

Mme BOUKABRINE FOUZIA: e-mail: bk_fouzia@yahoo.fr

ABSTRACT

In this work, we have investigated the structural, electronic and optical properties of the ternary - II-IV-V₂ (ZnSiAs₂ and CdSiAs₂) chalcopyrites semiconductors they have been calculated consistently using the full potential augmented planewave plus local orbital method (FPAPW+lo) by means of a first-principles density-functional Total-energy calculation with the local-density approximation (LDA). We clarify the electronic and optical properties for both compounds.

The equilibrium lattice constants and the bulk moduli (a , c , c/a , u and B_0) are compared with other theoretical calculations.

Since, we prove the existence of the direct band gap and also the efficiency of the method to give more details about theoretical properties. We found that the most important features of the band gap is pseudo-direct for ZnSiAs₂, and direct for CdSiAs₂; then the contribution of the different transitions peaks are analyzed from the imaginary part of the dielectric function and there reflectivity spectra.

Résumé

Nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et optiques des semi-conducteurs ternaires de la famille des chalcopyrites (ZnSiAs₂ et CdSiAs₂) en utilisant la méthode FP-LAPW avec l'approximation LDA par l'amélioration du code Wien2K utilisant la méthode (FAPW+l₀).

Pour les propriétés structurales, et dans le but de déterminer les propriétés de l'équilibre statique, tels que les paramètres du réseau (a , c), le module de compressibilité B et sa dérivée B' , on a déterminé le paramètre de la distorsion tétragonale $\eta=c/2a$, et le paramètre du déplacement de l'anion u . dans les valeurs de u , c/a et V pour ce type de matériaux en traitant l'approximation de la LDA par rapport aux valeurs expérimentales.

Pour les propriétés électroniques, obtenues par nos calculs on a prouvé que la structure de bande des deux composés ZnSiAs₂ et CdSiAs₂ est essentiellement intéressante car elle montre un gap d'énergie directe ($\Gamma_{4v} \rightarrow \Gamma_{3c}$) pour le CdSiAs₂. Le direct gap d'énergie ($\Gamma_{15v} \rightarrow X_{1c}$), a été désigné comme étant pseudo-directe pour le ZnSiAs₂, et ce dernier signifie que le gap est normalement directe mais correspond à une faible, presque interdite transition optique.

Enfin, pour ce qui est des propriétés optiques, notre travail est presque inédit car on n'a pas d'autres données expérimentales pour comparer nos résultats.

La réflectivité de l'incidence normale peut aussi nous donner une bonne information concernant les différentes transitions inter-bandes, qui peuvent exister dans un semi-conducteur chalcopyrite ternaire, nos spectres calculés nous ont conduit à conclure, qu'il existe deux types de transitions, le premier type sont des transitions pseudo-directes, et elles ne correspondent pas à des transitions directes.

Le deuxième type de transitions sont directes, et expérimentalement, il a été démontré que ces transitions sont fortes car elles se trouvaient suivant les deux directions de polarisations parallèle et perpendiculaire à l'axe c .