

2^{ème} Partie :

Les propriétés électroniques des semi-conducteurs chalcopyrites

CuGaX₂(X=S, Se)

Les propriétés électroniques des composés CuGaX_2 ($X=\text{S}, \text{Se}$)**1. Bandes d'énergies :**

Après l'optimisation de nos matériaux, on s'intéresse dans cette partie aux calculs des propriétés électroniques.

Les figures (III.1/b) et (III.2/b) représentent les structures de bandes électroniques calculées le long des lignes de hautes symétries en utilisant GGA-PBE.

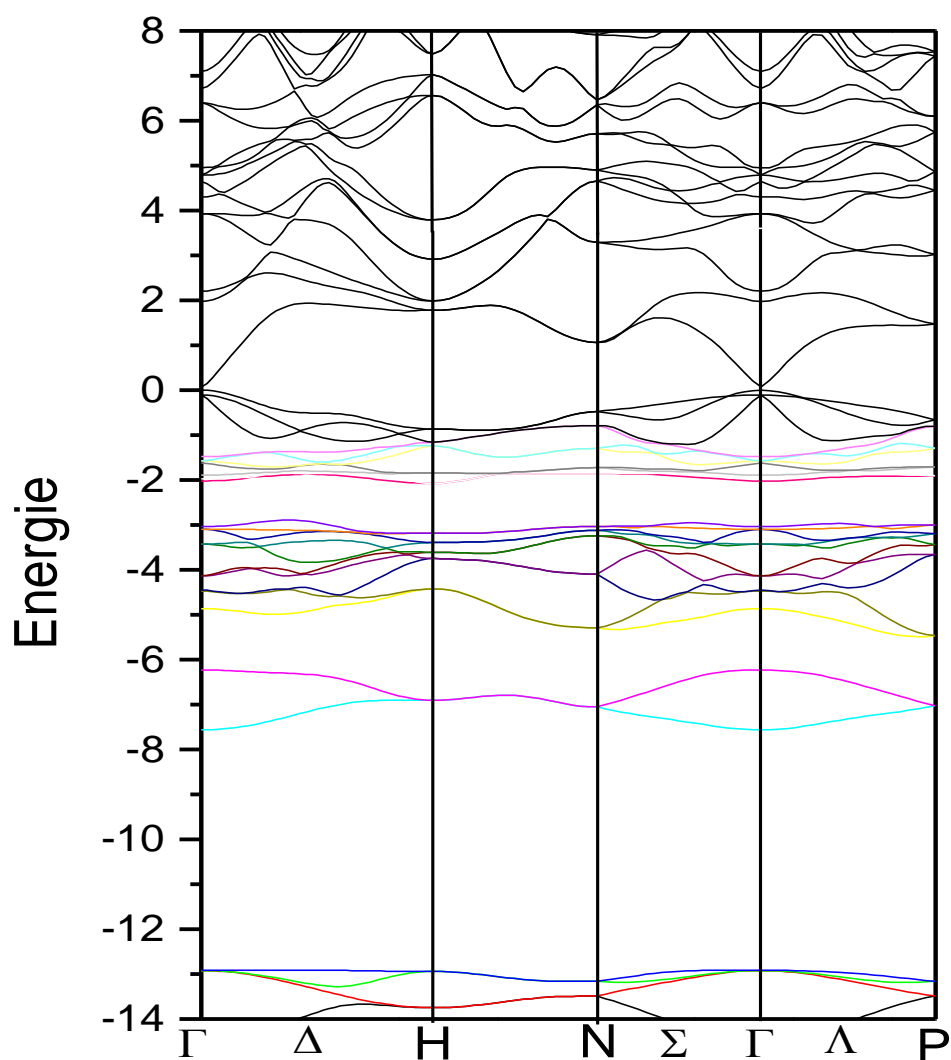


Figure III.1/b: la structure des bandes d'énergie de CuGaSe_2 en utilisant la GGA

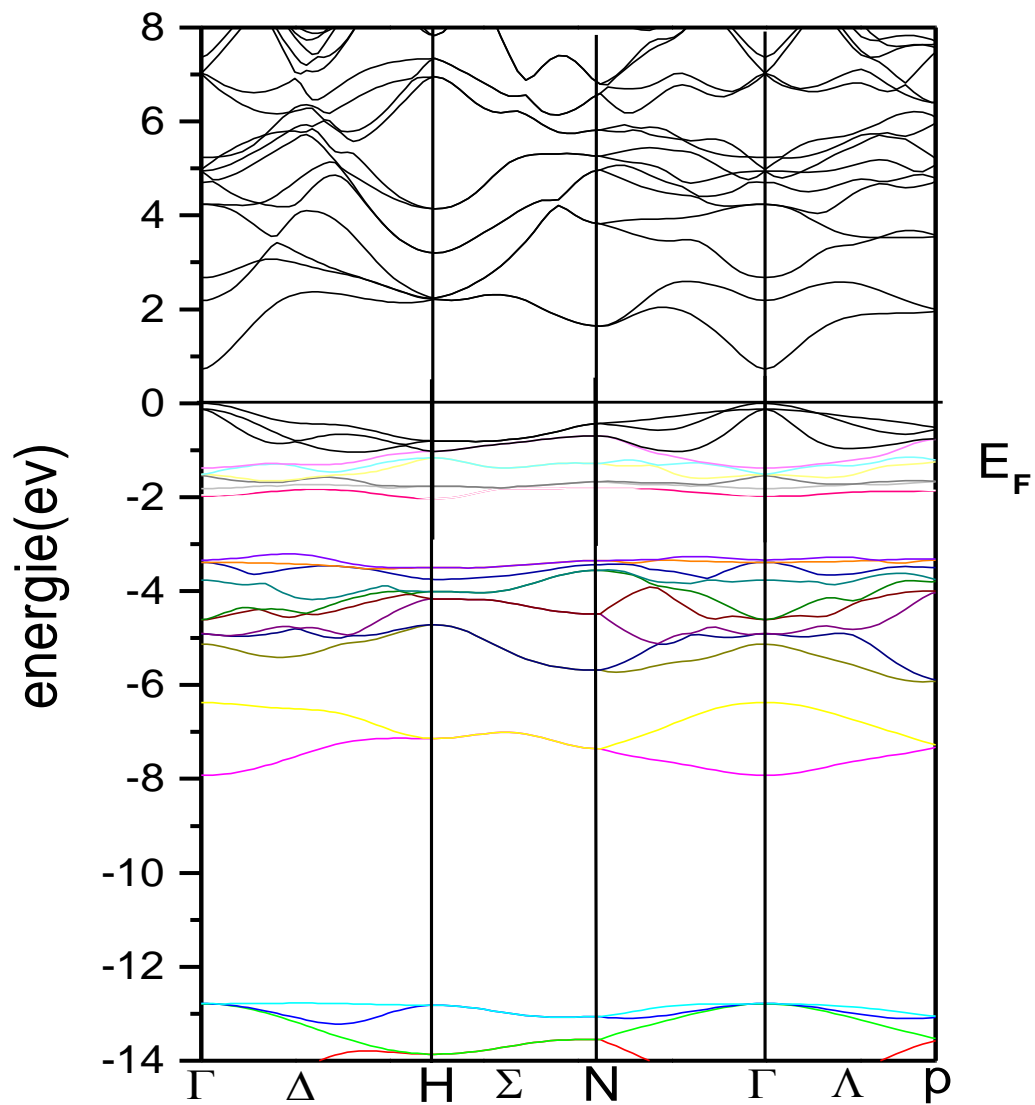


Figure III.2/b: la structure des bandes d'énergie de CuGaS₂ en utilisant la GGA

On définit le gap d'énergie comme la différence entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction. Pour les deux composés CuGaSe_2 , et CuGaS_2 , le maximum de la bande de valence (VBM : valence band maximum) et le minimum de la bande de conduction (CBM : conduction band minimum) se trouvent au point de symétrie Γ . Par conséquent, CuGaX_2 ($X=\text{S}, \text{Se}$) possèdent un gap direct.

On remarque que le gap d'énergie de CuGaS_2 est plus grand que celui de CuGaSe_2 , ce qui signifie que l'interaction entre Ga et S est plus covalente que celle entre Ga et Se.

Tableau des résultats :

composé	Γ - Γ
CuGaSe_2	
Notre calcul	0.0677 (ev)
Autres calcul	0.0291 (ev)
Exp.	1.68 ^g (ev)
CuGaS_2	
Notre calcul	0.7289 (ev)
Autres calcul	0.6932 (ev)
Exp.	2.43 ^g (ev)

Tableau III.1/b: les valeurs du gap pour les composés CuGaX_2 ($X=\text{S}, \text{Se}$)

^gRéférence [1]

Nos résultats obtenus en utilisant la GGA concernant le gap sont meilleurs que les autres calculs. Mais ces valeurs sont sous-estimées par rapport aux données expérimentales. Ceci est normal puisque la GGA sous-estime le gap d'énergie [2, 3].

Il est bien connu que la LDA et la GGA sous-estiment les gaps d'énergie. Ceci est principalement dû au fait qu'elles ont des formes simples qui ne sont pas suffisamment flexibles pour obtenir la forme exacte du potentiel d'échange et de corrélation.

2. Densité d'états électroniques de CuGaX_2 ($\text{X}=\text{S}, \text{Se}$) :

Pour déterminer la nature de la structure électronique de bandes, nous avons calculé les densités d'états totales (DOS) et partielles (PDOS) de CuGaSe_2 et CuGaS_2 .

Pour le composé CuGaS_2 :

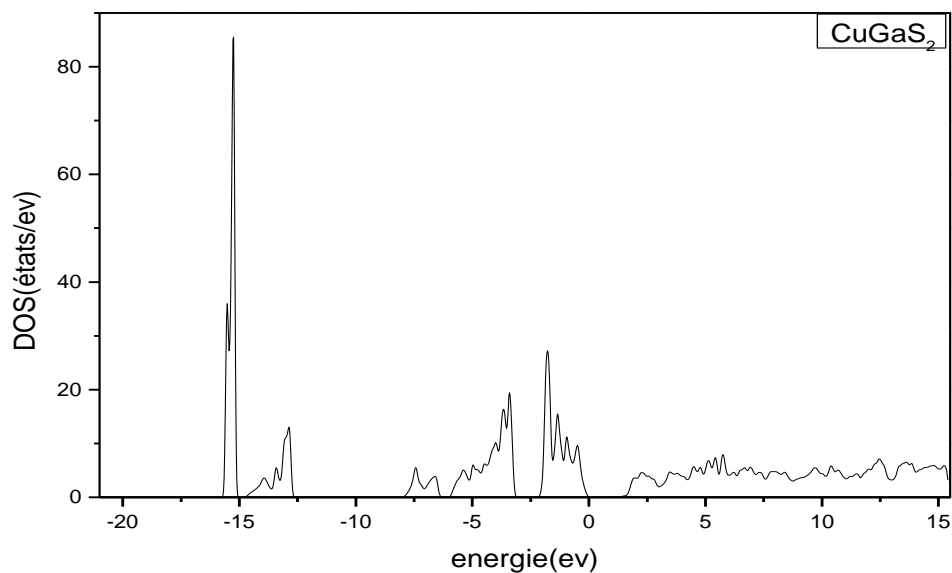


Figure III.3/b: la densité d'états totale de CuGaS_2 .

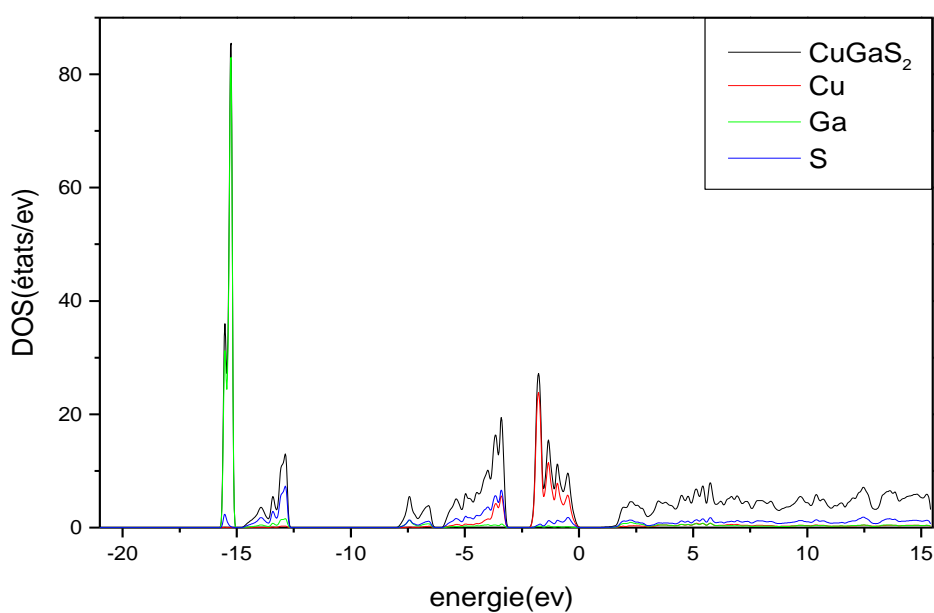


Figure III.4/b: la densité d'états totale et partielle de CuGaS_2 .

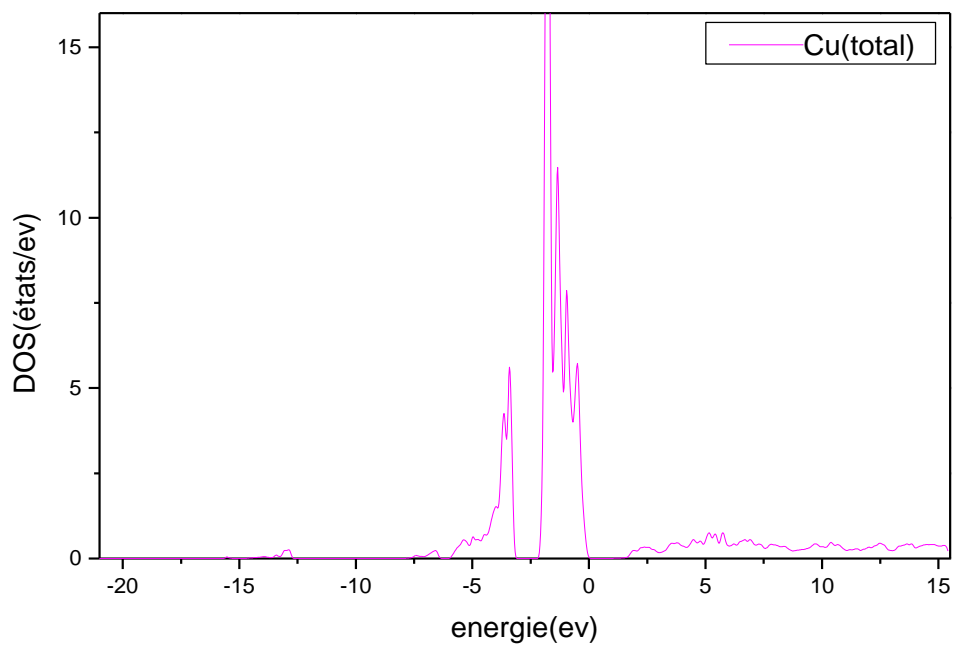


Figure III.5/b: la densité d'états totale de Cu.

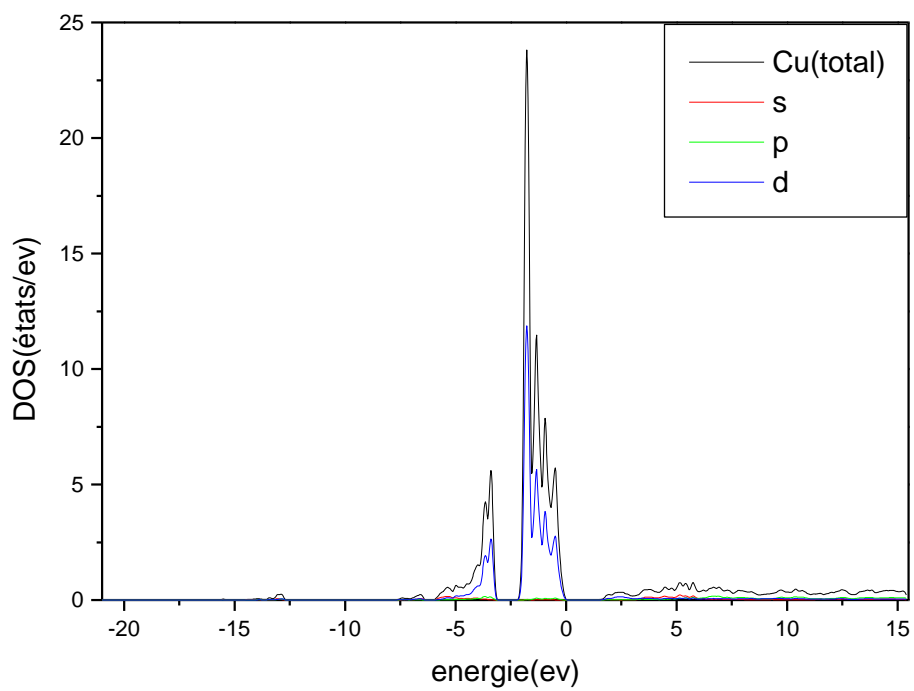


Figure III.6/b: la densité d'états totale et partielle de Cu.

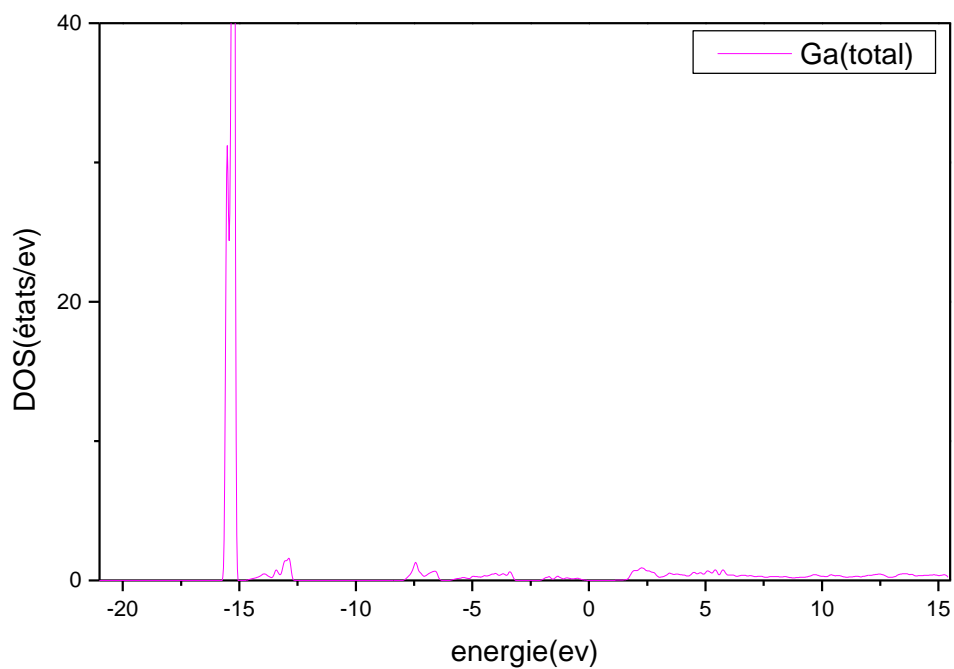


Figure III.7/b: la densité d'états totale de Ga.

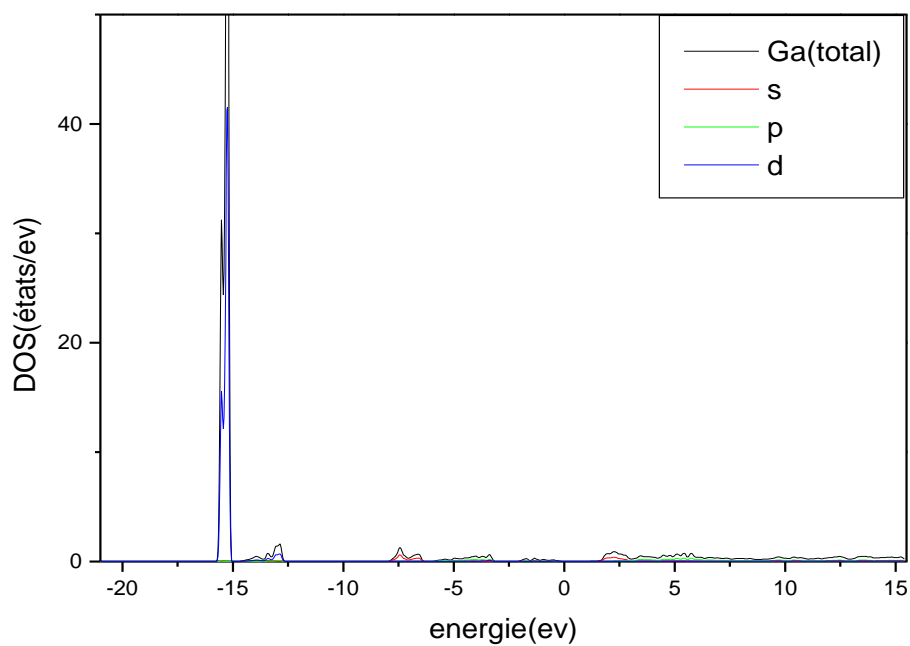


Figure III.8/b: la densité d'états totale et partielle de Ga.

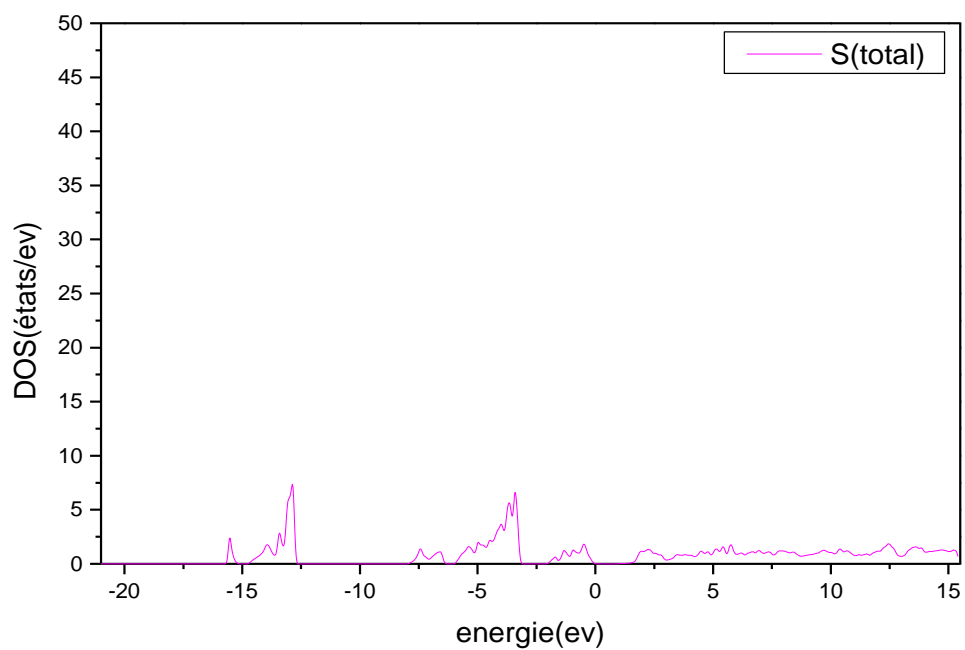


Figure III.9/b: la densité d'états totale de S.

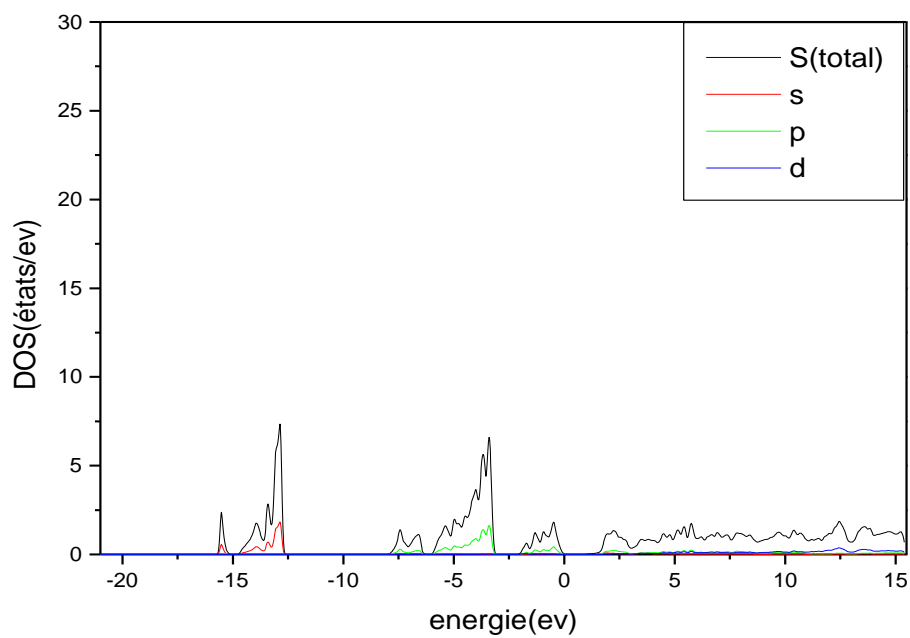


Figure III.10/b: la densité d'états totale et partielle de S.

Pour le composé CuGaSe_2 :

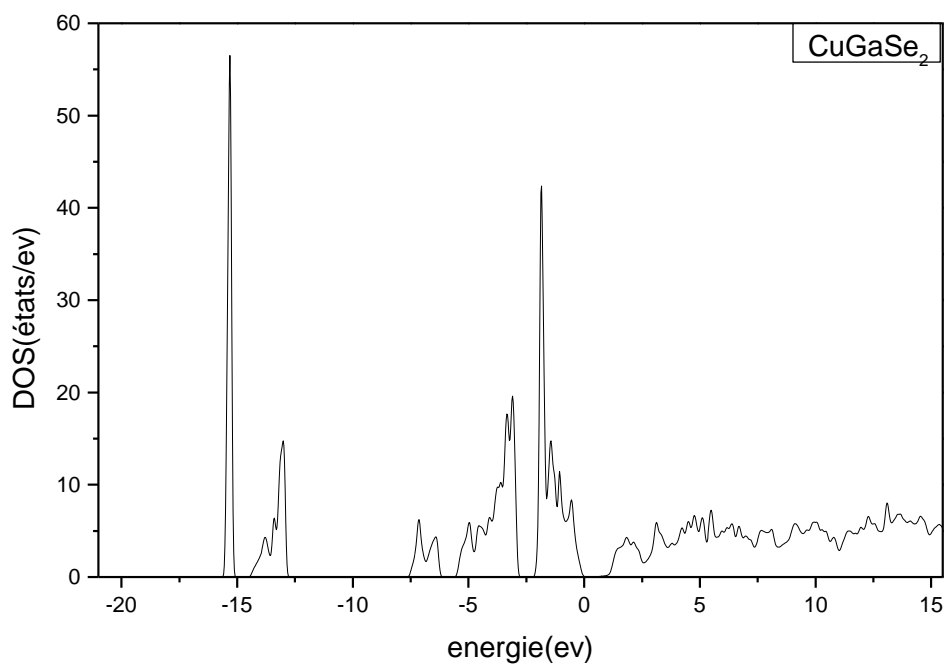


Figure III.11/b: densité d'états totale de CuGaSe_2 .

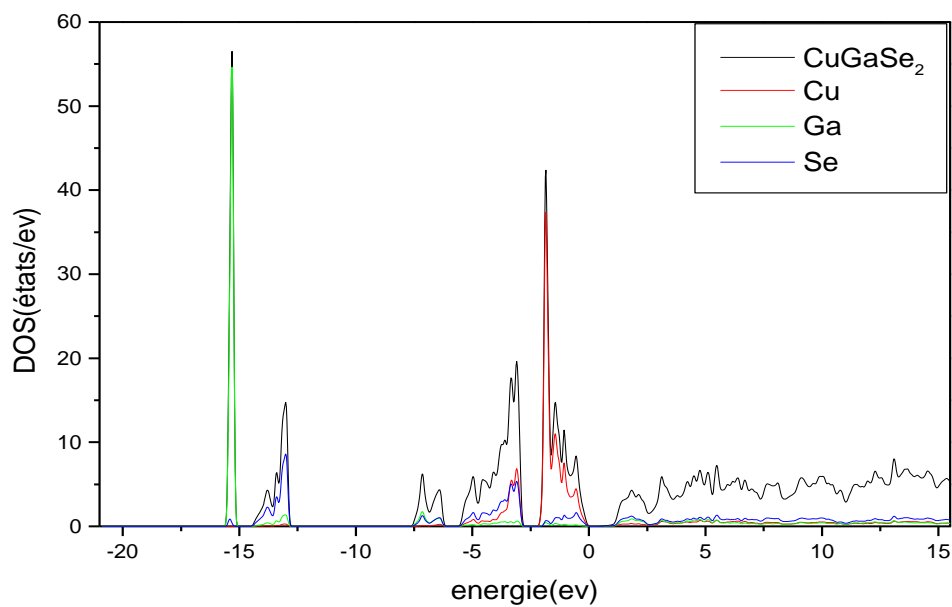


Figure III.12/b: la densité d'états totale et partielle de CuGaSe_2 .

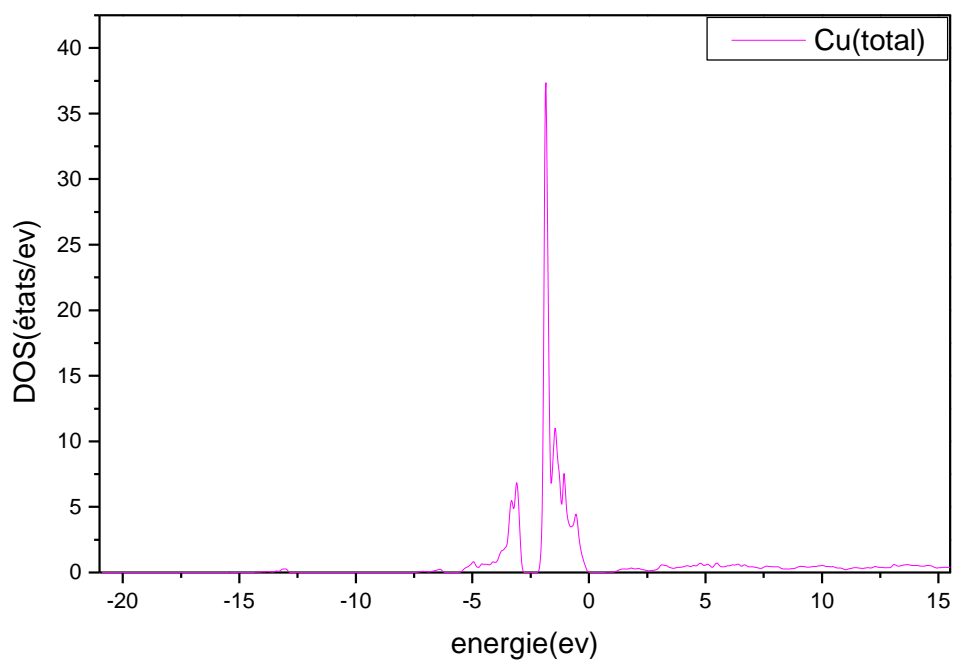


Figure III.13/b: la densité d'états totale de Cu.

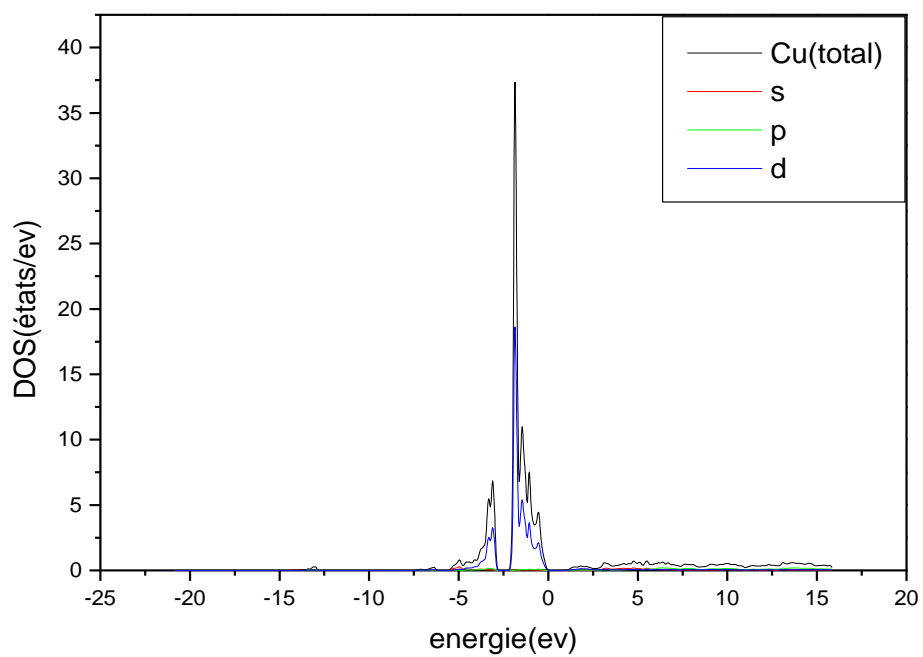


Figure III.14/b: la densité d'états totale et partielle de Cu.

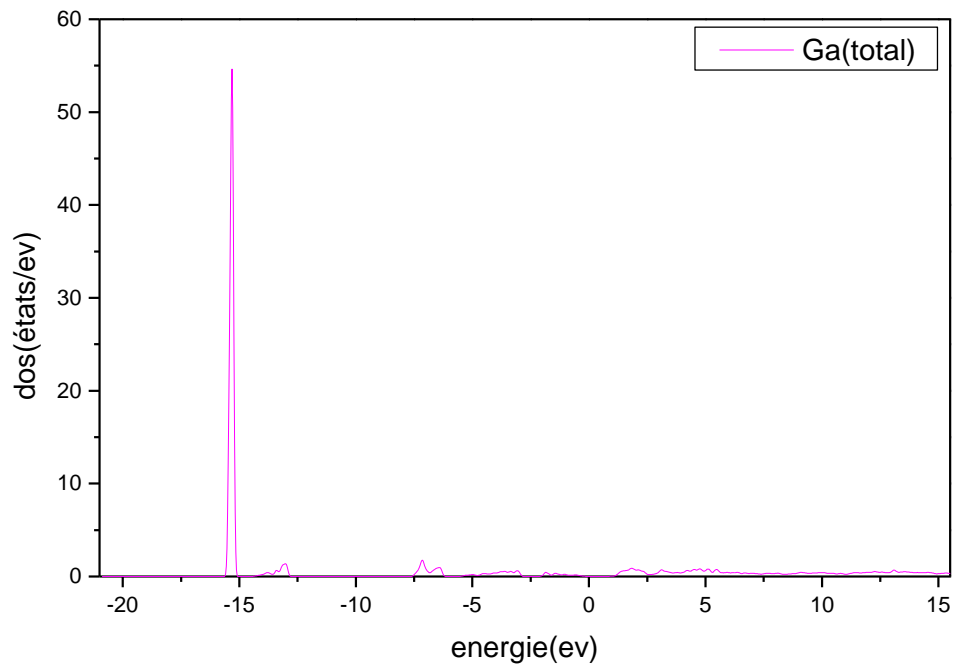


Figure III.15/b: la densité d'états totale de Ga.

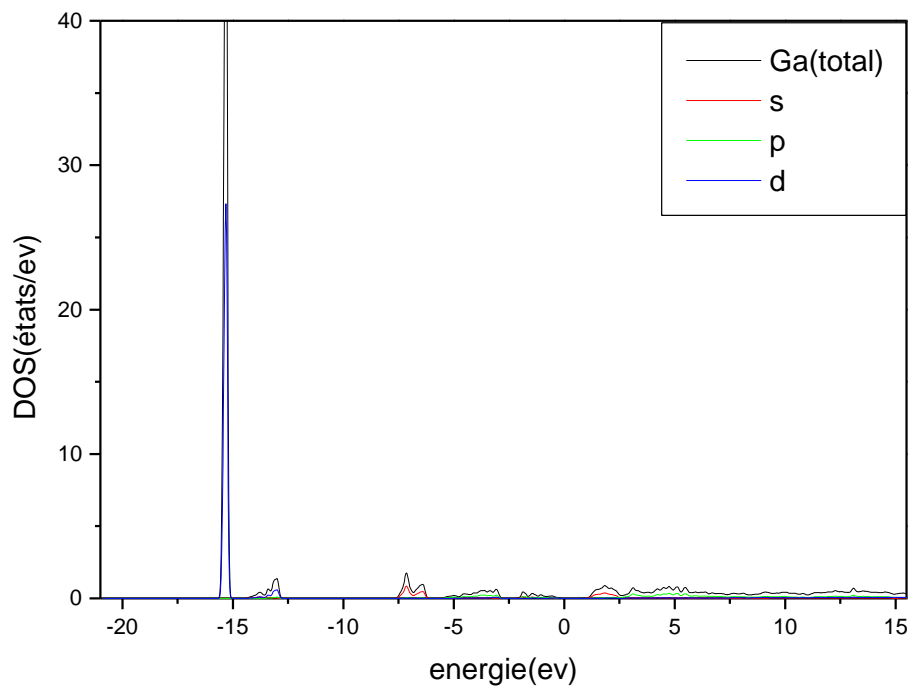


Figure III.16/b: la densité d'états totale et partielle de Ga.

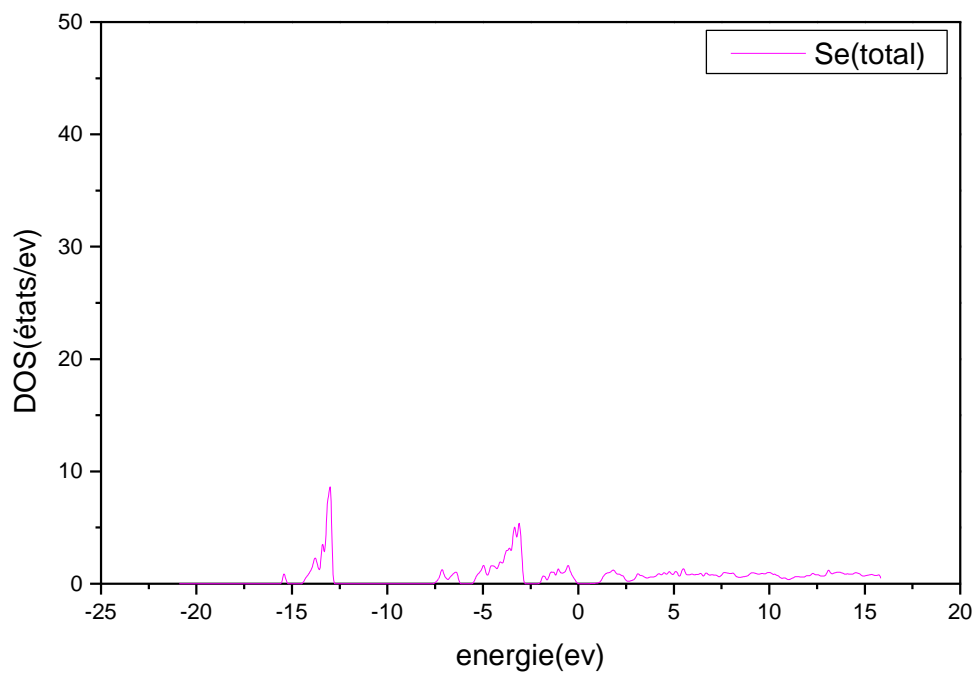


Figure III.17/b: la densité d'états totale de Se.

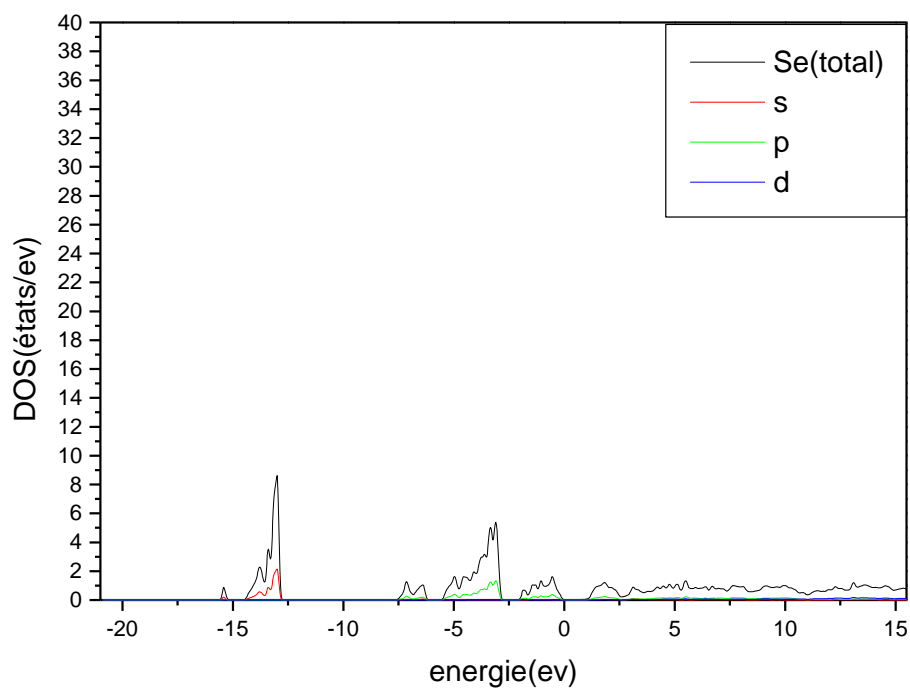


Figure III.18/b: la densité d'états totale partielle de Se.

D'après les figures (III.6/b) et (III.14/b) les états dominants dans l'atome Cu des deux composés CuGaSe_2 et CuGaS_2 sont les états « d », avec une faible contribution des états « s » puis « p ».

En analysant les figures (III. 8/b) et (III.16/b) les états dominants dans l'atome Ga des deux composés CuGaSe_2 et CuGaS_2 sont les états « d », avec une faible contribution des états « s » puis « p ».

D'après les figures (III.10/b) et (III.18/b) les états dominants dans l'atome S du composé CuGaS_2 et l'atome Se du composé CuGaSe_2 sont les états « s » puis « p », avec une faible contribution des états « d ».

Les figures (III.4/b) et (III.12/b) montrent que la reproduction des densités d'états totale de CuGaS_2 et CuGaSe_2 est basée sur la densité d'états de l'atome Ga, avec une faible contribution de l'atome Cu et très faible des atomes S et Se respectivement.

Bibliographie:

[1] Semiconductors: Data Handbook, 3rd ed., edited by O. Madelung Springer, Berlin, 2004.

[2] P. Dufek, P. Blaha, K. Schwarz, Phys. Rev. B50, 7279 (1994).

[3] G. B. Bachelet, N. E. Christensen, Phys. Rev. B31, 879 (1985).