

Introduction :

Les matériaux sont présentés dans de multiples domaines et prennent une place de plus en plus importante dans les systèmes que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour[1-2].

On différencie trois types de matériaux : les isolants, les conducteurs et les semi-conducteurs. Les isolants sont les matériaux qui ont une résistivité ρ supérieure à ($10^8 \Omega \cdot \text{cm}$) matériaux non conducteurs de courant électrique. Parmi ces matériaux; le verre, le mica, la silice (SiO_2) et le carbone (Diamant). La conductivité des isolants est donc très faible ($\sigma=1/\rho$).

Les Conducteurs sont les métaux tels que le fer (Fe), le cuivre (Cu), l'or (Au), l'argent (Ag) et l'aluminium (Al) sont des conducteurs de courant électrique. La présence d'électrons libres dans la couche périphérique (densité $n \approx 10^{22}$ à 10^{23}é/cm^3) est à l'origine de la conductivité électrique. A température ambiante la résistivité ρ des conducteurs est très faible ($\rho \leq 10^5 \Omega \cdot \text{cm}$).

Les Semi-conducteurs sont intermédiaires entre les métaux et les isolants : à $T = 0\text{K}$ un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semi-conducteurs varie entre $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ et $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$, alors que celle des métaux est de l'ordre de $10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$ et celle des isolants peut atteindre $10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$.

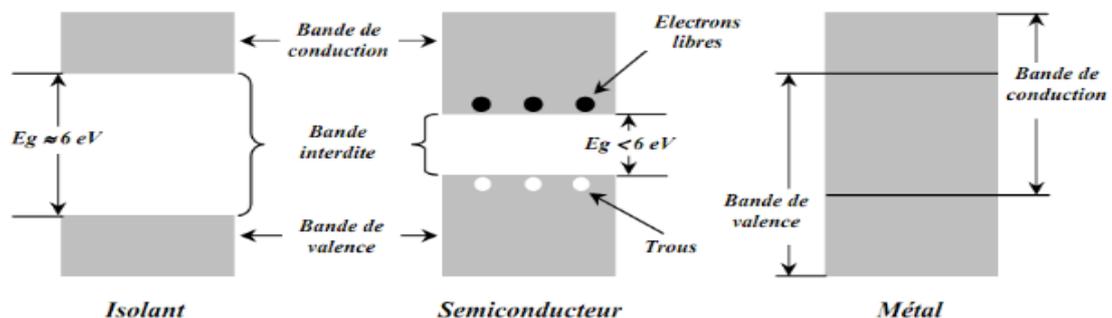


Figure (I.1) : structure en bandes d'énergie des matériaux ; Isolants, semi-conducteurs, métaux[3]

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19^{ème} siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Dans un semi -conducteur il existe deux types de conduction : la conduction par électrons et la conduction par trou

I.2.1.Semi-conducteur intrinsèque :

On dit que le semi-conducteur est intrinsèque lorsque le cristal n'est pas pollué par des impuretés pouvant changer la concentration en porteurs libres c'est à dire pur. Dans ces semi-conducteurs il existe deux types :

- a) **Semi-conducteurs intrinsèques simples:** Un semi-conducteur intrinsèque simple est constitué d'un seul élément tels que les semi-conducteurs de la colonne IV de la classification périodique par exemple ; le silicium (Si) et de Germanium (Ge).

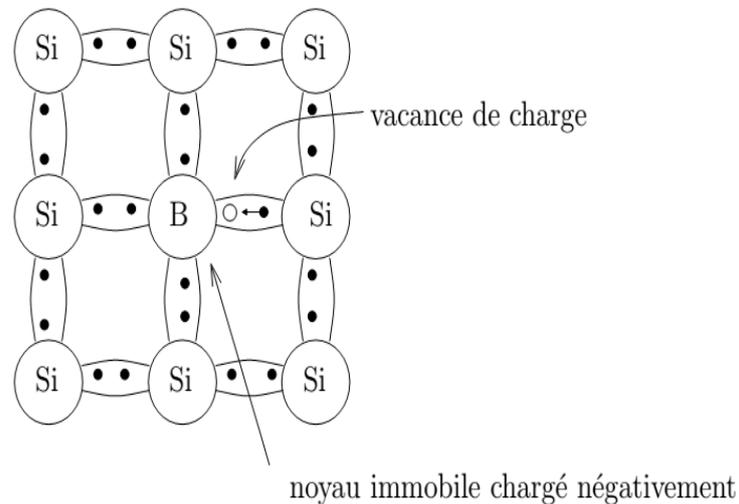
- b) **Semi-conducteurs intrinsèques composés:**Dans cette catégorie,semi-conducteur est constitué d'au moins deux types d'atomes différents. Les semi-conducteurs binaires de la classe (II-VI) sont constitués d'un élément de la colonne II et d'un autre élément de la colonne VI de la classification périodique. Les semi-conducteurs de la classe (III-V) sont composés d'un élémentde la colonne III et d'un autre élément dela colonne V de la classification périodique.De même avec les semi-conducteurs de la classe (IV-VI)

I.2.2.Semi-conducteur extrinsèque :

L'introduction de certaines impuretés dans un matériau semi-conducteur permet d'y modifier la concentration des porteurs libres dont il ya deux types.

- a) **Semi-conducteur de type n :**Les impuretés sont de type donneur (électron) ont été introduit dans le cristal.Considérons par exemple les semi-conducteurs tétravalents tels que Si ou Ge. Ils cristallisent dans une structure où chaque atome est relié à quatre atomes voisins par des liaisons covalentes. Introduisons un atome ayant cinq électrons de valence (phosphore, arsenic antimoine...). Il prend la place d'un atome du cristal. Parmi les électrons de l'impureté,

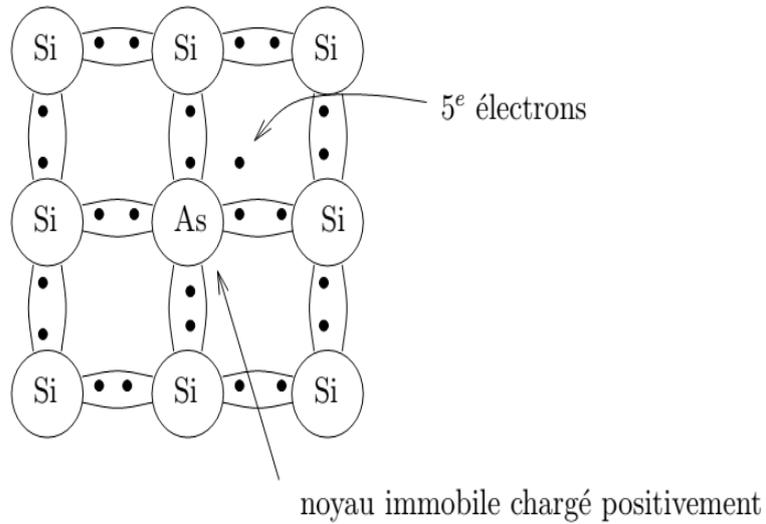
quatre participeront aux liaisons avec les voisins et le cinquième restera célibataire. L'atome d'impureté est associé à un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui se situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semi-conducteur est dit de type n.



Figure(I.2) :semi-conducteur extrinsèque type n

b) Semi-conducteur de type p :

Les impuretés sont de type accepteur (trou) ont été introduit dans le cristal Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore aluminium ou galium). Celui-ci ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semi -conducteur est dit de type p [2].



Figure(I.3) :semi-conducteur extrinsèque type p

Nous représentons quelques familles des matériaux semi-conducteurs ($T=300K^\circ$)

[8] :

Colonne		Semi-conducteur
IV		Ge Si
III-V	Binaire	GaAs ,GaP , InAs et GaSb
	Ternaire	$Al_xGa_{1-x}As$ et $Ga_yAs_{1-y}P$
	Quaternaire	$Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$
II-IV	Binaire	CdS ,HgTe , CdTe, ZnTe, BeTe, BeSe et BeS
	Ternaire	$Cd_xHg_{1-x}Te$

Tableau (I.1) : Exemples de semi-conducteurs

I.3. Applications des semi-conducteurs:

Les semi-conducteurs constituent un domaine d'application très important allant des dispositifs optoélectroniques, photovoltaïque, photonique à l'analyse biologique et le diagnostic médical

I.3.1. Sources de la lumière:**a) Diodes électroluminescentes :**

Les propriétés de fluorescence des semi-conducteurs ouvrent des nouvelles voies dans le domaine de l'optoélectronique[4, 5]. Ils sont susceptibles d'être à la base de diodes électroluminescences. Ils ont la possibilité d'être incorporé dans des structures mixtes pour réaliser des matériaux organique/inorganique.

b) Lasers :

Le principe du laser est de convertir l'énergie de pompage en énergie lumineuse par un amplificateur optique intégré dans une cavité résonante.

I.3.2. Photovoltaïque :

Les cellules photovoltaïques convertissent la lumière en électricité avec l'exploitation de l'effet photovoltaïque. La découverte de l'effet photovoltaïque remonte à l'année 1839 quand le physicien français Edmond Becquerel observa le changement de la tension d'une électrode de platine sous l'effet de l'illumination par la lumière. L'exploitation de cet effet a commencé à partir de 1950, lorsque les chercheurs de Bell Laboratoires aux Etats-Unis fabriquèrent la première cellule photovoltaïque au silicium cristallin. Les cellules solaires restant trop chères pour avoir une exploitation à grande échelle, le défi est aujourd'hui, de concevoir des matériaux moins onéreux. Une équipe de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne a développé un nouveau type de cellules basées sur des films semi-conducteurs nanocristallins de dioxyde de titane TiO_2 . L'absorption de la lumière est assurée par un colorant (S) bien choisi adsorbé chimiquement à la surface d'un semi-conducteur nanocristallin de TiO_2 .

I.3.4. Biologie:

Les points quantiques sont utilisés en biologie comme des sondes fluorescences pour sonder les propriétés des molécules biologiques. En 1998 le groupe d'Alivistos[6,7] effectua la première expérience sur l'emploi en biologie de nano agrégats semi-conducteurs de CdSe/ZnSe de type cœur-coquille. La voie chimique a été utilisée par Chan et al. Pour synthétiser des points quantiques de CdSe.

L'intérêt particulier de l'application des points quantiques en biologie vient du fait qu'ils sont préparés dans un milieu aqueux qui leur donne la capacité de s'accrocher sur des molécules biologiques, telles que les protéines et les acides nucléique (ADN, ARN). Cette aptitude provient des ligands qui servent à faire des ponts entre les points quantiques et le milieu environnant. À cause de la nature cristalline des points quantiques ils présentent un avantage supplémentaire par rapport aux fluorophores organiques. Ces molécules sont capables d'émettre par fluorescence de lumière à des longueurs d'onde plus élevées, cependant ils sont sensibles au phénomène de photo destruction

I.4. Les semi-conducteurs II-VI :

Les semi-conducteurs désignent les matériaux capables de relayer du courant électrique en ayant des propriétés physiques à mi-chemin entre le métal et l'isolant. Ce sont des éléments essentiels de l'électronique et de l'informatique modernes puisqu'ils permettent de contrôler à la fois la direction du courant et son intensité.

Nous allons rappeler que Les semi-conducteurs binaires sont composés de deux atomes dont la somme d'électrons de valence des deux atomes égale à huit. Les semi-conducteurs binaires les plus courants sont les semi-conducteurs composés d'éléments des colonnes III-V et II-VI du tableau périodique.

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

<http://www.periodni.com/fr/>

Légende :

- Métaux (bleu)
- Métalloïdes (orange)
- Non-métaux (vert)
- Métaux alcalins (bleu clair)
- Métaux alcalino-terreux (bleu très clair)
- Métaux de transition (bleu foncé)
- Lanthanides (violet)
- Actinides (violet foncé)
- Chalcogènes (vert clair)
- Halogènes (vert foncé)
- Gaz nobles (jaune)

État physique (25 °C, 101 kPa) :

- Ne - gaz
- Fe - solide
- Hg - liquide
- Te - synthétique

Informations pour l'élément B :

- MASSE ATOMIQUE RELATIVE (I) : 10,811
- NOMBRE ATOMIQUE : 5
- SYMBOLE : B
- NOM DE L'ÉLÉMENT : BORE

Tableau principal :

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
87	88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
87	88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118

LANTHANIDES :

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
LANTHANE	CÉRIUM	PRASEODYME	NÉODYME	PROMÉTHIUM	SAMARIUM	EUROPIUM	GADOLINIUM	TERBIUM	DYSPROSIUM	HOLMIUM	ERBIUM	THULIUM	YTTÉRIUM	LUTÉTIUM

ACTINIDES :

89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
ACTINIUM	THORIUM	PROTACTINIUM	URANIUM	NEPTUNIUM	PLOUTONIUM	AMÉRICIUM	CURIUM	BERKÉLIUM	CALIFORNIUM	EINSTEINIUM	FERMIUM	MENDELÉVIUM	NOBELIUM	LAWRENCIUM

(1) Pure Appl. Chem., 81, No. 11, 2131-2156 (2009)
La masse atomique relative est donnée avec cinq chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande. Toutefois, pour les trois éléments (Th, Pa et U) qui ont une composition isotopique terrestre connue, une masse atomique est indiquée.

Figure(I.2) : tableau périodique des éléments [8].

I.5. Les propriétés structurales d'un semi-conducteur II-VI :

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 électron - optiques et optoélectronique et de leurs application à la réalisation récente de diodes lumière (LED a couleur verte basé sur BeTe). Cela a motivé plusieurs théoriciens et expérimentateurs à faire l'étude sur ces composés, afin de déterminer leurs propriétés physiques (structurel électronique, optiques, thermodynamique...) dans cette famille et leurs alliages et réviser beaucoup de propriétés physiques fondamentales basé sur les calculs de l'Ab-Initio.

Les mono-chalcogénides à base de béryllium (BeX: 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. Les chalcogénures II-VI ont connu un intérêt croissant du à leurs applications potentielles dans la nouvelle technologie. Des expériences et des calculs ont été effectués sur les chalcogénures à base de béryllium, de Béryllium. Il est prévu que ces composés peuvent fournir de nouveaux candidats II-VI pour la fabrication de divers dispositifs électroniques et optiques.

I.5.1. Structure Cristalline :

Le semi-conducteur dont il est question dans cette recherche est de type II-VI, c'est-à-dire qu'il est constitué d'un élément de la colonne II de la classification périodique de Mendeleïev et d'un élément de la colonne VI[9]. L'atome de béryllium étant de type II, il possède deux électrons de valence sur une orbitale s, sa configuration électronique étant : $[\text{Be}] = 1s^2 2s^2$.

L'atome de soufre est de type VI. Sa configuration électronique étant : $[\text{S}] = 3s^2 3p^4$, il possède six électrons de valence sur des orbitales s et p et l'atome de Sélénium possède six électrons de valence sur des orbitales s et p : $[\text{Se}] = 3d^{10} 4s^2 4p^4$. L'atome de Tellure possède six électrons de valence sur des orbitales s et p : $[\text{Te}] = 4d^{10} 5s^2 5p^4$. La liaison de BeS résultant de l'hybridation sp des orbitales atomiques, est covalente avec une part d'ionicité. La nature de la liaison entre le soufre et du sélénium et de tellure et de (2anion) très électronégatif et le béryllium (Be+2cation) très électropositif est ion - covalente.

L'élément Be sur son dernière orbitale s contre 4 sur les orbitales s et p de l'élément IV S, Se et Te. La liaison II-VI est une liaison covalente avec, en plus, une part ionique non négligeable qui provient de la différence d'électronégativité entre l'anion (Se, S et Te) et le cation (Be). Cette ionicité donne aux semi-conducteurs II-VI des propriétés intéressantes pour des applications optiques dues aux larges bandes interdites et aux fortes interactions coulombiennes qu'ils possèdent.

Les composés binaires semi-conducteurs BeTe, BeSe et BeS cristallisent dans un arrangement zinc-blende avec un environnement tétraédrique et une même hybridation sp^3 . La structure zinc-blende est une structure d'origine cubique appartenant au groupe

spatial $F4 3m (Td)$. La maille élémentaire de cette structure est presque identique à celle du diamant à la seule différence, que chaque atome d'un élément donné est entouré, dans un environnement tétraédrique, par quatre atomes de l'espèce opposée. De ce fait, ces composés sont des cristaux simples manquant d'un centre de symétrie et, ainsi, sont capables de donner naissance à des effets piézo-électriques ainsi qu'à d'autres effets dépendants de la symétrie polaire. On note que la structure zinc-blende présente un taux de compacité de l'ordre de 0.34: c'est le taux de remplissage. Elle est donc considérée comme une structure ouverte d'où la possibilité d'insertion d'atomes légers. La figure I.5 représente la zone de Brillouin pour une structure zinc blende.

I.5.1.1. Structure Zinc Blende:

La matière condensée peut prendre deux états solides différents, suivant les conditions dans lesquelles elle s'est formée : un état dit amorphe, dans lequel la disposition des atomes est aléatoire, ou un état cristallisé, caractérisé par un arrangement périodique des atomes. Les solides amorphes sont généralement appelés des verres et considérés comme des liquides de haute viscosité. Les solides cristallisés peuvent former des monocristaux, si la périodicité est ininterrompue dans tout le volume, ou des poly-cristaux, s'il existe une périodicité locale et que le solide est composé d'un ensemble de grains cristallins de taille à peu près uniforme.

A chaque nœud sont associés deux atomes A(II) et B(VI); les atomes A et B sont disposés sur deux réseaux cubiques à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale du cube. Les atomes du type II sont situés en : $(0,0,0)$, $(0,1/2,1/2)$, $(1/2,0,1/2)$, $(1/2,1/2,0)$, et les atomes du type VI en: $(1/4,1/4,1/4)$, $(1/4,3/4,3/4)$, $(3/4,1/4,3/4)$, $(3/4,3/4,1/4)$. Chaque atome est entouré de quatre atomes de l'autre espèce, placés aux sommets d'un tétraèdre régulier (figure I.5.a).

I.5.1.2. Structure hexagonale (Wurtzite):

Dans ce cas les atomes A et B sont disposés sur deux réseaux hexagonaux décalés l'un par rapport à l'autre de $3/8$ du paramètre c . De même que pour la structure cubique, un atome du type II est entouré de quatre atomes de type IV disposés aux sommets d'un tétraèdre régulier (figure I.5.b). Les atomes du type II occupent les

positions cristallographiques : $(0,0,0)$ et $(2/3,1/3,1/2)$, et les atomes du type VI occupent les positions $(0,0,u)$ et $(2/3,1/3,1/2+u)$, avec $u = 3/8$. Bien que le II-VI à base de Béryllium se cristallise dans les deux structures. La première zone Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre Tronqué (Figure I.5).

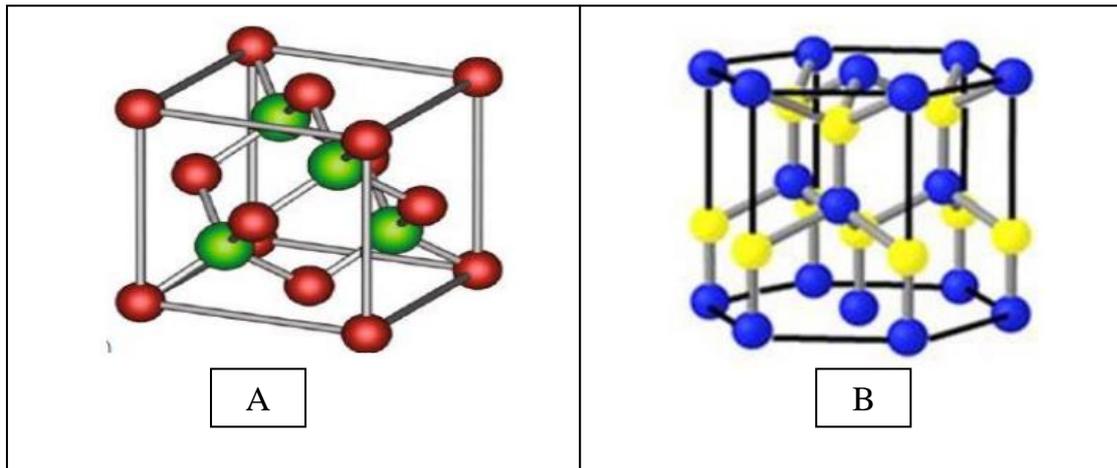
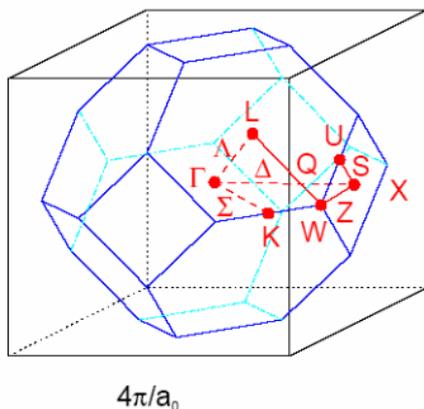


Figure (I.4) : Structures cristallographiques des semi-conducteurs II-VI (A) Zinc blende à gauche, (B)wurtzite[10].



$\Gamma = \frac{2\pi}{a_0}[0, 0, 0]$	$U = \frac{2\pi}{a_0}[1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$
$X = \frac{2\pi}{a_0}[1, 0, 0]$	$W = \frac{2\pi}{a_0}[1, \frac{1}{2}, 0]$
$L = \frac{2\pi}{a_0}[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$	$K = \frac{2\pi}{a_0}[\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0]$
$\Delta = \frac{2\pi}{a_0}[\xi, 0, 0],$	$0 \leq \xi \leq 1$
$\Lambda = \frac{2\pi}{a_0}[\xi, \xi, \xi],$	$0 \leq \xi \leq \frac{1}{2}$
$\Sigma = \frac{2\pi}{a_0}[\xi, \xi, 0],$	$0 \leq \xi \leq \frac{3}{4}$
$Z = \frac{2\pi}{a_0}[1, \xi, 0],$	$0 \leq \xi \leq \frac{1}{2}$
$Q = \frac{2\pi}{a_0}[1 - \xi, \frac{1}{2}, \xi],$	$0 \leq \xi \leq \frac{1}{2}$
$S = \frac{2\pi}{a_0}[1, \xi, \xi],$	$0 \leq \xi \leq \frac{1}{4}$

Figure(I.5):Première zone de Brillouin d'un réseau cubique centré (c.c). Les coordonnées des points et des directions de haute symétrie figurant sur le schéma sont indiquées à droite de la figure[10].

I.6. Les propriétés électroniques :

La structure de bande est la relation entre l'énergie de la particule et son vecteur d'onde k dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de

Brillouin[11,12]. Elles se décomposent en bandes de valence et bande de conduction. la bande de valence est la plus basse, la bande de conduction est la plus haute et la bande interdite ou le gap. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence. Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Les semi-conducteurs à gap indirect, leur bande de conduction correspond à de grande masse électrons effective, donc ayant une faible mobilité (Figure I-3). La plupart des matériaux binaires possèdent un gap direct. Dans ce cas le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont pour un même point k de la zone de Brillouin.

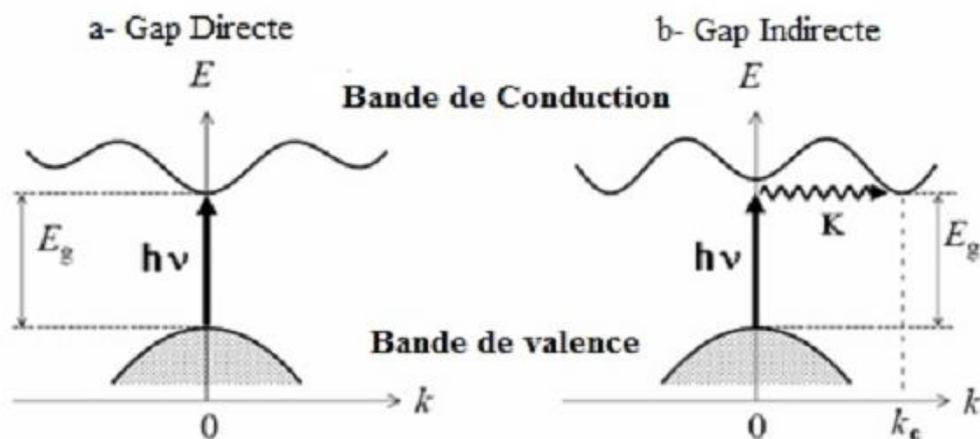


Figure (I.6) :a) Gap directe b) Gap indirecte[13].

I.7. Les Propriétés optiques [14] :

L'interaction d'un électron avec un photon se fait, comme toute interaction, avec conservation de l'énergie et du vecteur d'onde. Les transitions optiques directes entre les extrêmes des bandes de valence et de conduction apparaissent verticales radiatives dans le diagramme de bande des électrons. Dans le cas d'un semi-conducteur à bande interdite indirecte, les transitions optiques à travers le gap

ne peuvent avoir lieu que grâce à une interaction supplémentaire : transitions obliques (non radiatives) (Figure I.7)

-Les caractéristiques optiques des matériaux sont :

Le coefficient de réflexion R :

$$R = \frac{(n-1)^2 + \chi^2}{(n+1)^2 + \chi^2}$$

Où χ est le coefficient d'extinction

et le coefficient de transmission T :

$$T = \frac{4n}{(n+1)^2 + \chi^2}$$

Où n est : l'indice de réfraction

En générale, l'indice de réfraction est lié à la constante diélectrique par la relation : ($n \approx \sqrt{\epsilon_r}$).

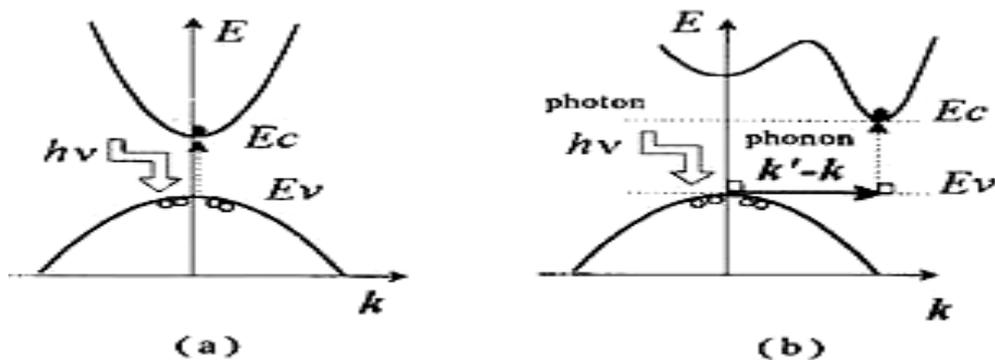


Figure (I.7) : a) radiative, b) non radiative[14].

I.8. L'intérêt de l'introduction du béryllium Be:

Les chalcogénures de béryllium BeX ($X = S, Se, Te$) sont des composés II-VI qui ont été très peu étudiés à cause de la forte toxicité du Be et des difficultés à les synthétiser. Le béryllium est un métal gris et léger. Il est utilisé en faible quantité dans les alliages auxquels il confère dureté et résistance mécanique grâce au caractère covalent de la liaison Be -chalcogène, récemment établie par C. Varié. Bien que les exemples d'application de semi-conducteurs à base de Be ; tel que $ZnBeSe$; dans les

dispositifs optoélectroniques se multiplient [15], relativement peu d'informations sont à ce jour disponibles sur ses propriétés physiques. Bien entendu l'attention s'est en priorité portée sur les propriétés électroniques et structurales du système. En particulier un comportement électronique remarquable est attendu pour l'alliage au niveau des propriétés électroniques puisque ZnX est à gap direct et BeX à gap indirect ($X=S, Se, Te$). Une approche supplémentaire mais encore tâtonnante, pour améliorer encore la fiabilité des dispositifs à base de $ZnSe$, est d'utiliser des composés II-VI contenant du béryllium Be. Les séléniures de béryllium $BeSe$ et tellures de béryllium $BeTe$ sont caractérisés par un nombre considérable de lien covalent et une énergie de liaison élevée. Ceci distingue ces matériaux des semi-conducteurs II-VI conventionnels à large gap ionique comme le séléniure de zinc $ZnSe$, tellures de zinc $ZnTe$ ou les tellures de cadmium $CdTe$. En plus, le quaternaire de séléniures Se et tellures Te contenant du Be peut se cristalliser de la même manière que le $GaAs$. L'incorporation du béryllium Be dans des matériaux à base de $ZnSe$ devrait augmenter la covalence[16], la dureté et l'énergie de liaison du matériau et ainsi, par la même, réduire la dégradation des propriétés optoélectroniques de ces dispositifs. L'usage de composés II-IV contenant du Be, à caractères ionique et covalent appariés à ceux des matériaux II-VI, peut être combiné dans des structures à puits quantiques. L'alignement des bandes des éléments de type II du $BeTe$ et $ZnSe$ nous procure une autre liberté dans l'ingénierie des bandes interdites et il est possible d'exploiter des cristaux appariés à des quaternaires à faible polarité sur du silicium. Ces aspects; en plus de la possibilité de fabriquer des dispositifs à base de structures de très bonne qualité avec des bandes d'énergies très large; ouvrent la porte à des recherches fondamentales intéressantes. Il n'y a que très peu de données sur les propriétés de base des composés à base de Be disponibles dans la littérature. Cependant, on peut d'ores et déjà juger d'une chose, à partir des publications existantes, c'est que les chalcogénures de béryllium - dû à leurs bandes interdite et leurs constantes de réseau - sont des matériaux intéressants pour des diodes émetteuses de lumière (LED's) et les diodes laser (LD's). Donc, des composés II-VI contenant du Be ont commencé à être fabriqués par des faisceaux d'épitaxie moléculaire et leurs propriétés systématiquement étudiées.

Conclusion:

Etant donné que la plupart des semi-conducteurs II-VI se caractérisent par une bande interdite supérieure à 1eV, excepté pour les chalcogénures de mercure. Tandis que les semi-conducteurs II-VI à large bande interdite sont adaptés pour les applications d'afficheurs et de diodes lasers opérant dans la région visible du spectre, ceux à petite bande interdite sont utilisés dans la fabrication de détecteurs infrarouge [17]. La figure III.7 présente les valeurs du gap en fonction du paramètre du réseau pour quelques exemples de semi-conducteurs binaires. Cette partie centrée sur l'étude des semi-conducteurs binaires est organisée au chapitre 3. Ce chapitre est consacré aux propriétés structurales et électroniques des composés à base de béryllium Be. Où nous présentons l'ensemble de nos résultats en les comparants à ceux obtenus par d'autres auteurs et aux valeurs expérimentales existants dans la littérature.

Les solides sont constitués par une association de particules élémentaires : les noyaux et les électrons .le problème théorique fondamental de la physique des solides est de comprendre l'organisation intime de ces particules à l'origine de leurs propriétés. Mais dans ce cas, la mécanique classique s'avère être insuffisante et il faut faire appel à la mécanique quantique dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger par la théorie fonctionnelle de la densité (DFT)[18].

Références

- [1] For a comprehensive review on conventional II-VI materials see e.g. II-VI semi-conductors, R. L. Gunshot and A. Nurmikko (Ed.), Willardson Beer 1997.
- [2] M. Ajjoun. Etude par spectrométrie Raman de l'alliage $Zn_{1-x}BexSe$ qui ouvre la classe des ternaires à fort contraste mécanique (2003).
- [3] L. Bellaïche, S.-H. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. B 54, 17568 (1996).
- [4] P. V. Kamat, D. Meisel, C. R. Chem. 6 (2003) 999.
- [5] C.J. Murphy, J. L. Coffey, Appl. Microsc. 56 (2002)
- [6] J.O. Winter, PHD Thesis, University of Texas (2004)
- [7] H. Okuyama, Y. Kishita, A. Ishibashi, Phys. Rev. B 57 (1998) 2257.
- [8] P. Baranki, V. Klotchkov, I. Potykévitch, *Electronique des semi-conducteurs 2*. 2^{ème} partie, Edition de Moscou (1978).
- [9] J. Nanda, D.D. Sarma, N. Chandrasekharan, G. Hodes Chem. Mater. 12 (2000) 1018.
- [10] U. von Barth and R. Car, unpublished.
- [11] Jérôme fais. introduction à la physique des semi-conducteurs. university de neuchatel.
- [12] P. Kirée V. La Physique des semiconducteurs .édition 2. Moscou.
- [13] P. V. Kamat, D. Meisel, C. R. Chem. 6 (2003) 999.
- [14] Noudjoud LEBGA. Propriétés structurales, élastiques et optiques de semiconducteurs à grand gap : Les composés B-V, les alliages $ZnxCd_{1-x}Se$ et $ZnSe_{1-x}Tex$, le β -SiC thèse doctorat. 2011
- [15] W. TIDJEDIT, propriétés structurales, électriques, magnéto-optiques et stabilité structurale des semi-métaux magnétiques, Université de Tlemcen, 2012.
- [16] V. Wagner, J. J. Liang, R. Kruse, S. Gundel, M. Keim, A. Waag, J. Geurts, Phys. Stat. Sol. (b) 215, 87 (1999).
- [17] L. Bellaïche, S.-H. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. B 54, 17568 (1996).
- [18] W. TIDJEDIT, propriétés structurales, électriques, magnéto-optiques et stabilité structurale des semi-métaux magnétiques, Université de Tlemcen, 2012.