

Chapitre III

Résultats et discussion

Les matériaux chalcopyrites :

Les composés ternaires I-III-VI₂ sont isoélectroniques avec les semi-conducteurs II-VI. par exemple, CuGaX₂ (X=S, Se) sont des ternaires analogues des composés binaires ZnX. Ceci est réalisé en occupant les positions de Zn alternativement par le Cu et le Ga. Chaque atome X a deux liaisons à Cu et deux à Ga. Ces composés se cristallisent dans la structure tétragonale de chalcopyrites, qui pourrait être considérée comme super réseau de Zinc Blende le long de l'axe z [III-b]. Le rapport c/a (a, c paramètres de réseau) est égal à deux dans la structure idéale, tandis qu'il est approximativement égal à deux et c'est le cas réel.

Les composés chalcopyrites ternaires CuGaS₂ et CuGaSe₂ sont représentés dans les figures (III-a) et (III-b).

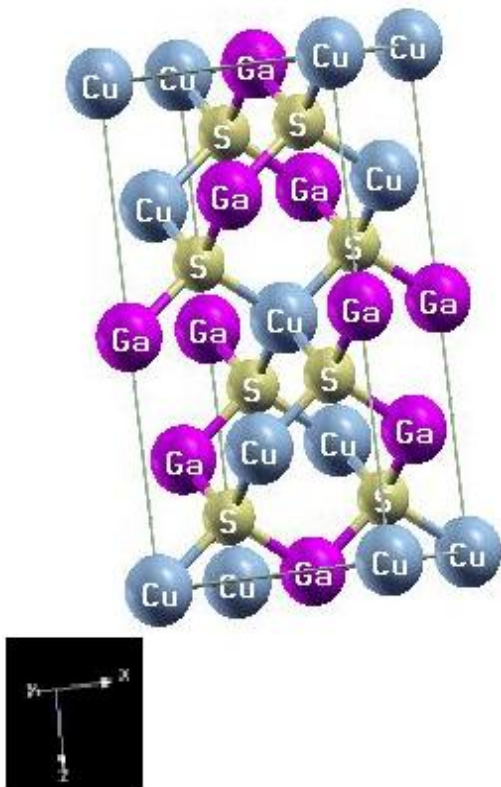


Figure III-a : le composé CuGaS₂

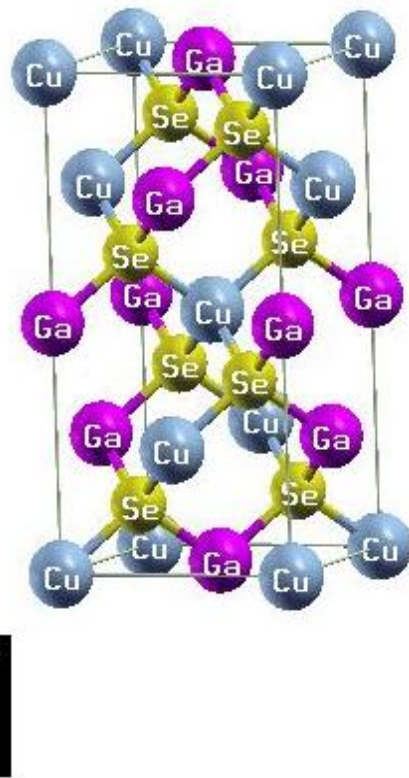


Figure III-b : le composé CuGaSe₂

Détails de calcul :

Les calculs de ce travail ont été réalisés en utilisant le code Wien2k, qui est une implémentation de la méthode FP(L) APW dans le cadre de la DFT [1]. L'interaction spin-orbite est négligée. Le potentiel d'échange et de corrélation est traité dans le cadre de l'approximation du gradient généralisé (GGA : Generalized Gradient Approximation) paramétrisée par Perdew, Burke et Ernzerhof [2].

Dans la méthode (FP-(L) APW), la cellule unitaire est divisée en deux régions : (i) les sphères qui ne se chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome (Muffin-tin sphères) de rayon R_{MT} , (ii) la région interstitielle (la région qui reste).

Les fonctions d'onde, les densités électroniques et le potentiel sont développées en combinaison harmoniques sphériques autour des sites atomiques c'est-à-dire dans les sphères Muffin-tin avec un cutoff (rayon de coupure) $l_{max}=10$, et en série de Fourier dans la région interstitielle avec un cutoff (rayon de coupure) $R_{MT}^{min} \cdot K_{MAX}=7$.

La première étape dans ce genre de calcul consiste à préciser les valeurs des paramètres importants, qui influent sur le temps et la précision du calcul.

- les rayons de Muffin tin (R_{MT}), donnés en unités atomiques (u.a). Dans notre calcul les valeurs de R_{MT} que nous avons utilisé pour Cu, Ga, S et Se représentent un bon choix. Ce choix est basé sur deux critères :
 - assurer l'intégration de la majorité des électrons de cœur dans la sphère Muffin tin.
 - éviter le chevauchement des sphères Muffin tin
- le paramètre de coupure $R_{K_{MAX}}=R_{MT}^{min} * K_{MAX}$

Avec : R_{MT}^{min} : est le plus petit rayon de la sphère MT

K_{MAX} : est la norme du plus grand vecteur d'onde le nombre de points K considéré dans la zone irréductible (réduite) de Brillouin.

- G_{max} est la norme du plus grand vecteur d'onde
- le nombre de points k considéré dans la zone irréductible de Brillouin, dans nos matériaux =158

$\alpha = \beta = \gamma = 90$	R_{MT}	positions	G_{MAX}	L_{MAX}	$R_{MT}^{min} * K_{MAX}$
			(CuGaSe ₂)		
Cu	2.2	(0, 0,0) (0,0.5, 0.25)	12	10	7
Ga	2.1	(0.5, 0,0.25) (0.5, 0.5, 0)			
Se	2.0	(0.25, 0.25, 0.125) (0.25, 0.75, 0.875) (0.75, 0.75, 0.125) (0.75, 0.25, 0.875)			

Tableau III.1: les données d'entrée pour le composé CuGaSe₂

$\alpha = \beta = \gamma = 90$	R_{MT}	positions	G_{MAX}	L_{MAX}	$R_{MT}^{min} * K_{MAX}$
			(CuGaS ₂)		
Cu	2.1	(0, 0,0) (0,0.5, 0.25)	12	10	7
Ga	2.0	(0.5, 0,0.25) (0.5, 0.5, 0)			
S	1.9	(0.25, 0.25, 0.125) (0.25, 0.75, 0.875) (0.75, 0.75, 0.125) (0.75, 0.25, 0.875)			

Tableau III.2: les données d'entrée pour le composé CuGaS₂

Bibliographie :

[III-a] : Mémoire de DES : Benzaghoul H et Mostefa Kara S, "Matériaux chalcopyrites élaboration, application photovoltaïque et classification" université de Tlemcen 2009.

[III-b] S-H. Wei, S. Chen and X.G. Gong, Phys. Rev B 75, 205209 (2007).