## **RÉSUMÉ**

Une méthode de calcul Ab-Initio a été utilisée pour étudier les propriétés structurales et électroniques de chalcogénures de béryllium BeS, BeSe et BeTe, en utilisant la méthode linéaire des orbitales Muffin-Tin (FP-LMTO). L'énergie de d'échange-corrélation est décrite dans l'approximation de la densité locale (LDA) en utilisant le paramétrage de Perdew et Wang. D'après les résultats des propriétés électroniques, nous constatons que ces matériaux ont des bandes interdites indirectes. Les paramètres structuraux dans la phase blende de zinc (B3) sont déterminés. Une cohérence a été montrée entre nos résultats et ceux d'autres calculs théoriques et d'autres données expérimentales.

**Mots clefs**: FP-LMTO, LDA, DFT, Structure électronique, Bande interdite, Densité d'états, Semi-conducteurs II-VI, Chalcogénures de béryllium.

## **ABSTRACT**

A method of calculation Ab-Initio was used to study the structural and electronic properties of beryllium chalcogénures BeS, BeSe and BeTe, by using the method linear of orbital Muffin-Chock (FP-LMTO). The energy of exchange-correlation is described in the approximation of the local density (LDA) by using the parameter setting of Perdew and Wang . after the results of the electronic properties, we note that these materials have indirect forbidden bands. The structural parameters in the phase sphalerite of zinc (B3) are given. A coherence was shown between our results and those of other theoretical calculations and other experimental data.

**Key words**: FP-LMTO, LD A, DFT, electronic Structure, Forbidden band, Density of states, Semiconductor II-VI, Chalcogénures of beryllium.

الملخص طريقة حساب Ab-initio، استخدمت لدراسة الخصائص الهيكلبة والإلكترونية لكلكوجينات البريليوم Bese ، Bes و Bes ، باستخدام أسلوب <u>FT-LMTO</u> باستخدام المحابير والنوابت Burke ، Perdew) PBE و Emzerhof). من نتائج الخصائص الإلكترونية، نجد أن هذه المواد لديها شريط طاقوي غير مباشر. وتوصف الخصائص الهيكلبة في مرطة الزنك بلاند (B3). ولوحظ تناسب بين نتائجنا ونتائج الحسابات النظرية وأخرى تجاريبة.

الكلمات الرئسية:

LDA FT-LMTO الهبكل الإلكنروني، الشريط الممنوع، المكون الإلكنروني II-VI ، كلكوجبنات المربلبوم.