA**.

A partir de ces figures Figure II-9- a, b et c nous remarquons que l'alliage $\text{Cd}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{Te}$ dans les phases Zinc-blende et würtzite présente un gap direct 0.57089 eV et 0.57089eV respectivement par l'approximation GGA, ou le minimum de la bande de conduction et maximum de la bande de valence est située dans le point Γ .

Tableau II-4: Différents paramètres du $\text{Cd}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{Te}$ dans les trois phases.

paramètre	phase	Nos valeurs	
		GGA	LDA
a(Å)	Wz	4.62539 c/a=1.58907	4.48602 c/a=1.63508
	Zb	6.53685	6.3480
	Rock	6.07646	5.88231
V_0	Wz	70.11273	63.91661
	Zb	69.83053	63.95199
	Rock	56.09091	50.88450
B'	Wz	4.6592	4.96
	Zb	5.22	4.7231
	Rock	4.96	4.9325
$E_{\text{tot}}(\text{Ry})$	Wz	91543,8929	91463,5072
	Zb	91543.9458	91463.4670
	Rock	91543.7744	91463.4109
$E_{\text{fer}}(\text{Ry})$	Wz	0.18682	0.22990
	Zb	0.19727	0.22245
	Rock	0.29249	0.36280
E_{gap}	Wz	0.60967	0.67587
	Zb	0.57089	0.62272
	Rock	0.87488	1.01889

Pour $x=0.50$

a. Variation d'énergie en fonction du volume :

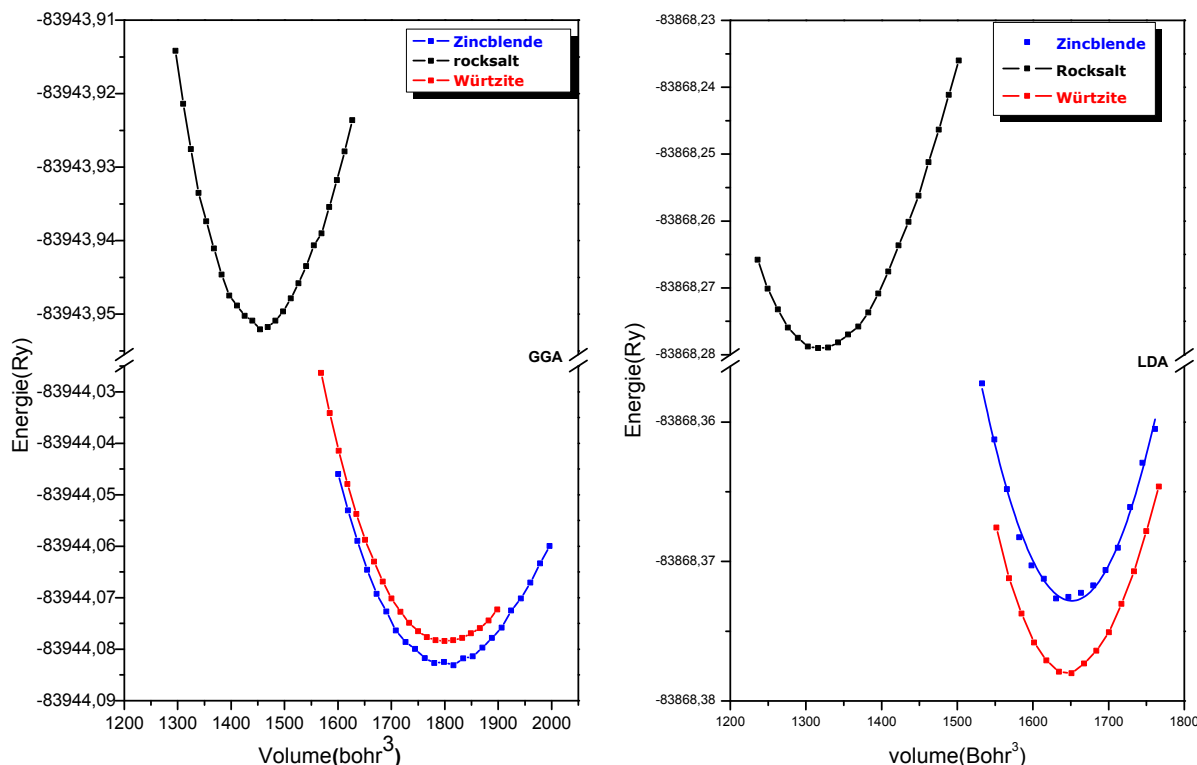


Figure II-10 : Variation de l'énergie en fonction du volume du $Cd_{0,50}Zn_{0,50}Te$ dans les phases **Zincblende**, **Würtzite** et **Rocksalt** calculée par **GGA** et **LDA**.

Sur la figure II-10 nous représentons la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour l'alliage ternaire $Cd_{0,50}Zn_{0,50}Te$ pour les deux approximations GGA et LDA. Nous remarquons que la phase la plus stable est la phase Zinc-blende pour l'alliage ternaire $Cd_{0,50}Zn_{0,50}Te$ dans l'approximation GGA.

b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de $\text{Cd}_{0.50}\text{Zn}_{0.50}\text{Te}$:

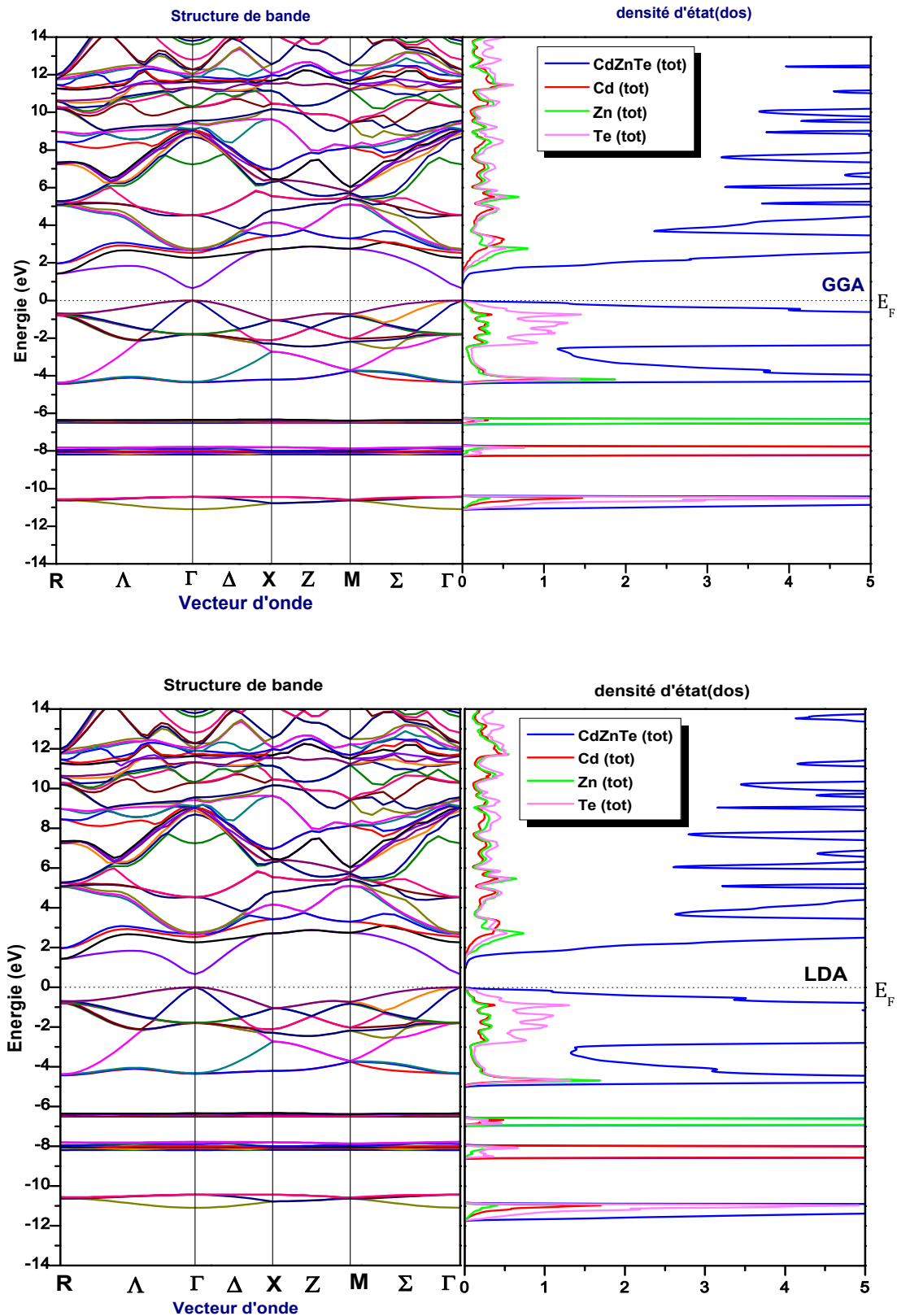


Figure II-11-a : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.50}\text{Zn}_{0.50}\text{Te}$ dans la phase Zinc-blende calculées par GGA et LDA.

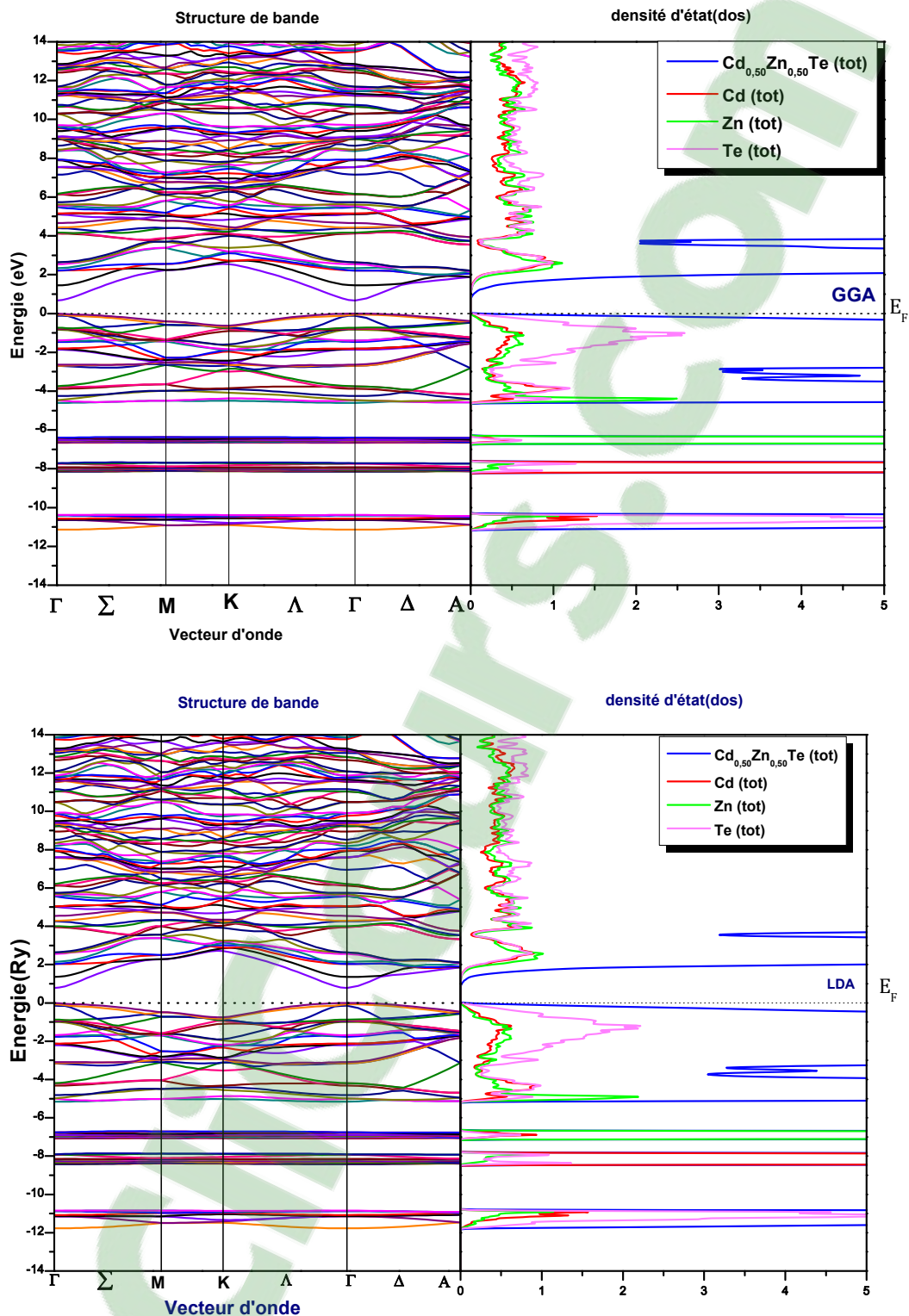


Figure II-11-b : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.50}\text{Zn}_{0.50}\text{Te}$ dans la phase Wurtzite calculées par GGA et LDA.

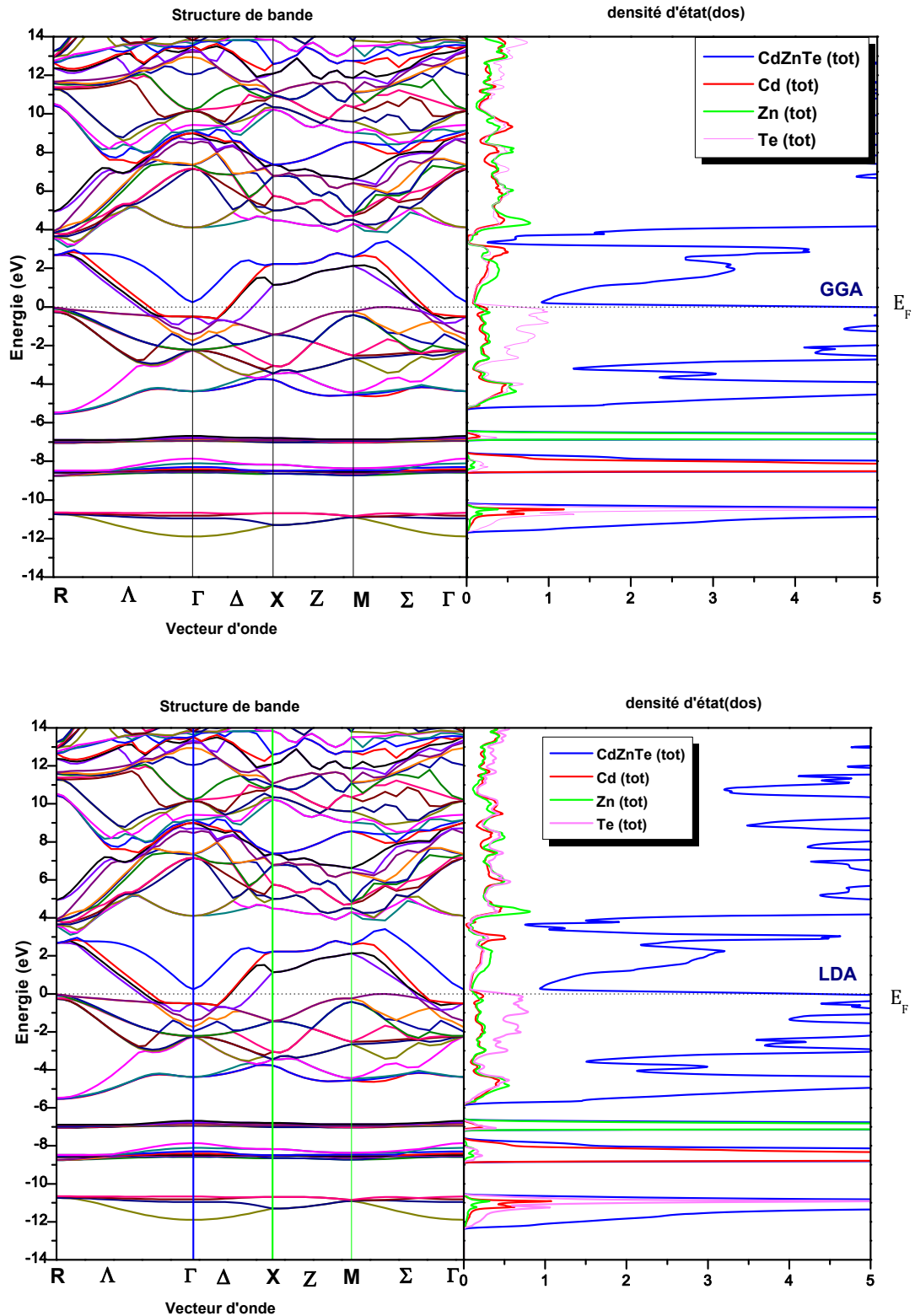


Figure II-11-c : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.50}\text{Zn}_{0.50}\text{Te}$ dans la phase Rocksalt calculées par GGA et LDA.

Sur les figures (II-11-a, b et c) nous représentons la structure de bande et la densité d'état pour les deux approximations dans les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt. Nous avons déterminé l'énergie de la bande interdite pour les deux phases Zinc-blende et Würtzite qui est égale 0.65204eV et 0.67059eV pour l'approximation GGA et 0.74067eV et 0.77545eV pour l'approximation LDA. En comparant les figures de la densité de charge, nous remarquons que la contribution des états des trois atomes Cd, Zn et Te sont pratiquement identique pour la bande de conduction et nous obtenons une variation similaire pour la partie supérieur de la bande de valence.

Tableau II-5: Les différents paramètres du $\text{Cd}_{0.50}\text{Zn}_{0.50}\text{Te}$ dans les trois phases

paramètre	phase	Nos valeurs	
		GGA	LDA
$a(\text{Å})$	Wz	4.37837 $c/a=1.5889$ $u=0.375$	4.41512 $c/a=1.6357$ $u=0.4981$
	Zb	6.43965	6.25002
	Rock	5.99642	5.80501
V_0	Wz	66.76770	60.95999
	Zb	66.70927	61.03576
	Rock	53.90345	48.904519
B'	Wz	4.6679	5.07
	Zb	4.73	3.4
	Rock	4.90	4.6970
$E_{\text{tot}}(\text{Ry})$	Wz	167888.20511	167736.793924
	Zb	83944.08097	83868.3725
	Rock	83943.952161	83868.27889
$E_{\text{fer}}(\text{Ry})$	Wz	0.20289	0.24693
	Zb	0.19698	0.23960
	Rock	0.30652	0.37432
E_{gap}	Wz	0.67059	0.77545
	Zb	0.65204	0.74067
	Rock	0.88083	1.1013

Ce tableau montre les différents paramètres du $\text{Cd}_{0.50}\text{Zn}_{0.50}\text{Te}$ dans les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt par les deux approximations GGA et LDA.

Clicours.COM

Pour $x=0.75$

a. Variation d'énergie en fonction du volume :

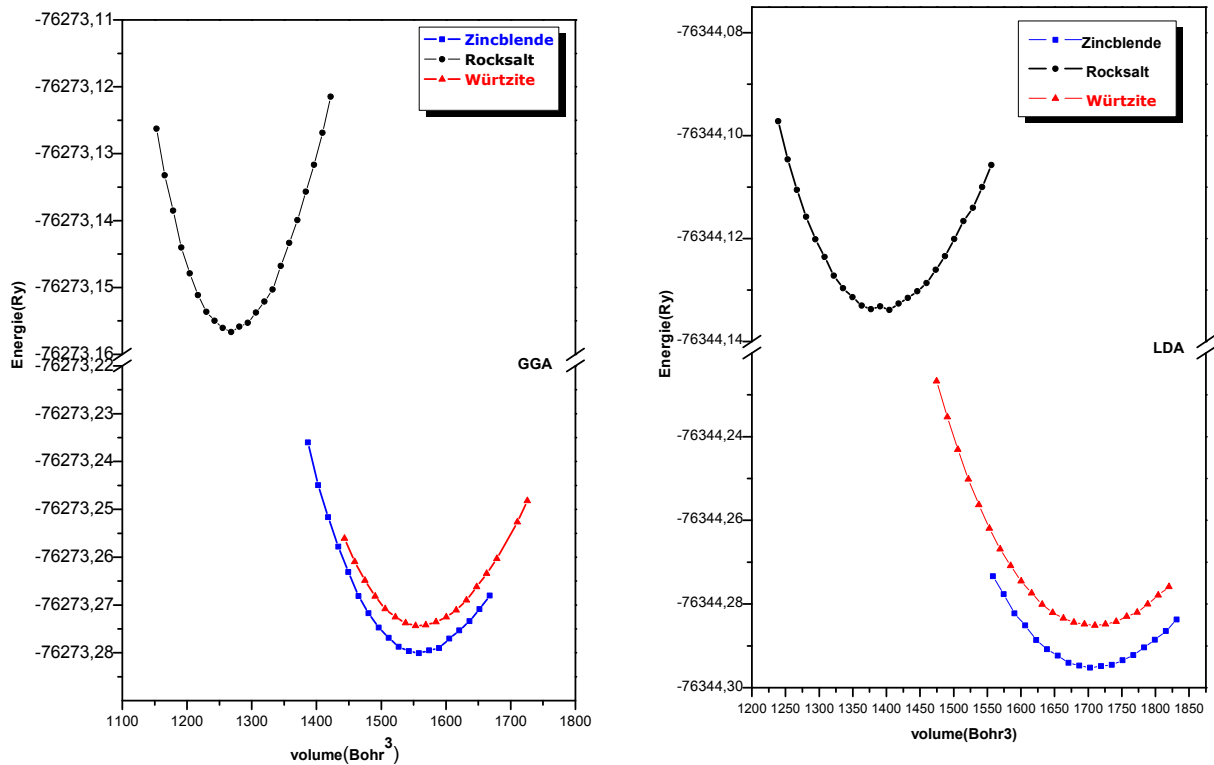


Figure II-12 : Variation de l'énergie en fonction du volume de l'alliage ternaire $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$ dans les phases **Zinc-blende**, **Würtzite** et **Rocksalt** calculée par **GGA** et **LDA**.

Sur la figure II-12 nous représentons la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour l'alliage ternaire $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$ pour les deux approximations GGA et LDA. Nous remarquons que la phase la plus stable est la phase Zinc-blende pour l'alliage ternaire $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$ qui correspond à un minima en énergie totale.

b. Propriétés de structure de bande et densité d'états de $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$:

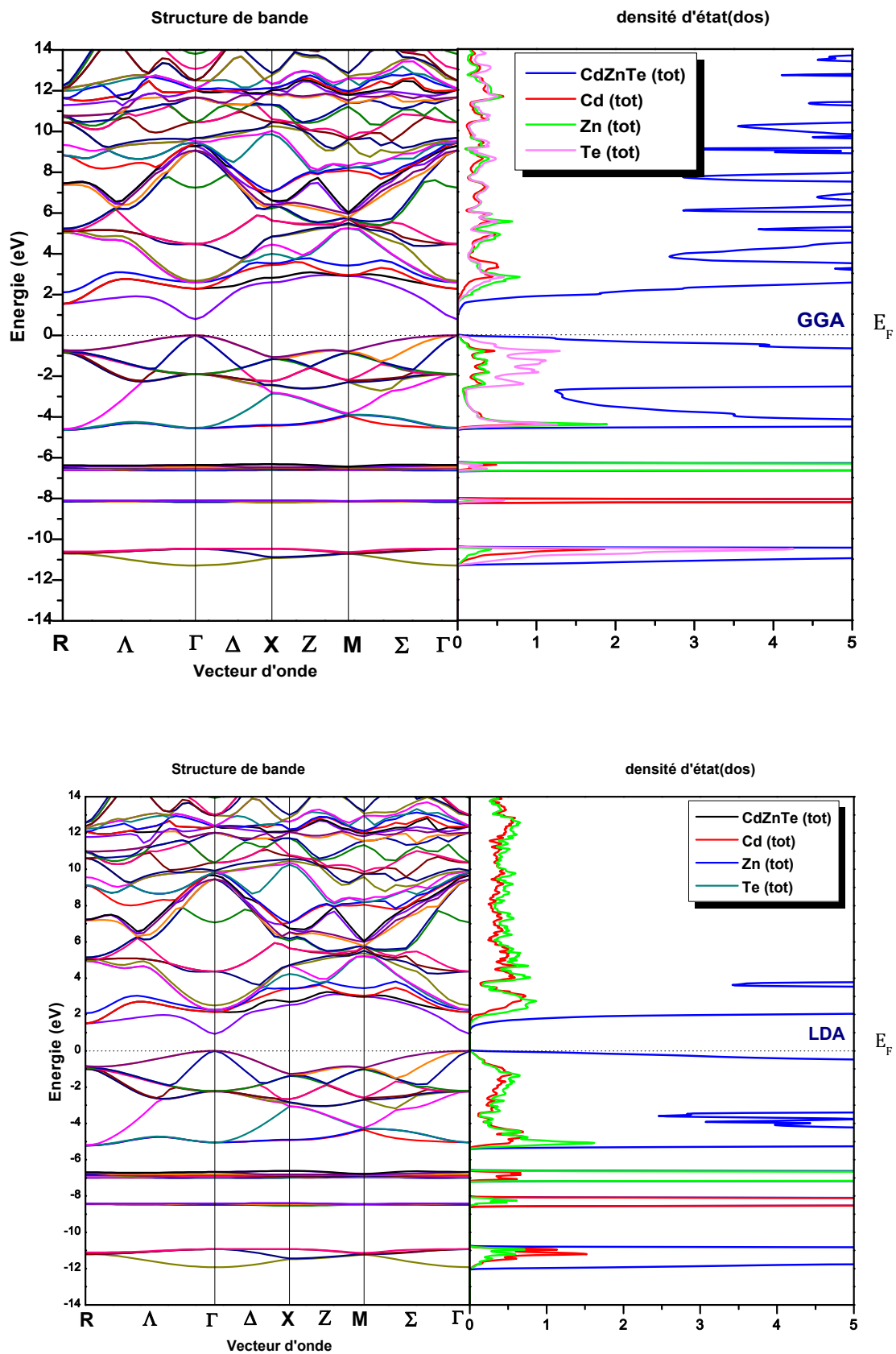


Figure II-13-a : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$ dans la phase Zinc-blende calculées par GGA et LDA.

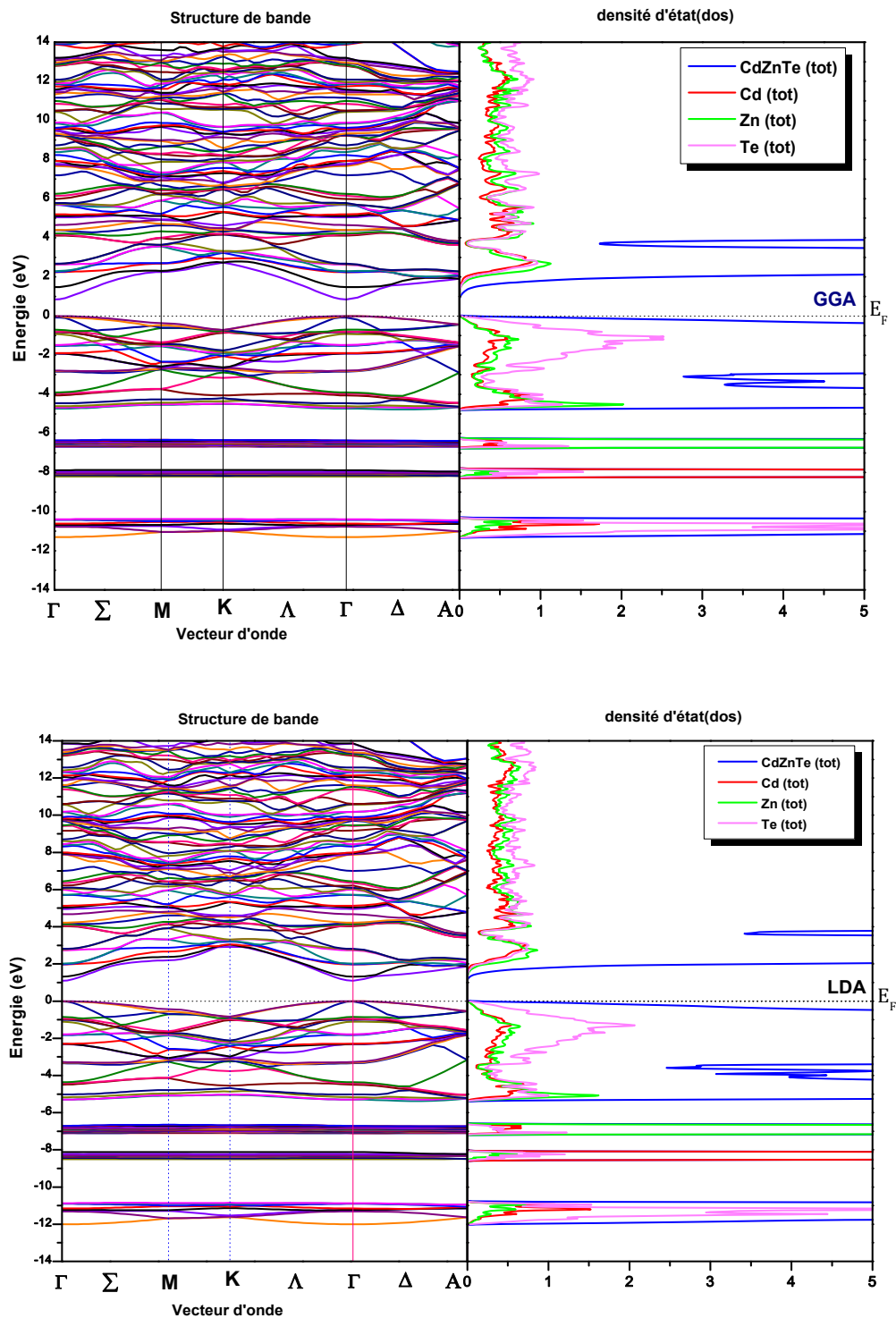


Figure II-13-b : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$ dans la phase Würtzite calculées par GGA et LDA.

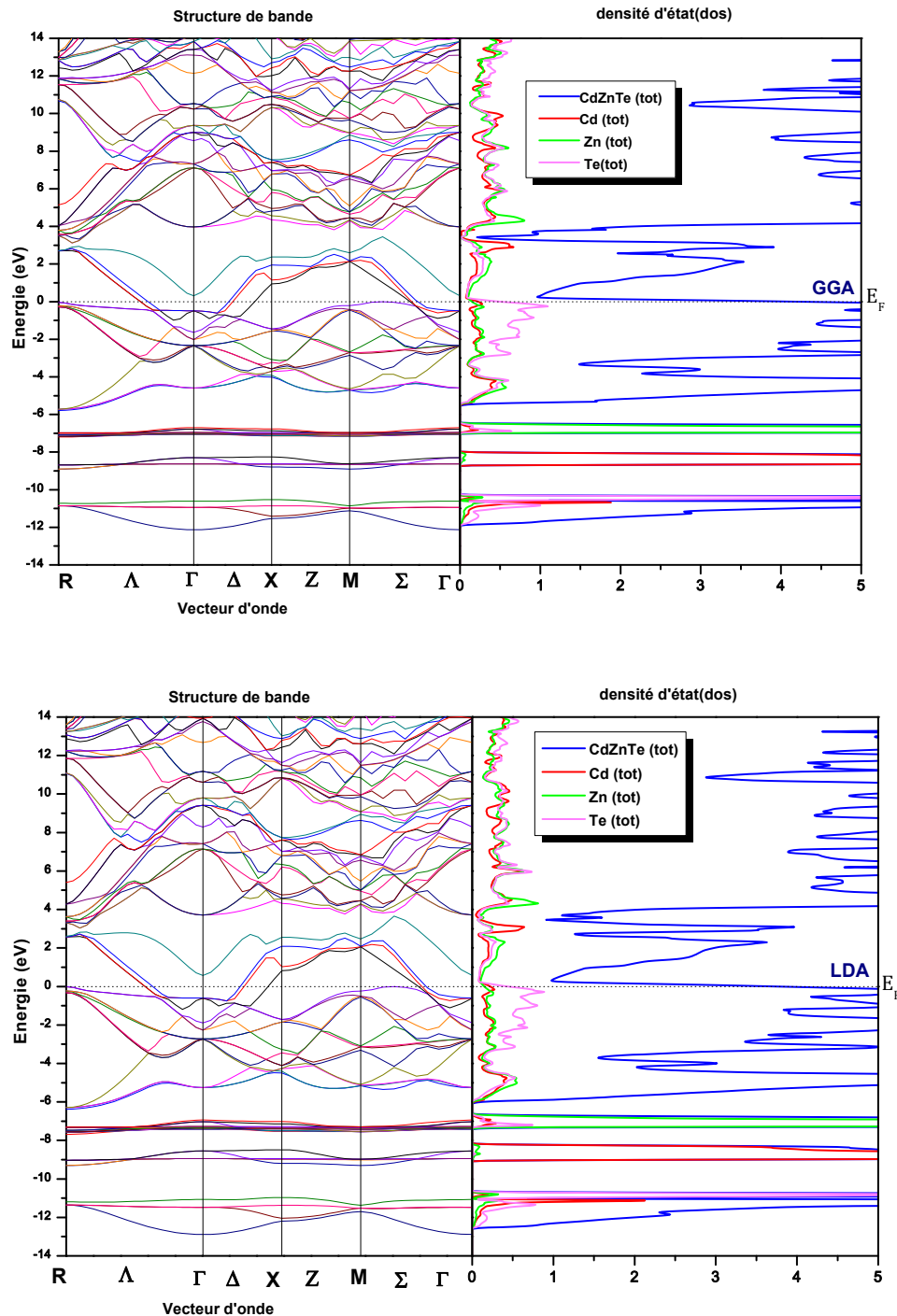


Figure II-13-c : Structure de bande et densité d'état de $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$ dans la phase **Rocksalt** calculées par **GGA** et **LDA**.

Sur Les figures (II-13- a, b, c) nous présentons la structure de bande et la densité d'état pour l'alliage ternaire $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ pour $x=0.75$ calculée par l'approximation GGA et LDA pour les trois phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt.

Nous remarquons que le gap est direct pour les deux phases Zinc-blende et Würtzite où le maximum de la bande de valence et le minimum de bande de conduction se situe dans le point Γ , on trouve que la valeur de l'énergie de la bande interdite dans les deux approximations GGA et LDA est 0.79093 eV, 0.93290 eV pour la phase Zinc-blende et 0.84142 eV, 1.09463 eV pour la phase Würtzite.

Tableau II-6: Différents paramètres du $\text{Cd}_{0,25}\text{Zn}_{0,75}\text{Te}$ dans les trois phases

paramètre	phase	Nos valeurs	
		GGA	LDA
a(Å)	Wz	4,46900	4,33672
		c/a=1,63638	c/a=1.61410
		u=0.5003	u=0,4979
	Zb	6,32530	6,13663
	Rock	5.90686	5.72894
V ₀	Wz	63.24394	57.79213
	Zb	63.26953	57.77369
	Rock	51.52413	47.0071
B'	Wz	4.48	4.8
	Zb	4.05	4.61
	Rock	4.74	4.9367
E _{tot} (Ry)	Wz	38172,1503	38136,6450
	Zb	38172,1393	38136,63995
	Rock	38172,0668	38136,5783
E _{fer} (Ry)	Wz	0.21147	0.27749
	Zb	0.20642	0.26301
	Rock	0.32276	0.38315
E _{gap}	Wz	0.84142	1.09463
	Zb	0.79093	0.93290
	Rock	0.98331	1.18535



3.5 Structure de bande (BC et BV) du $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ par l'approximation GGA :

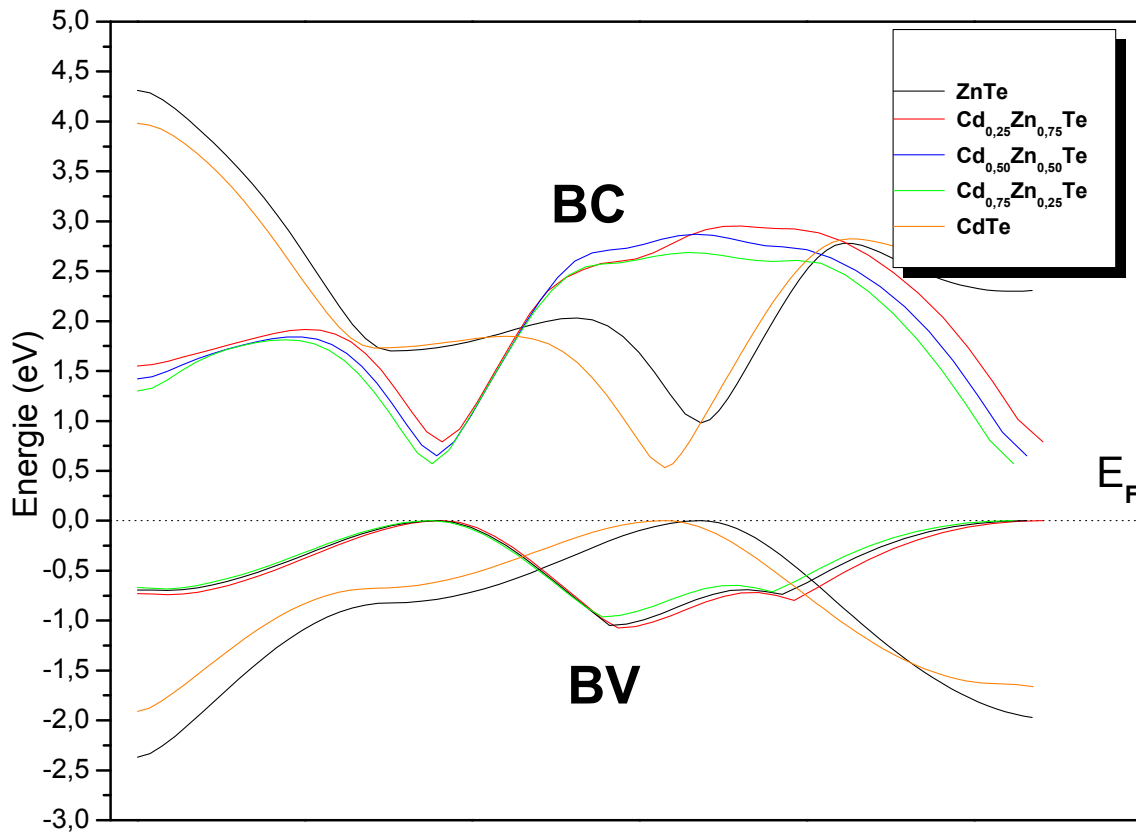


Figure II-14 : Bandes de conduction et de valence pour chaque composition x dans la phase **Zinc-blende**.

Sur la figure (II-14) nous représentons la variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition du Zinc $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($x=0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$). Nous remarquons que l'énergie de la bande interdite diminue lorsque la composition en composition en Zinc diminue. Cela confirme les résultats expérimentaux pour le CdTe et le ZnTe.

3.6 Energie de la bande interdite en fonction de la composition x de Zinc:

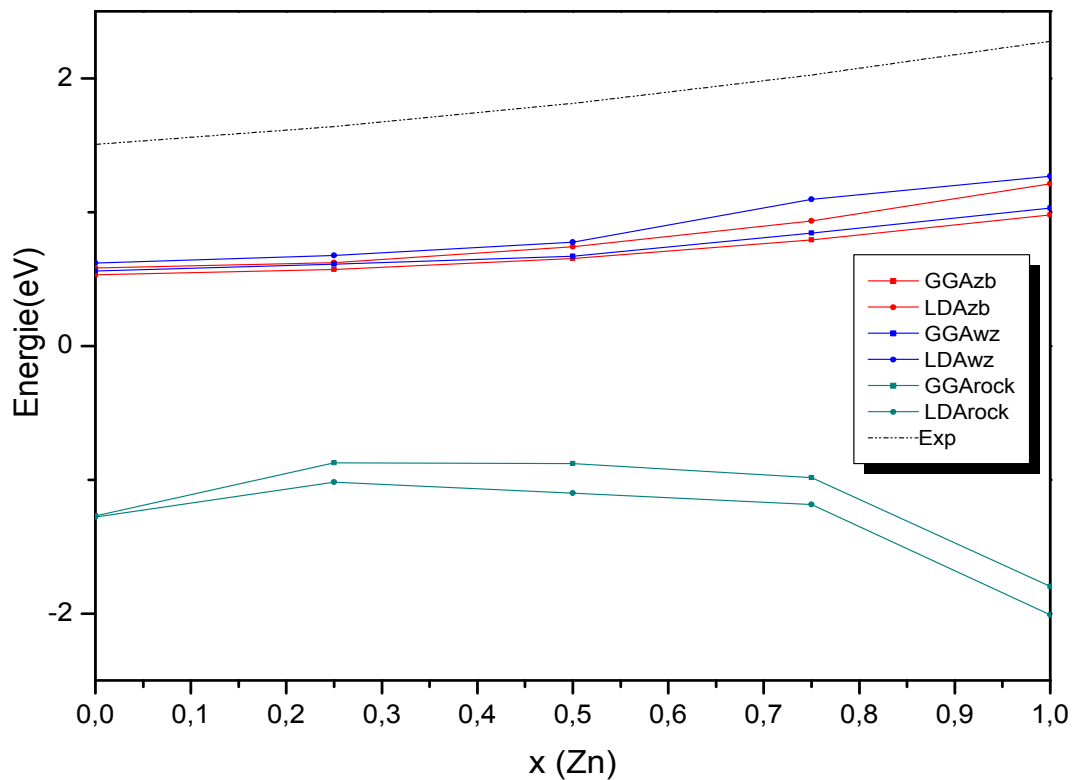


Figure II-15 : Energie de la bande interdite en fonction de la composition de Zinc.

Nous avons présenté sur la figure II-16 l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition de Zinc. Nous remarquons que l'énergie de la bande interdite augmente quand la composition x augmente dans alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$ dans les deux approximations GGA et LDA dans les deux phases Wurtzite et Zinc-blende.

3.7 Paramètre de maille en fonction de la composition x(Zn) :

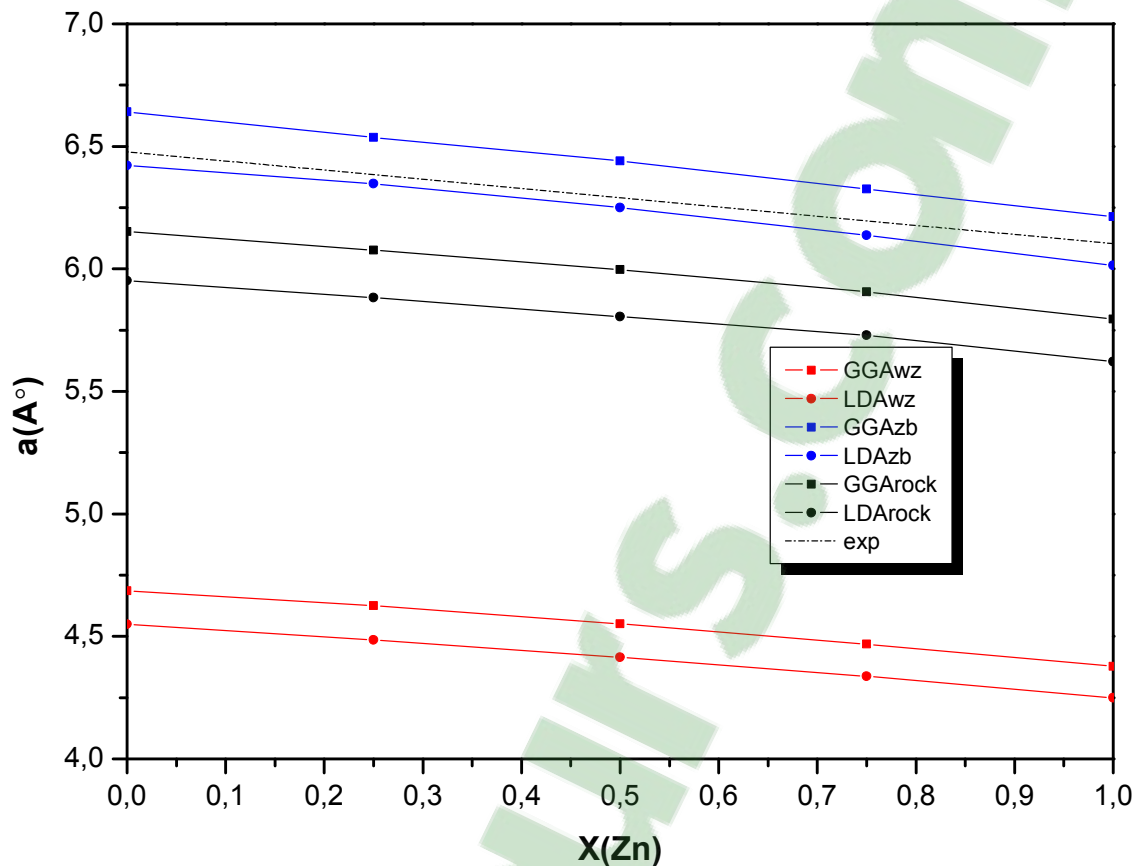


Figure II-16 : Paramètre de maille en fonction de la composition de Zinc.

Sur cette figure nous présentons la variation de paramètre de maille en fonction de la composition de Zinc pour l'alliage ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$. Nous remarquons que le paramètre de maille diminue en fonction de la composition de Zinc dans les deux approximations. Nous remarquons également que l'approximation LDA pour la phase Zinc-blende donne des résultats proches des valeurs expérimentaux.

3.8 Coefficient c/a en fonction de la composition x (Zn) :

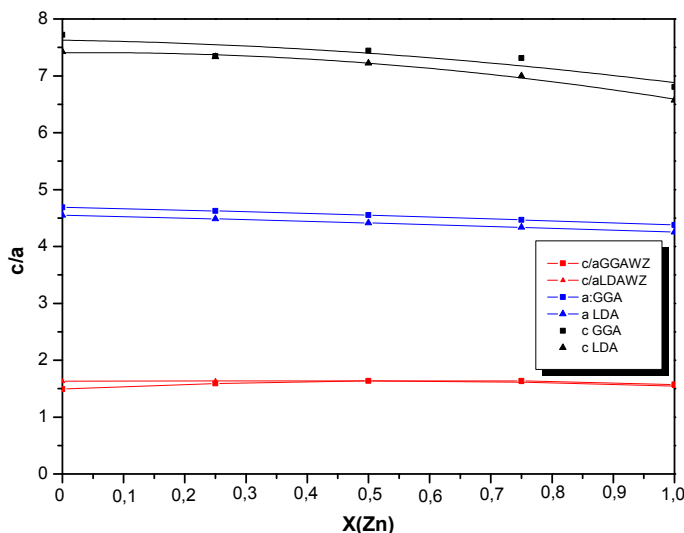


Figure II-17 : Rapport c/a en fonction de la composition x.

Sur cette figure II-17 nous présentons la variation de rapport de paramètre de maille c/a en fonction de la composition de zinc pour l'alliage ternaire Cd_{1-x}Zn_xTe. Nous remarquons que le paramètre de maille diminue en fonction de la composition de Zinc dans les deux approximations GGA et LDA.

4. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les propriétés structurales et électroniques des matériaux II-VI à base de Cadmium CdTe et à base de Zinc ZnS et ZnTe et l'alliage ternaire Cd_{1-x}Zn_xTe pour différentes compositions de Zinc x=0.25, 0.50 et 0.75 dans les deux approximations LDA et GGA et dans les 3 phases Zinc-blende, Würtzite et Rocksalt. Nous avons montré que pour le binaire ZnTe la phase la plus stable est la phase Zinc-blende donnée par l'approximation LDA. Il présente un gap direct qui se situe au point Γ .

Nous remarquons également pour ce binaire que la contribution des états de l'atome Te est considérable par rapport à l'atome de Zinc (Zn) pour la bande de valence cela est dû à l'atome du Te qui est plus lourd que l'atome du Zinc. L'erreur commise sur le paramètre

de maille et l'énergie de la bande interdite dans la phase Zinc-blende en comparant à d'autres résultats théoriques est faible et de l'ordre de 2% pour le paramètre de maille et de 7% pour l'énergie de la bande interdite dans l'approximation LDA.

Nous avons montré pour le binaire ZnS que les deux phases Würtzite et Zinc-blende coexistent. Cependant dans des conditions thermodynamique (température et pression) définies l'une des deux structures prédomine qui correspond à la phase la plus stable du binaire. L'erreur commise sur le paramètre de maille est de 10% et 12% dans l'approximation GGA et LDA respectivement dans la phase Würtzite. Pour la phase Zinc-blende l'erreur est très faible elle est de l'ordre de 1% et 2% dans l'approximation GGA et LDA respectivement.

Nous avons montré que le binaire CdTe cristallise dans la phase Zinc-blende qui est la phase la plus stable et cela est confirmé dans les deux approximations GGA et LDA. Il présente un gap direct. Pour la densité d'état, nous remarquons que la contribution des atomes de Te est plus importante par rapport à la contribution du Cadmium dans l'approximation LDA. Nous remarquons que l'erreur obtenue dans l'approximation LDA sur le paramètre de maille est faible comparé aux résultats expérimentaux elle est de l'ordre de 0.46%. Donc nous concluons que l'approximation LDA donne de bon résultat comparé à l'approximation GGA.

Pour l'alliage ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$ pour ($x=0.25, 0.50, 0.75$) nous avons montré que lorsque la composition $x=0.75$ l'alliage cristallise dans la phase Zinc-blende, pour $x=0.50$ les deux phases coexistent et pour $x=0.25$ la phase würtzite l'emporte et cela dans les deux approximations GGA et LDA. Nous remarquons également pour différentes compositions de Zinc ($x=0,0.25, 0.50,0.75,1$), que l'énergie de la bande interdite diminue lorsque la composition en Zinc diminue. Cela confirme les résultats expérimentaux de l'énergie de la bande interdite pour le binaire CdTe et le ZnTe.

Clicours.COM

5. Références

- [1] O. Zakharov, A. Rubio, X. Blase, M. L. Cohen, et S. G. Louie, Phys. Rev. B, Vol 50, N°15, (1994).
- [2] R. Franco, P. Mori-Sanchez, J.M. Recio, Theoretical compressibilities of high-pressure ZnTe polymorphs, Physical Review B 68 (2003) 195208.
- [3] Ji-Hui Yang, Shiyu Chen, Wan-Jian Yin, and X. G. Gong, Electronic structure and phase stability of MgTe, ZnTe, CdTe, and their alloys in the B3, B4, and B8 structures, PHYSICAL REVIEW B 79, 245202 (2009).
- [4]: O. M. Madelung, Semiconductors: Data Handbook, 3rd ed. Springer, Berlin, (2004).
- [5]: Ouendadji, S., Ghemid, S., Meradji, H., Hassan, F.E.H.: Comput. Mater. Sci. 50 (2011) 460.
- [6]: Zerroug, S., Sahraoui, F.A., Bouarissa, N.: Eur. Phys. J. B 57 (2007) 9.
- [7] S. Ves, U. Schwarz, N.E. Christensen, K. Syassen, M. Cardona, Phys. Rev. B 42 (1990) 9113.
- [8] O. Madelung (Ed.), Numerical Data and Functional relationships in Science and Technology, Landolt Bochnstein, New Series, Group III, vol.22, Springer, Berlin, (1987) (Pts. A).
- [9] P. Baranski, V. Klotchkov, I. Potykeritch, « électronique des semi-conducteurs », Ed. Mir Moscow (1978).
- [10] Haitao Chen, Yipei Hu, Xianghua Zeng; Green photoluminescence mechanism in ZnS nanostructures, Springer, (2010).
- [11] Guide wien2K.

Chapitre 3

Etude des effets de polarisation et de ferroélectricité dans les matériaux II-VI CdZnTe.

1. Introduction	59
2. Etude des effets de polarisation de CdZnTe	60
3. Effets de la Ferroélectricité de CdZnTe	63
4. Conclusion	65
5. Références	66

1. Introduction :

Dans les matériaux II-VI, les directions $\langle 111 \rangle$ sont des axes polaires, donc les plans $\{111\}$ et $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$ sont différents : les plans $\{111\}$ sont formés d'atomes de la colonne II, alors que les plans $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$ sont formés d'atomes de la colonne VI. Une autre singularité directement liée à l'absence de centre de symétrie est le fait que se sont des matériaux piézoélectriques par conséquent on peut générer des charges électriques de signes opposés sur les faces A et B, en appliquant une contrainte le long de l'axe polaire $\langle 111 \rangle$. Ces résultats ressemblent aux résultats observés pour une structure hexagonale würtzite.

Pour étudier les effets de polarisation nous avons choisi de prendre l'alliage ternaire $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ qui présente des effets combinés de polarisation piézoélectriques suivant la direction (111) en prenant l'hétérostructure CdZnTe/CdTe et des effets de ferroélectricité.

Cette structure présente des effets de polarisation [1] suivant l'axe polaire [111] qui est de l'ordre du mV/A°, cela peut modifier les propriétés photoniques en contrôlant la largeur du puits quantique et la composition en Zinc. Enfin, nous allons voir que cette structure est le siège d'un effet ferroélectrique [2] intéressant.

2. Etude des effets de polarisation de CdZnTe

La présence d'un champ électrique dans les semi-conducteur II-VI cubique non centrosymétrique est du à l'application d'une contrainte biaxiale ou uniaxiale suivant l'axe (111) et par conséquent les tétraèdres élémentaires seront déformés et les barycentres des charges positives et négatives ne seront plus confondus, il y'aura apparition d'un dipôle dans le tétraèdre élémentaire. En plus, cet effet est du aussi aux constantes piézoélectriques de signe opposées dans les semi-conducteurs II-VI.

La différence de paramètre de maille entre les différentes couches de matériaux produit des contraintes et des déformations le long de l'axe [111] [3] dans les hétérostructures CdTe/CdZnTe à puits quantiques. Dans ce cas les contraintes internes génèrent un champ piézoélectrique. L'hétérostructure CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe présente un champ piézoélectrique de l'ordre de mV/A°. Ces hétérostructures sont particulièrement prometteuses en vue de réaliser des détecteurs et des émetteurs du fait qu'elles sont très sensibles à variation du champ piézoélectrique.

Suivant la direction [111] le champ piézoélectrique est donné par [4]:

$$E_{piezo} = \frac{2\sqrt{3}}{\epsilon_0} e_{14} \frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}+2C_{12}+4C_{44}} \epsilon_{xx} \quad (\text{III-1})$$

e_{14} : est un tenseur piézo-électrique

C_{44} : constante d'élasticité

L'effet piézoélectrique produit un champ électrique à l'intérieur du puits quantique, orienté perpendiculairement au puits, les porteurs de charge (électrons et trous) sont soumis à un gradient de potentiel qui incline les bandes à l'intérieur du puits. La figure III-2 représente la structure de bande d'un puits piézoélectrique de type I. En l'absence de contrainte, dans les barrières, nous considérerons que les barrières sont plates.

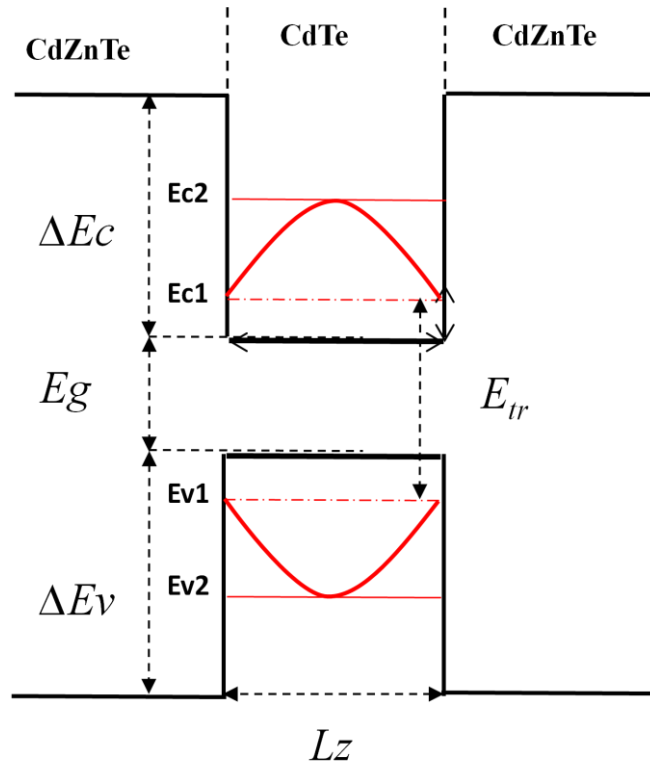


Figure III-1 schéma d'un simple puits quantique CdTe/ Cd_{1-x}Zn_xTe

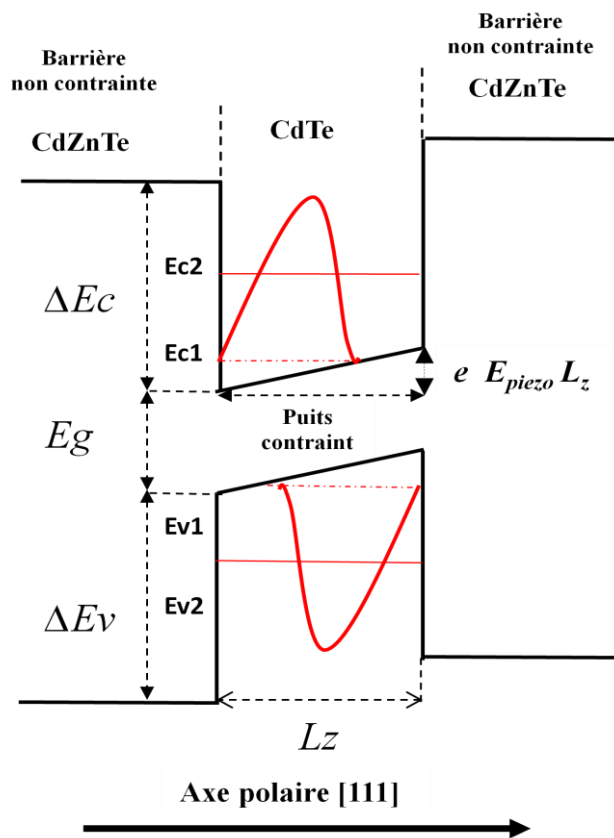


Figure III-2 : Structure de bande et niveaux d'énergie dans un puits quantique piézo-électrique avec $E \neq 0$.

Dans nos calculs nous avons pris la valeur expérimentale $e_{14} = 0.035 \text{ C/m}^2$ [5] et $C_{44} = (2.070 \pm 0.001) \text{ G Pa}$ [6].

Sur la figure III-2, nous représentons la variation du champ piézoélectrique en fonction de la composition d'alliage du Zinc. Nous remarquons que le champ piézoélectrique augmente en valeur absolue lorsque la composition de Zinc augmente. Sur la figure III-12, nous représentons la variation de l'énergie de transition sans et avec champ piézoélectrique. Nous remarquons que ce champ affecte l'énergie de transition, par conséquent l'écart énergétique diminue lorsque la largeur du puits augmente et on obtient un décalage vers des grandes longueurs d'onde pour $L_z > 140 \text{ \AA}$ (red shift de la transition excitonique).

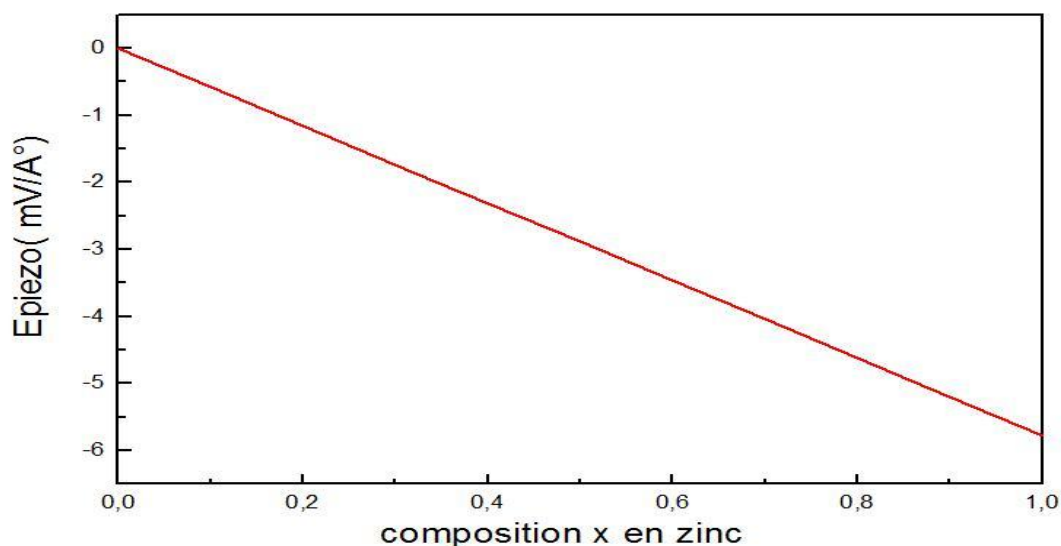


Figure III-3 : Variation du champ piézoélectrique en fonction de la composition d'alliage du Zn

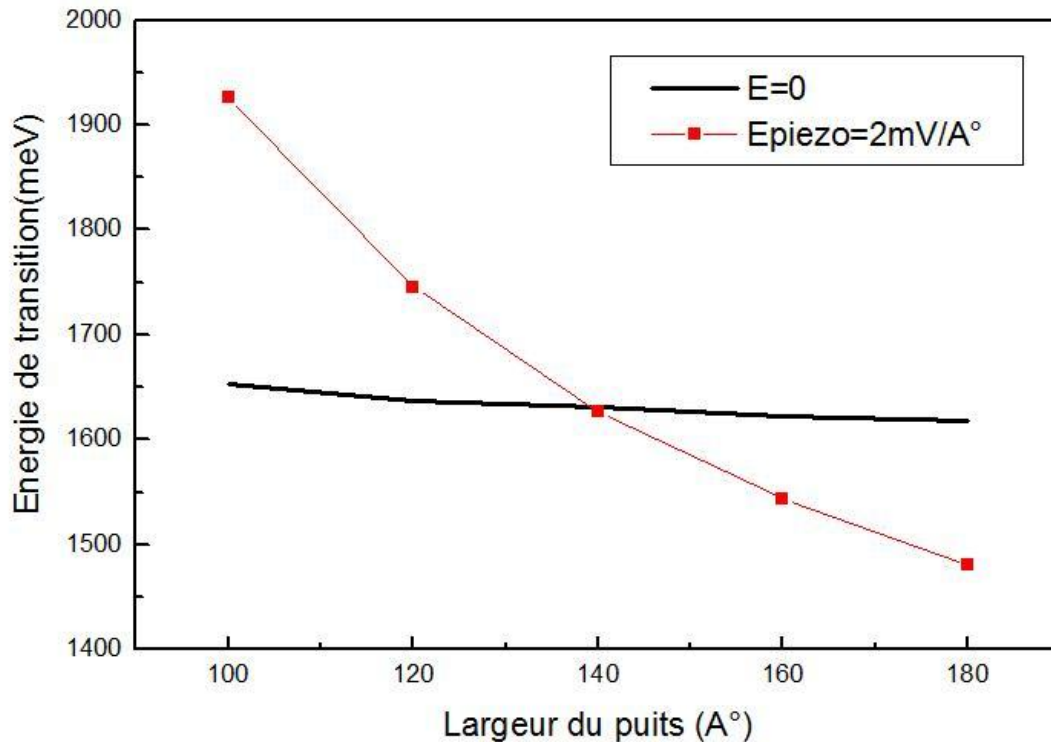


Figure III-4 : Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits sans et avec champ piézoélectrique.

3. Effets de la Ferroélectricité de CdZnTe :

Un cristal ferroélectrique présente une polarisation spontanée même en absence d'un champ électrique extérieure. Dans l'état ferroélectrique le champ électrique présente un cycle d'hystérésis voir figure III-4. Les cristaux ferroélectriques peuvent être classés en deux groupes principaux, ordre-désordre des ions et à déplacement de la sous-structure complète des ions d'un type par rapport à une autre sous-structure.

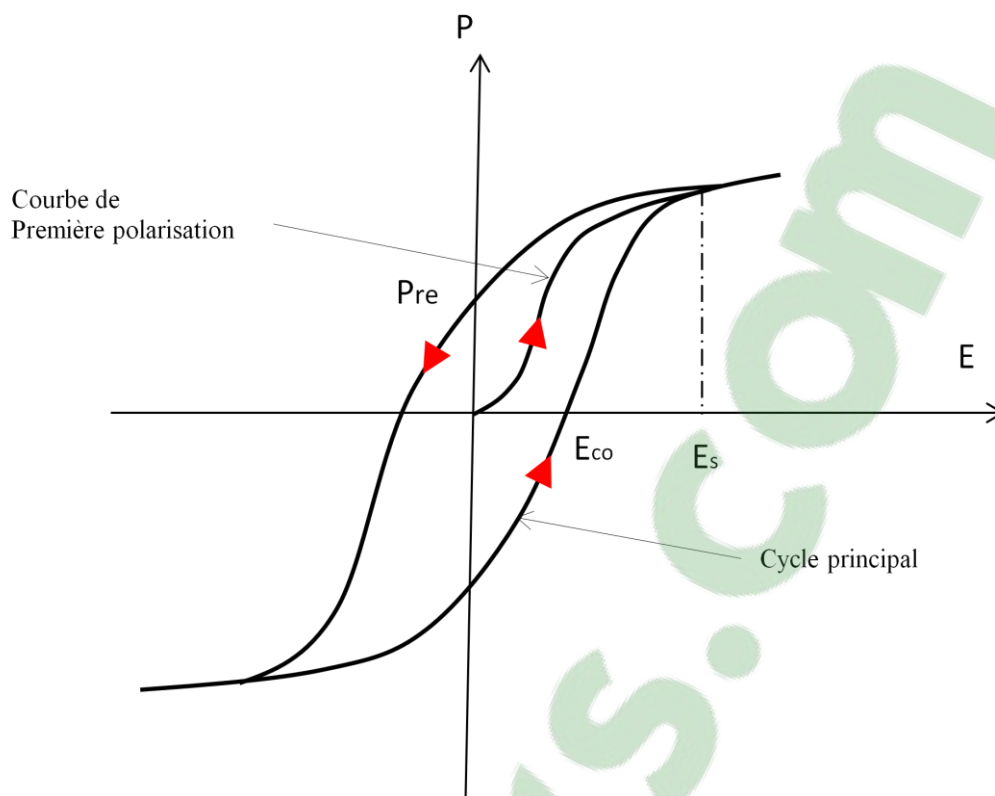


Figure III-5 : Cycle d'hystérésis ferroélectrique, le champ coercitif est E_c .

Les effets ferroélectriques sont décrits par la théorie de Landau qui décrit une transition de phase supposée initialement continue et caractérisée par un paramètre d'ordre dans notre cas c'est la polarisation qui est nulle dans la phase de haute température et non nulle en dessous du point de transition. A la température T , l'état d'équilibre stable correspond à une valeur de P qui minimise l'énergie libre $G(T, P)$. Les transitions de phase paraélectrique-ferroélectrique peuvent être de deux types : ordre-désordre et displacive. Dans l'alliage CdZnTe [7], la ferroélectricité est démontrée par les analyses de la constante diélectrique en fonction de la température. Le CdZnTe présente une transition de phase de type ordre-désordre de second ordre.

4. Conclusion:

Nous avons montré que la structure CdZnTe/CdTe est le siège d'un champ piézoélectrique important de l'ordre de $2\text{mV}/\text{Å}^\circ$ pour $x=0.344$, ce champ affecte les états de conduction ils sont poussés vers les grandes énergies par contre les états de valence sont moins affectés du fait de la faible valeur du band off set. Cela induit une augmentation de l'écart énergétique et par conséquent une diminution de l'énergie de transition vers des longueurs d'onde et on obtient un red shift de la transition excitonique.

Nous avons également montré que cette structure présente un cycle d'hystérésis (effet ferroélectrique) et une transition de phase de second ordre.

5. Référence :

- [1] Smith, D. L. and Mailhiot, C., Rev. Mod. Phys. vol . 62, p. 173 (1990).
- [2] R. Weil, R. Nkum, E. Muranevich, and L. Benguigui, Phys. Rev. Lett. vol . 62, p. 2744 (1990).
- [3] Andre, R., Deshayes, C., Cibert, J., Le Si Dang, Tatarenko, S. and Saminadayer, K., Phys. Rev. B42, 11392 (1990).
- [4] Régis André, thèse de doctorat, grenoble, (1992).
- [5] P.Maheswaranathan, R.J.Sladek and U.Debska, Phys. Rev B 31, p. 7910, (1985).
- [6] R.D.Greenough and S.B.Palmer, J. Phys. D 6, p. 587 (1973) .
- [7] R. Weil, R. Nkum, E. Muranevich, and L. Benguigui, Phys. Rev. Lett.vol. 62, p 2744 ,(1989) .
- [8] H. Huang, L. M. Zhou, J. Guo, H. H. Hng, J. T. Oh, and P. Hing, Appl. Phys. Lett. Vol. 83, p.3962, (2003).

Clicours.COM

CONCLUSION

En conclusion de ce travail de mémoire de Magister, nous avons présenté une étude de simulation et d'optimisation ab-initio des propriétés électroniques la structure de bande (SB) et la densité d'état (DOS) des matériaux semi-conducteurs II-VI de la famille du Cadmium (CdTe), du Zinc (ZnS et ZnTe) et l'alliage ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$ pour les différentes compositions d'alliages $x=0.25$, $x=0.50$ et $x=0.75$ ensuite les hétérostructures associées.

Notre objectif était de présenter une étude approfondie sur ces matériaux qui peuvent coexister dans les deux phases Zinc-blende et würtzite ainsi dans la phase rocksalt en utilisant le code wien2k basé sur les deux approximations LDA et GGA. Ensuite choisir la bonne approximation qui permet d'estimer le paramètre de maille et l'énergie de la bande interdite avec une faible erreur comparée aux valeurs expérimentaux. Nous avons aussi déterminé la densité d'état qui donne des informations sur la polarisation.

Nous avons montré que ces matériaux II-VI présentent des effets de polarisation intéressante du fait que les directions $\langle 111 \rangle$ sont des axes polaires en particulier l'hétérostructure CdZnTe/CdTe, qui présente un champ piézoélectrique de l'ordre de mV/A° . Cette structure est le siège d'un autre effet qui est l'effet ferroélectrique qui induit une réduction importante du gap quantique et par conséquent un red (red-shift) de la transition excitonique.

Résumé

Dans ce travail nous avons étudié les matériaux CdTe/ZnTe/ZnSe/ZnS qui ont la particularité d'être ferroélectrique. Cette propriété est très marquée pour CdZnTe. L'objectif de ce travail est d'étudier l'origine physique de cette ferroélectricité dans CdZnTe ainsi que les matériaux parents CdZnS, et CdZnSe. Pour cela, nous mettons en cour la théorie ab-initio qui permet de d'écrire la distribution de la densité de charge ainsi que sa polarisation à l'origine da la ferroélectricité.

Au chapitre I, dans ce chapitre nous étudions les propriétés structurales, électroniques et optiques pour les composés binaires CdTe, ZnTe, ZnS et le composé ternaire $Cd_xZn_{1-x}Te$ pour différentes compositions d'alliages.***Au chapitre II***, nous présentons la methode et la procedure de calcul qui utilise le code wien2k qui est basée sur la théorie fonctionnelle de la densité DFT. Nous avons exploité nos résultats de calcul pour ces matériaux binaires CdTe, ZnTe, ZnS et l'alliage ternaire $Cd_xZn_{1-x}Te$ en utilisant les deux approximations LDA et GGA. Ensuite nous avons comparé nos résultats théoriques avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques .Cela nous a permis de choisir la meilleure approximation qui donne une erreur de 2%. Pour l'énergie de la bande interdite l'approximation LDA donne de bon résultat et la GGA donne des résultats satisfaisants pour le paramètre de maille.***Au chapitre III***, nous présentons les effets de polarisation suivant l'axe polaire $\langle 111 \rangle$ pour l'hétérostructure CdTe/CdZnTe qui est le siège des effets combinés de polarisation piézoélectrique et des effets de ferroélectricité.

Mots clés:

Ab-Initio; Electroniques; Cdte; Znte; Znse; Zns; Polarisation; DFT; Ferroélectricité; Piézoélectrique.