

## *Chapitre II*

# *Les propriétés structurales de BN, BP, BAs et BSb. Effet de la pression*

## Introduction

Les composés à base de bore appartiennent à la famille des semiconducteurs III-V. Ce sont des composés à grand gap, particulièrement intéressants pour leurs applications dans le domaine des températures élevées, et pour la réalisation de composants en opto-électronique.

La petite taille du cœur de l'atome de bore B et l'absence des électrons p expliquent leurs propriétés. Le bore a un pseudopotentiel profond et localisé comparé aux autres atomes de la même colonne du tableau périodique. Les calculs préalables de l'ionicité [1-4], illustrent ces particularités.

Le nitrure de bore BN cristallise sous trois phases : Hexagonale (h-BN), semblable à celle du graphite [38], zinc blende (c-BN) synthétisée en 1957 [48] analogue à celle du diamant [49], et wurtzite (w-BN) qui correspond à la phase lonsdaleite [50].

Les composés BP, BAs et BSb cristallisent, quant à eux, dans la structure zinc blende.

Malgré l'existence de nombreux travaux théoriques de premier principe [5-26] consacrés aux propriétés structurales et électroniques des BN, BP et BAs dans leur phase cubique, il existe très peu de données expérimentales relatives à ces composés [27-32]. Les propriétés fondamentales (pas du réseau à l'équilibre et module de rigidité) ainsi que les propriétés électroniques de BN, BP et de BAs ont été étudiées par Wentzcovitch et al [23] [24] lesquels ont également discuté les propriétés de ces matériaux aux hautes pressions [25]. L'ensemble de ces études est basé sur la LDA associée à la DFT. Afin de fournir des estimations des énergies de cohésion de ces composés, Surh et al. [17] ont utilisé l'approximation GW en vue de prendre en compte les effets d'échange et de corrélation des quasi-particules et récemment, Rubio [33] a effectué un calcul de la phase cubique de BN et de GaN. En ce qui concerne BSb, les données expérimentales font défaut, par contre, on note les travaux de Ferhat et al. [34] et ainsi que de Zaoui et al. [35].

Dans ce contexte, notre étude a pour but de calculer par la méthode FP-LAPW les propriétés structurales (pas de réseau, module de rigidité et sa dérivée) à l'équilibre des composés BN, BP, BAs et BSb, ainsi que de déterminer la pression de transition structurale de chaque composé.

Nous présentons dans ce qui suit une application de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) inclus dans le programme WIEN97 [54] afin d'étudier BN, BP, BAs et BSb dans les phases zinc blende, NaCl (rocksalt) et  $\beta$ -Sn. L'ensemble de ces études est basé sur la GGA [51] associée à la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [52] [53].

La première étape de ce travail consiste à déterminer l'énergie de cutoff  $E_C$  pour assurer la convergence de l'énergie totale  $E_T$  et les paramètres constitutifs de la méthode.

La seconde est d'obtenir les données structurales par ajustement de l'énergie totale à l'aide de l'équation d'état de Murnagan [36].

$$E_T(V) = \frac{B_0 V}{B'_0} \left[ \frac{(V_0 / V)^{B'_0}}{B'_0 - 1} + 1 \right] + E_0 - \frac{V_0 B_0}{B'_0 - 1} \quad (\text{II.1})$$

où le module de rigidité  $B_0$  est donné par :

$$B_0 = V \frac{d^2 E_T}{dV^2} \quad (\text{II.2})$$

## II.1. Nitrure de bore BN [56]

Nous avons utilisé une énergie de cutoff  $E_c = 64$  Ryd (Figure II.1). Cette grande valeur de  $E_c$  résulte du caractère fortement attractif du potentiel de l'orbitale p de l'atome d'azote N. L'énergie structurale totale a été calculée d'une façon auto-cohérente avec 30 points k dans la zone réduite de Brillouin pour la phase zinc blende, 47 points pour la phase NaCl (rocksalt) et 58 points pour la phase  $\beta$ -Sn. La distance entre deux atomes proches voisins (NN-Dist), le rayon de la sphère MT (RMT) et le nombre des ondes planes utilisées (PW) sont donnés dans le tableau (II.1).

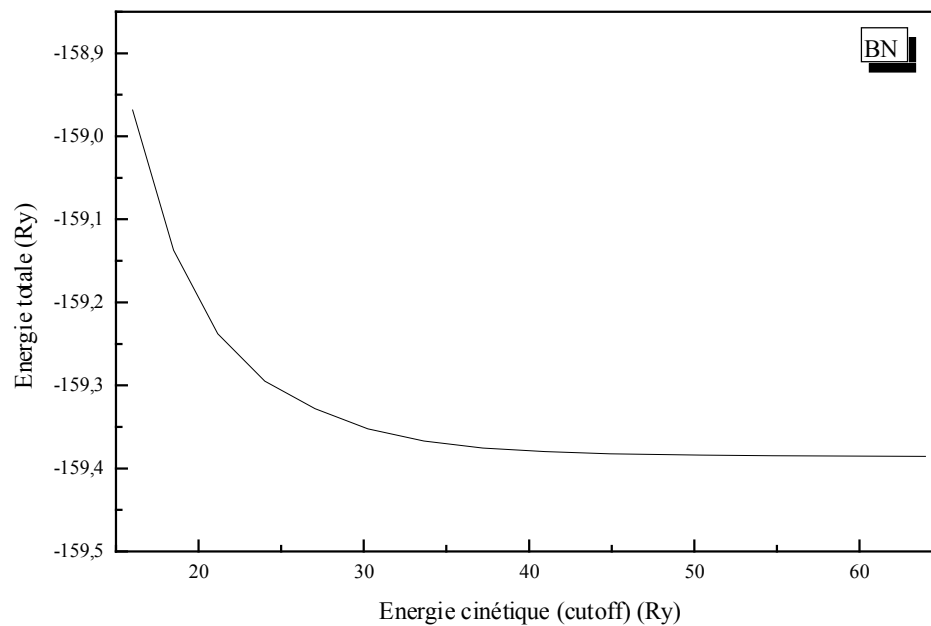


Figure ( II.1) : Convergence de l'énergie totale de BN (Zinc blende) en fonction de l'énergie du cutoff.

		Zinc blende	NaCl	$\beta$ -Sn
NN-Dist (u.a.)		2.96543	3.30985	2.97149
PW		511	398	645
RMT (u.a.)	B	1.4	1.5	1.4
	N	1.5	1.5	1.5
Cutoff (Ry)	Nos calculs	64	64	64
	Autres calculs	60 [23][25][41] 13.4 [47] 160 [26]	60 [25]	60 [25]
Nombre de points k	Nos calculs	30	47	58
	Autres calculs	10 [25][26][41]	60 [25]	100[25]

Tableau (II.1) : Paramètres constitutifs de BN utilisés dans nos calculs effectués par la méthode FP-LAPW. (1 u.a.=0.529177 Å et 1 Ry =13.605814 eV)

La figure ( II.2) montre la variation de l'énergie totale de BN (zinc blende) avec le volume. Nous avons calculé le pas du réseau  $a_0$  à l'équilibre, soit 3.623 Å. Cette valeur est en accord, à 0.2% près, avec le résultat expérimental  $a=3.615$  Å [32, 37, 38]. Nous avons également calculé le module de rigidité  $B_0$  (3.68 Mbar) ainsi que sa dérivée  $B_0'$  (3.32) en ajustant l'équation (II.1). Nos résultats sont comparés avec d'autres calculs théoriques dans le tableau (II.2). Les travaux de Wentscovitch [23] indique une valeur de 3.67 Mbar pour le module de rigidité. Le travail expérimental de Knittle et al. [32] donne une valeur de 3.69 Mbar pour  $B_0$  en choisissant une valeur de  $B_0'$  égale à 4. Nos valeurs (tableau II.2) sont en meilleur accord avec l'expérience. On remarque que BN possède un petit pas de réseau et un grand module de rigidité.

	Pas du réseau $a_0$ (Å)	Module de rigidité $B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	3.623	3.68	3.32
Expériences	3.615[32] [37][38]	3.69[32]	4[32]
Autres calculs	3.575[26]	3.86[26]	3.6[39]
	3.576[39]	3.97[39]	2.91[40]
	3.649[40]	3.66[40]	3.94[22]
	3.606[23][25]	3.67[23][25]	3.97[41]
	3.623[22]	3.65[22] 3.59[41] 3.87[47]	

Tableau ( II.2) : Propriétés statiques de BN en phase zinc blende : Paramètre du réseau  $a_0$ , module de rigidité  $B_0$  et sa dérivée  $B_0'$ .

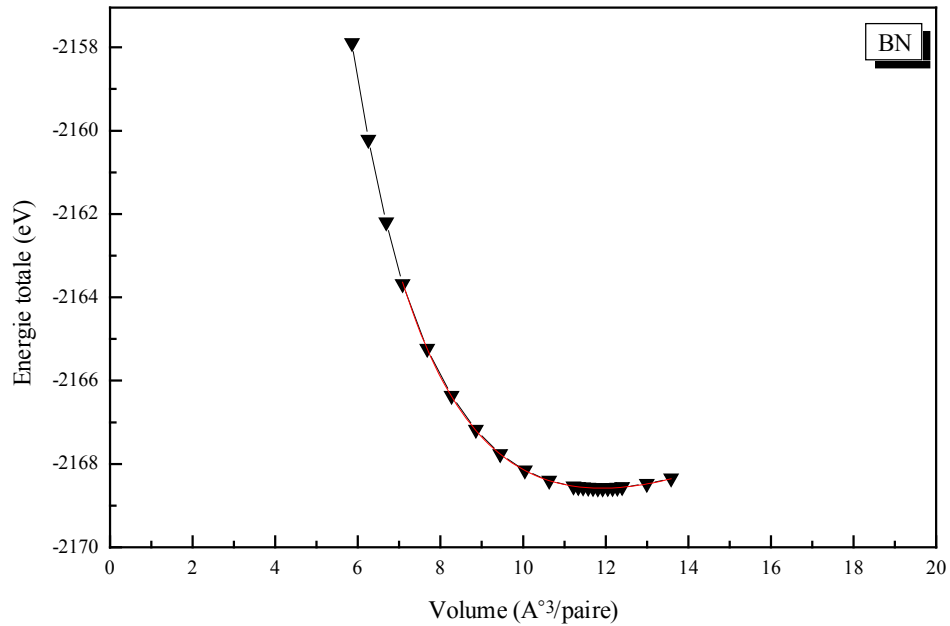


Figure (II.2) : Variation de l'énergie totale de BN (Zinc blende) en fonction du volume.

Les résultats pour la phase NaCl (Figure II.3) de BN sont rassemblés dans le tableau (II.3). Le pas du réseau à l'équilibre est de 3.503 Å avec une différence de 0.3% par rapport à l'expérience. Le module de rigidité est de 3.99 Mbar et sa dérivée de 2.53. On note le bon accord entre les valeurs calculées par différents auteurs.

	Pas du réseau $a_0$ (Å)	Module de rigidité $B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	3.503	3.99	2.53
Expériences	3.493[32]	4.25[32]	
Autres calculs	3.493[25]	4.25[25]	4.59[22]
	3.580[22]	4.80[22]	3.7[42]
	3.500[42]	4.06[42]	

Tableau ( II.3) : Propriétés statiques de BN (Structure NaCl).

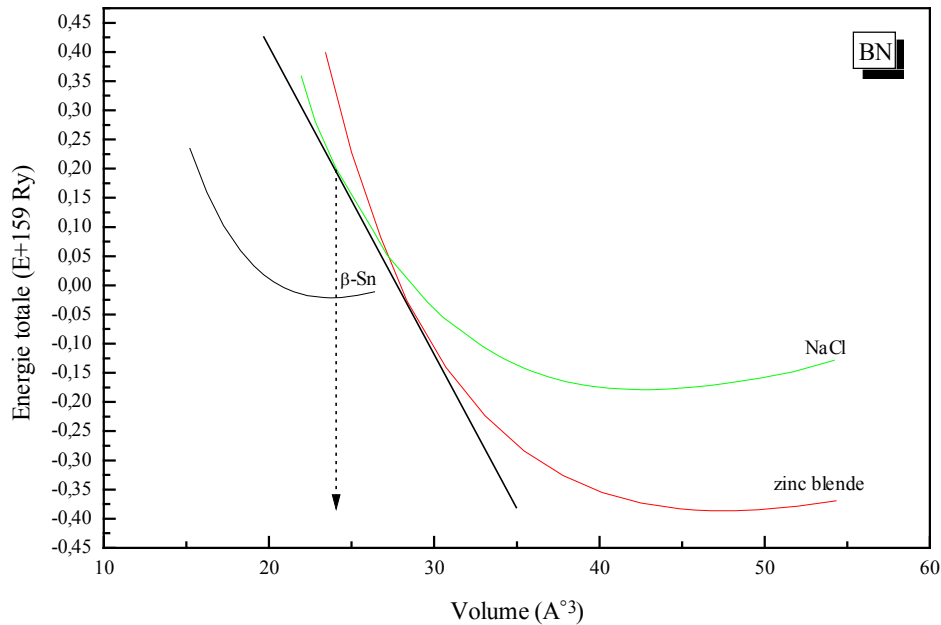


Figure (II.3) : Variation de l'énergie totale de BN en fonction du pas du réseau.

Le Tableau (II.4) contient nos résultats relatifs à la phase  $\beta$ -Sn de BN. A notre connaissance, il n'existe pas de donnée expérimentale ou de calcul théorique pour la phase  $\beta$ -Sn à part les nôtres.

	$a_0$ (Å)	$c$ (Å)	$B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	2.468	3.90	7.64	3.14

Tableau ( II. 4) : Propriétés statiques de BN en phase  $\beta$ -Sn.

Les composés à structure zinc blende se transforment sous l'effet de la pression hydrostatique, soit dans la structure  $\beta$ -Sn, soit dans la structure NaCl (rocksalt). En général, les composés ayant une faible ionicité se transforment dans la structure  $\beta$ -Sn, et ceux ayant une grande ionicité dans la structure NaCl.

La valeur de la pression de transition structurale peut être prédite de deux manières différentes, soit en utilisant un calcul classique de l'énergie totale, soit en utilisant l'approche de Zaoui [35] basée sur le comportement de l'ionicité sous l'effet de la pression hydrostatique.

La figure (II.3) montre la valeur de la pression critique lors du passage de la phase zinc blende à la phase NaCl (rocksalt). Cette valeur est de 9.45 Mbar (Tableau II.5), ce qui équivaut à un volume de  $24.117 \text{ \AA}^3$  d'après l'équation de Murnaghan [36]. La pression correspondante est alors donné par l'équation :

$$P = \frac{B_0}{B'_0} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right] \quad (\text{II.3})$$

où  $V_0$  est le volume à l'équilibre, et  $P$  la pression pour un volume  $V$ .

La valeur de la pression de transition structurale est déterminée à partir de la tangente commune aux courbes ajustées. A partir d'une certaine valeur de la pression, un nouvel arrangement atomique devient impératif et une nouvelle structure est plus appropriée que la structure zinc blende.

	$P_t$ (Mbar)	$V_t$ ( $\text{\AA}^3$ )	$V_t/V_0$
Nos calculs	9.45	24.117	0.50
Autres calculs	11.1[25]	19.693[25]	0.45[25]
	10.25[47]		0.47[47]

Tableau (II.5) : Pression de transition structurale,  $P_t$  et volume  $V_t$ ,  
 $V_0$  est le volume à l'équilibre de BN dans la phase zinc blende.

Les valeurs ainsi trouvées donnent l'ordre de grandeur de la valeur de la pression de transition de phase structurale pour le BN et confirment ainsi que la nouvelle phase sous pression ne peut être que NaCl.

## II.2. Phosphure de bore BP [56]

Nous avons choisi une énergie de cutoff  $E_c = 20$  Ry pour assurer la convergence de l'énergie totale (Figure : II.4). Le calcul a été effectué d'une façon auto-cohérente avec 30 points  $k$  dans la zone réduite de Brillouin en phase zinc blende, 47 points en phase NaCl et 58 points en phase  $\beta$ -Sn. Les paramètres utilisés sont donnés dans le tableau (II.6).

Les pas des réseaux à l'équilibre (figure II.5) calculés dans les différentes structures de BP ont respectivement pour valeurs :

$$\begin{aligned} a \text{ (Zinc blende)} &= 4.546 \text{ \AA} \\ a \text{ (NaCl)} &= 4.320 \text{ \AA} \\ a \text{ (\beta-Sn)} &= 3.007 \text{ \AA} \\ c \text{ (\beta-Sn)} &= 4.751 \text{ \AA} \end{aligned}$$

		Zinc blende	NaCl	$\beta$ -Sn
NN-Dist (u.a.)		3.71989	4.08087	3.77123
PW		602	516	623
RMT (u.a.)	B	1.5	1.5	1.5
	P	1.8	1.8	1.8
Cutoff (Ry)	Nos calculs	20	20	20
	Autres calculs	20 [23][25] 80 [26]	20 [25]	20 [25]
Nombre de points k	Nos calculs	30	47	58
	Autres calculs	10 [25]	60 [25]	100[25]

Tableau (II.6) : Paramètres constitutifs de BP utilisés dans nos calculs par la méthode FP-LAPW.

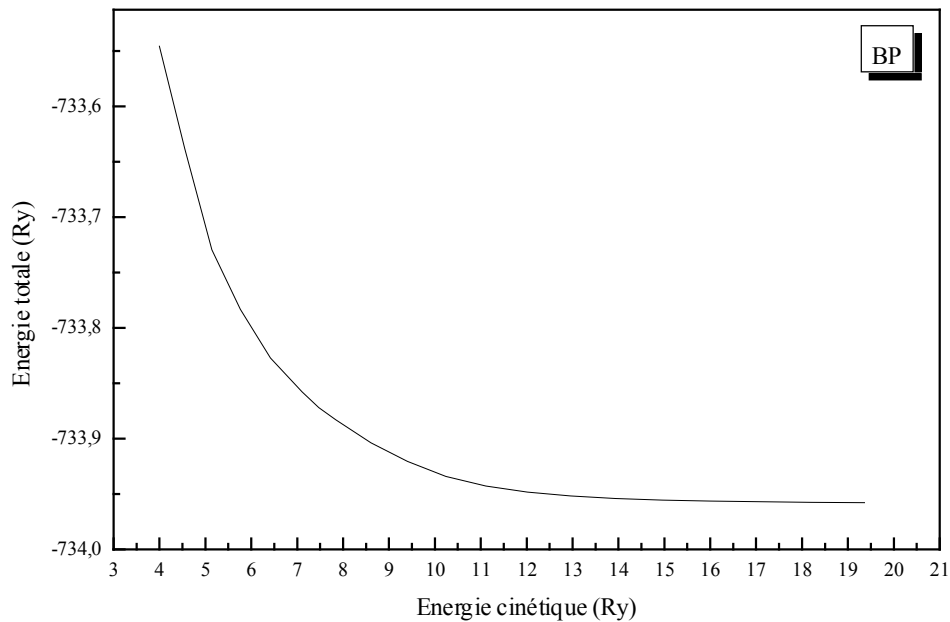


Figure (II.4) : Convergence de l'énergie totale de BP (Zinc blende) en fonction de l'énergie du cutoff.

A partir de l'ajustement des courbes de la figure (II.5) à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan (II.1), nous avons calculé le module de rigidité et sa dérivée. Les résultats obtenus sont donnés dans les Tableaux II.7, II.8 et II.9. Ils sont comparés avec des résultats expérimentaux et avec des calculs *ab-initio*. On remarque que le paramètre de maille qui a la valeur de 4.546 Å en phase zinc blende est en excellent accord avec la

valeur expérimentale qui est de 4.538 Å, soit une différence avec notre résultat de 0.2 %. En ce qui concerne le module de compressibilité, la différence est de 1.7 %.

	Pas du réseau $a_0$ (Å)	Module de rigidité $B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	4.546	1.70	3.07
Expériences	4.538[37][38]	1.73[43]	
Autres calculs	4.51[44]	1.72[44]	3.7[44]
	4.53[45]	1.52[45]	4.3[45]
	4.558[23][25]	1.65[23]	
		1.66[25][46]	

Tableau (II.7): Pas du réseau, module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BP (Zinc blende).

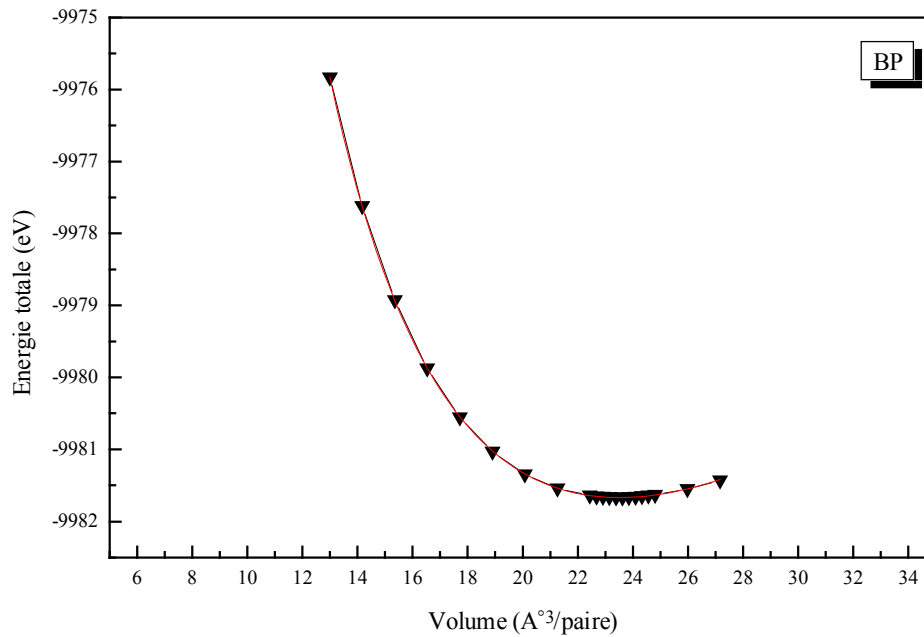


Figure (II.5) : Variation de l'énergie totale de BP (Zinc blende) en fonction du volume.

	Pas du réseau $a_0$ (Å)	$B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	4.320	1.71	2.82
Autres calculs	4.339[25]	1.55[25]	

Tableau (II.8) : Pas du réseau  $a_0$ , module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BP dans la structure NaCl.

	Pas du réseau (Å)		B <sub>0</sub> (Mbar)	B <sub>0</sub> '
	a	c		
Nos calculs	3.007	c= 4.751	3.82	2.92
Autres calculs	2.957[25]	4.672[25]	1.65	

Tableau (II.9) : Pas du réseau, module de rigidité B et sa dérivée B' de BP dans la structure β-Sn.

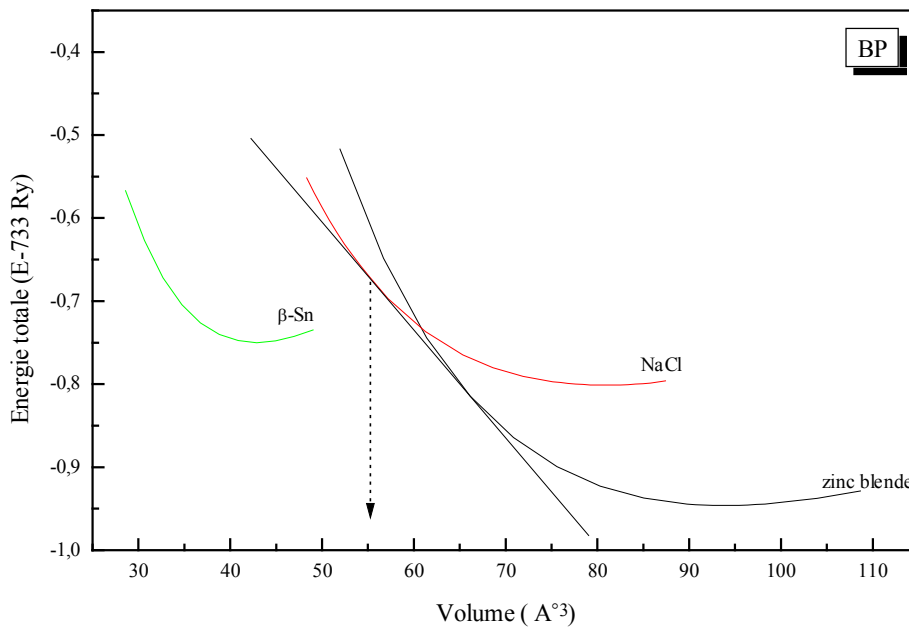


Figure (II.6) : Variation de l'énergie totale de BP en fonction du pas du réseau.

La figure (II.6) montre la valeur de la pression critique lors du passage de la phase zinc blende à la phase NaCl. Cette valeur est de 2.31 Mbar ce qui équivaut à un volume de 55.008 Å<sup>3</sup>, en utilisant l'équation d'état de Murnaghan (II.3).

	P <sub>t</sub> (Mbar)	V <sub>t</sub> (Å <sup>3</sup> )
Nos calculs	2.31	55.008
[25]	1.6	53.028

Tableau (II.10) : Pression de transition structurale de BP.

Notre calcul confirme que la structure β-Sn est instable, ainsi que l'avait trouvé Fahy et al.[55], bien que BP possède la plus faible valeur de l'ionocité parmi les composés de la famille III-V, ( $f_i = 0.006$  [1]).

En conclusion, BP évolue vers la structure NaCl sous l'effet de la pression.

## II.3. Arséniure de bore BAs [56]

La figure II.7 montre que la convergence de l'énergie cinétique de l'ensemble d'ondes planes est assurée pour une valeur de 20 Ry. Les paramètres du calcul sont donnés dans le tableau (II.11).

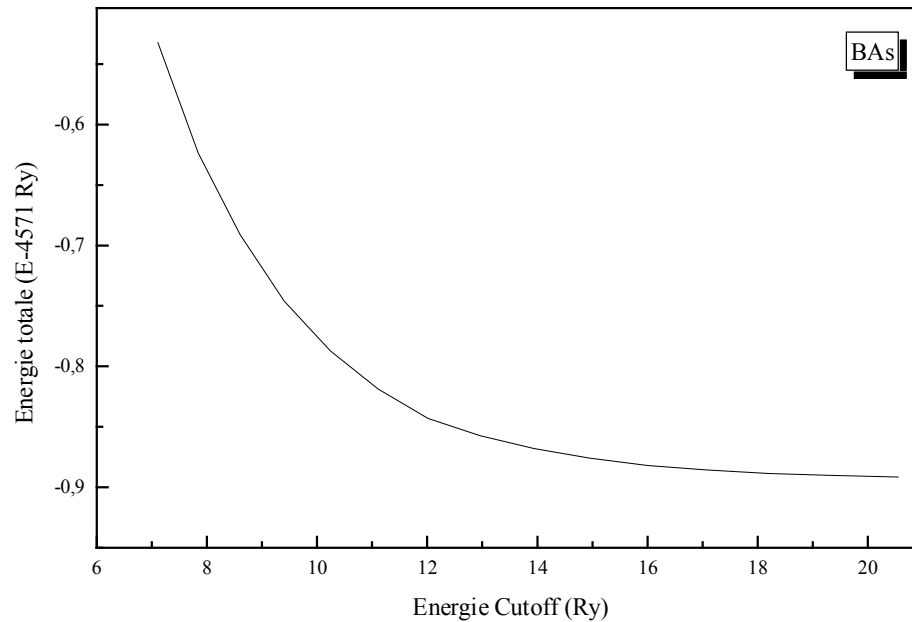


Figure (II.7) : Test de convergence de l'énergie de cutoff de BAs (Zinc blende).

		Zinc blende	NaCl	$\beta$ -Sn
NN-Dist (u.a.)		3.91463	4.35893	3.97175
PW		579	623	655
RMT (u.a.)	B	1.5	1.5	1.5
	As	2	2	2
Cutoff (Ry)	Nos calculs	20	20	20
	Autres calculs	20 [24][25]	20 [25]	20 [25]
Nombre de points k	Nos calculs	30	47	58
	Autres calculs	10 [24][25]	60 [25]	100[25]

Tableau (II.11) : Paramètres constitutifs de BAs utilisés dans nos calculs par la méthode FP-LAPW.

Nous avons tracé l'énergie totale en fonction du volume de BAs (figure II.8). Cette courbe est ajustée à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [36] pour trouver le paramètre de maille  $a_0$ , le module de compressibilité  $B_0$  et sa dérivée  $B_0'$ . Les résultats sont donnés dans le tableau (II.12) et sont comparés avec des mesures expérimentales [38] et des calculs *ab-initio* [24, 25, 46]. Le paramètre de maille est égal à 4.784 (Å). Cette valeur est en bon accord, à 0.15% près, avec le résultat expérimental.

	Pas du réseau $a_0$ (Å)	Module de rigidité $B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	4.784	1.37	3.49
Expériences	4.777[38]		
Autres calculs	4.777[24-25]	1.45[24][25] 1.38[46]	

Tableau (II.12) : Pas du réseau, module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BAs (Zinc blende).

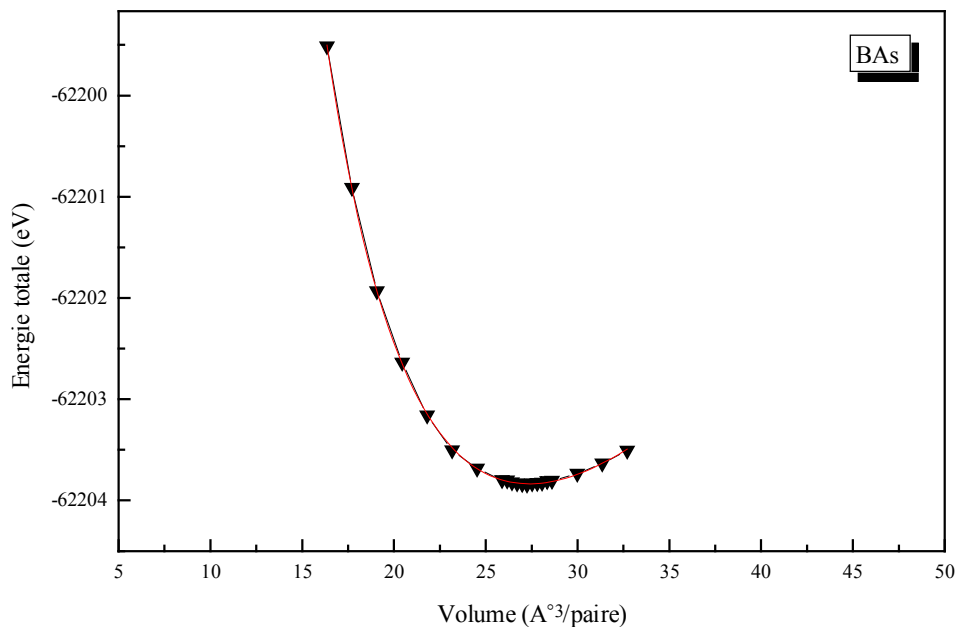


Figure (II.8) : Variation de l'énergie totale de BAs (Zinc blende) en fonction du volume.

La figure (II.9) illustre la variation de l'énergie totale de BAs dans les structures zinc blende, NaCl et  $\beta$ -Sn en fonction du volume. Les pas des réseaux à l'équilibre sont 4.784 Å et 4.619 Å pour respectivement les phases zinc blende et NaCl, et  $a=3.253$  Å et  $c=5.144$  Å pour  $\beta$ -Sn. Cf. les tableaux (II.12), (II.13) et (II.14).

	Pas de réseau $a_0$ (Å)	Module de rigidité $B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	4.619	1.35	3.44
Autres calculs	4.583[25]	1.43[25]	

Tableau (II.13) : Pas du réseau, module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BAs ( Structure NaCl).

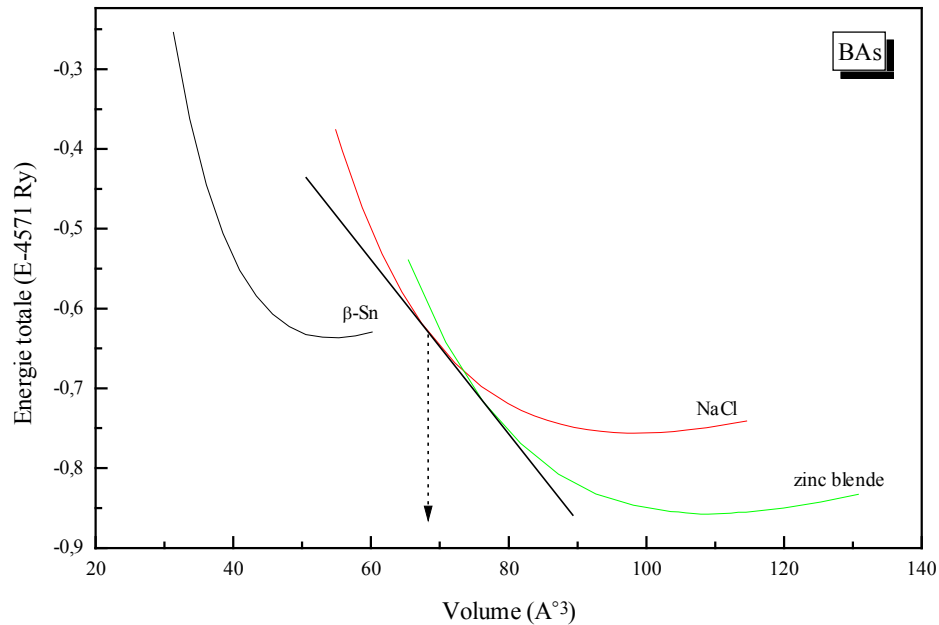


Figure (II.9) : Variation de l'énergie totale de BAs en fonction du volume du réseau.

	$a$ (Å)	$c$ (Å)	$B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	3.253	5.141	2.961	3.241
Autres calculs	3.123 [25]	4.935 [25]	1.41 [25]	

Tableau (II.14): Pas du réseau, module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BAs dans la structure  $\beta$ -Sn.

Afin de trouver la nouvelle phase dans laquelle BAs cristallise sous l'effet de la pression, nous avons étudié son comportement dans les structures NaCl (rocksalt) et métallique ( $\beta$ -Sn). Nous avons tracé à la figure (II.8) l'énergie totale dans chacune des phases en fonction du volume. Les résultats sont donnés dans le tableau (II.15). On constate que BAs évolue vers la structure NaCl comme BP et BN.

	$P_t$ (Mbar)	$V_t$ ( $\text{\AA}^3$ )
Nos calculs	1.73	67.501
Autres calculs	1.1[25]	65.405[25]

Tableau (II.15) : *Pression de transition structurale de BAs.*

## II.4. Antimoniure de bore BSb [56]

Les fonctions d'ondes de BSb sont développées en ondes planes avec des vecteurs propres qui sont la somme des vecteurs d'ondes  $k$  de la première zone de Brillouin et des vecteurs  $G$  du réseau réciproque. Les seules ondes planes à considérer dans ce développement sont celles qui ont une énergie cinétique plus petite que l'énergie de cutoff  $E_c$ . Le test de convergence représenté à la figure (II.9) indique une valeur  $E_c = 20$  Ry. Le calcul de l'énergie structurale totale a été fait d'une façon auto-cohérente avec 30 points  $k$  dans la zone de Brillouin (tableau II.16).

		Zinc blende	NaCl	$\beta$ -Sn
NN-Dist (u.a.)		4.29758	4.72052	4.42493
PW		745	698	766
RMT (u.a.)	B	1.5	1.5	1.5
	Sb	2.3	2.3	2.3
Cutoff (Ry)	Nos calculs	20	20	20
	Autres calculs	20 [34]		
Nombre de points $k$	Nos calculs	30	47	58
	Autres calculs	6 [34]		

Tableau (II.16) : *Paramètres constitutifs de BSb utilisés dans nos calculs par la méthode FP-LAPW.*

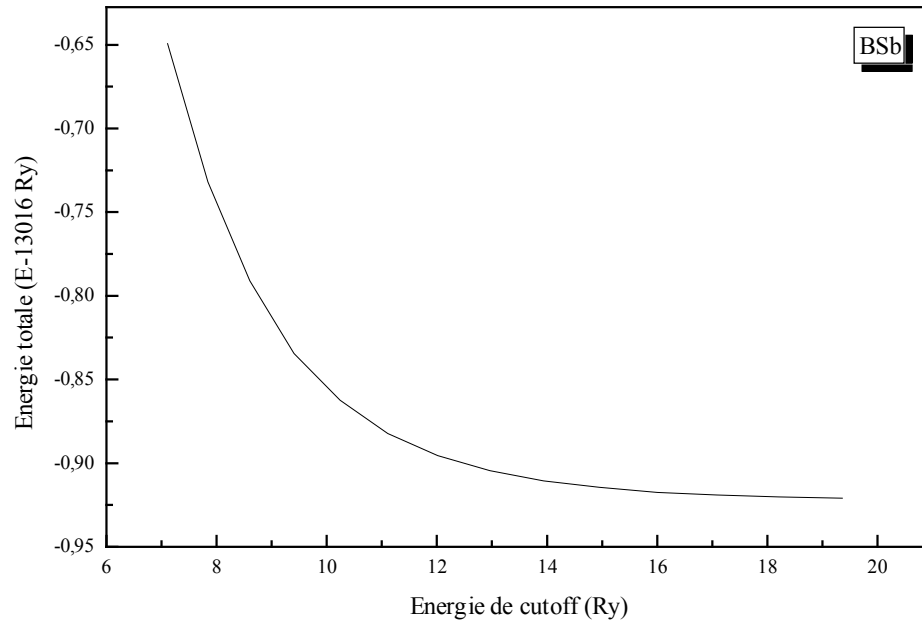


Figure (II.9) : Test de convergence de l'énergie cinétique (Cutoff) de BSb (Zinc blende).

La figure (II.10) montre la variation de l'énergie totale de l'état fondamental de BSb en fonction du volume du réseau dans la structure zinc blende. L'énergie totale a été calculée pour différentes valeurs du volume, comprises entre 25 et 44 ( $\text{\AA}^3$ /paire) et a été ajustée à l'aide de l'équation (II.1). Le pas du réseau à l'équilibre est 5.252  $\text{\AA}$ . Les valeurs du module de rigidité  $B_0$  et de sa dérivée  $B'_0$  sont respectivement de 1.03 Mbar et de 3.62 (Tableau II.17).

	Pas du réseau $A_0$ ( $\text{\AA}$ )	$B_0$ (Mbar)	$B'_0$
Nos calculs	5.252	1.03	3.62
Autres calculs	5.12[34]	1.15[34] 1.08[46]	5.28[34]

Tableau (II.17): Pas du réseau, module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BSb (Zinc blende).

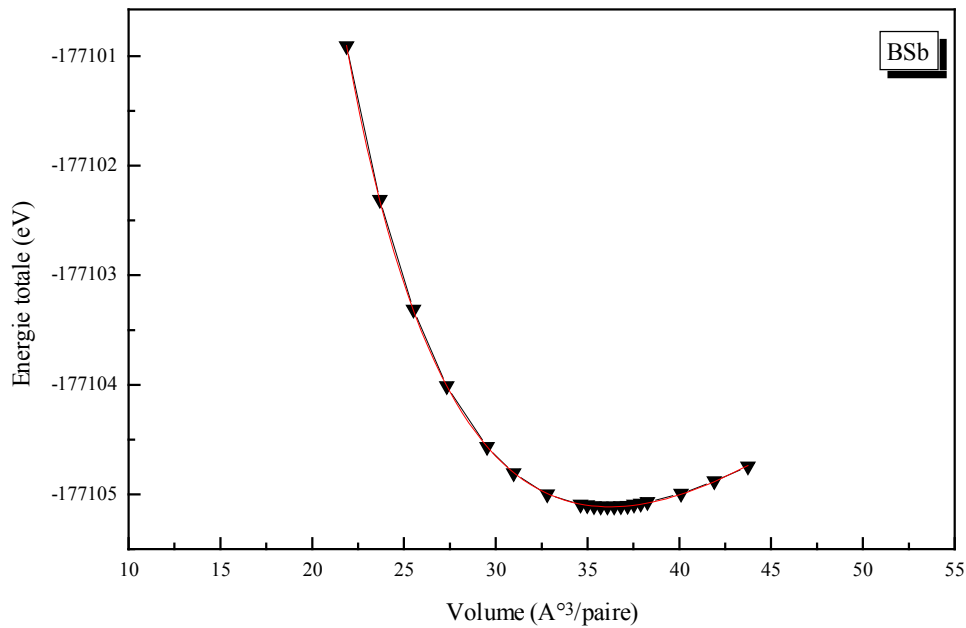


Figure (II.10) : Variation de l'énergie totale de BSb en fonction du volume (zinc blende).

Les données expérimentales suggèrent que les composés III-V à structure zinc blende peuvent cristalliser dans deux structures sous l'effet de la pression ( $\beta$ -Sn ou NaCl). Notre but est de déterminer quelle est la structure la plus stable vers laquelle évolue BSb caractérisé par une faible valeur de l'ionicté.

La figure (II.12) représente l'énergie totale de BSb en fonction du volume du réseau primitif pour les structures zinc blende, NaCl et  $\beta$ -Sn. Les valeurs des propriétés statiques calculées sont données dans les tableaux (II.17), (II.18) et (II.19).

	Pas du réseau $a_0$ (Å)	Module de rigidité $B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	4.979	1.08	3.89

Tableau (II.18) : Pas du réseau, module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BSb (Structure NaCl)..

	$a$ (Å)	$c$ (Å)	$B_0$ (Mbar)	$B_0'$
Nos calculs	3.496	5.524	2.35	3.23

Tableau (II.19) : Pas du réseau, module de rigidité  $B$  et sa dérivée  $B'$  de BSb dans la structure  $\beta$ -Sn.

La structure  $\beta$ -Sn peut être obtenue à partir de la structure zinc blende en modifiant la valeur du rapport  $c/a$  de la cellule tétragonale. Le calcul de l'énergie totale de la phase  $\beta$ -Sn en fonction du rapport  $c/a$  montre qu'elle présente une valeur minimale pour  $c/a = 0.58$ . Avec cette valeur  $c/a=0.58$  nous avons calculé la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour la structure  $\beta$ -Sn de BN, BP, BAs et BSb.

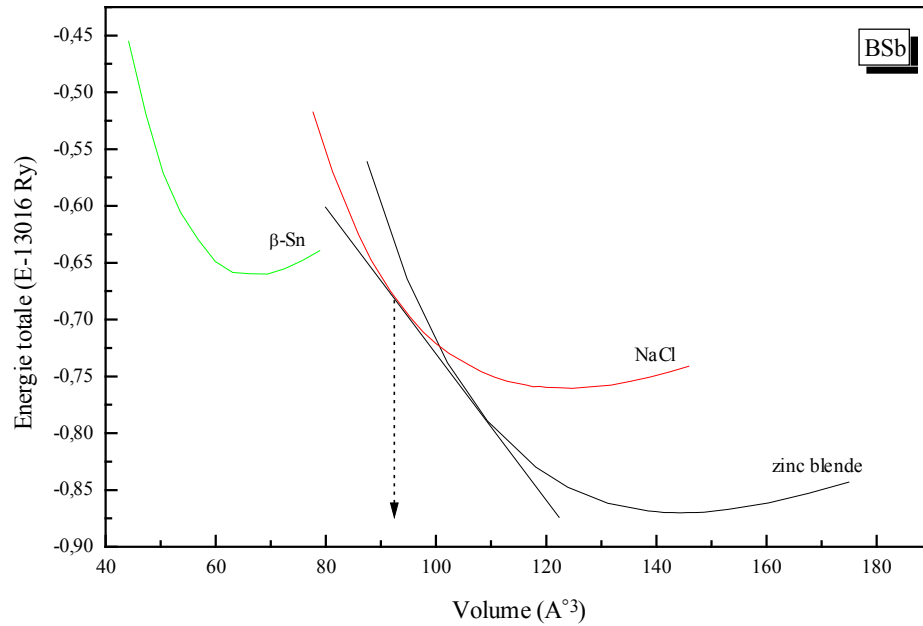


Figure (II.11) : Variation de l'énergie totale de BSb en fonction du volume.

La pression de transition structurale de BSb a pour valeur 1.15 Mbar. Elle est comparée avec la seule valeur calculée à notre connaissance [35] (Tableau II.20).

	$P_t$ (Mbar)	$V_t$ ( $\text{\AA}^3$ )
Nos calculs	1.15	92.590
Autres calculs	1.83[35]	87.76[35]

Tableau (II.20) : Pression de transition structurale de BSb.

Nos calculs confirment que la nouvelle structure des composés BN, BP, BAs et BSb sous l'effet de la pression ne peut être que la structure NaCl. Le calcul indique l'ordre de grandeur de la valeur de la pression de transition

## Références

- [1] J.C. Phillips, «*Bond and bands in semiconductors*» Academic press, New York and London (1973) ; J.A. Van Vechten and J.C. Phillips, Phys. Rev. B **1**, 2160 (1970).
- [2] N.E. Christensen and S. Satpathy and Z. Pawlowska, Phys. Rev. B **36**, 1032 (1987).
- [3] A. Garcia and M.L. Cohen, Phys. Rev. B **47**, 4215 (1993).
- [4] A. Zaoui, M. Ferhat, B. Khelifa, J.P. Dufour and H. Aourag, Phys. Stat. Sol. (b) **185**, 163 (1994).
- [5] L. Kleinman, and J. C. Phillips, Phys. Rev. **117**, 460 (1960).
- [6] D. Stocker, Proc. Roy. Soc. (London) A **270**, 397 (1962).
- [7] F. Bassani, and M. Yoshimine, Phys. Rev. **130**, 20 (1963).
- [8] DR. Wiff and Keown, J. Chem. Phys. **47**, 3113 (1967).
- [9] J. C. Phillips, J. Chem. Phys. **4**, 5740 (1968).
- [10] L. A. Hemstreet and C. Y. Fong, Phys. Rev. **B6**, 1464 (1972).
- [11] A. Zunger, and J. Freeman, Phys. Rev. B **17**, 2030 (1978).
- [12] H. C. Hwang, and J. Henkel, Phys. Rev. B **17**, 4100 (1978).
- [13] Y. F. Tsay, A. Vaidyanathan, and S. S. Mitra, Phys. Rev. B **19**, 5423 (1979).
- [14] R. Dovesi, C. Pisani, C. Roetti, and P. Dellarole, Phys. Rev. B **24**, 4170 (1981).
- [15] K. T. Park, K. Terakuera, and Hamada, J. Phys. C**20**, 1241 (1987).
- [16] A. Catellani, M. Posternark, A. Baldereschi, and J. Freeman, Phys. Rev. B **36**, 6105 (1987).
- [17] M. P. Surh, S. G. Louie, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **43**, 9126 (1991).
- [18] Y. N. Xu, and W. Y. Ching, Phys. Rev. B **44**, 7787 (1991).
- [19] W. V. Ilyasov, I. Ya. Nikiforov, and N. Yu, Safontseva, Phys. Stat. Sol. (b) **185**, 171 (1994).
- [20] P. R. Hernandez, M. G. Diaz, and A. Munoz, Phys. Rev. B **51**, 14705 (1995).
- [20] X. Blase, A. Rubio, S. G. Luoie, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **51**, 6868 (1995).
- [21] H. Bross, and R. Bader, Phys. Stat. Sol. (b) **191**, 369 (1995).
- [22] W. Sekkal, B. Bouhafs, H. Aourag, and M. Certier, J. Phys. : Condens. Matter **10**, 4975 (1998).
- [23] R. Wentzcovitch, K.J. Chang and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **34**, 1071 (1986).
- [24] R. Wentzcovitch, and Marvin L. Cohen, J. Phys. C **19**, 6791 (1986).
- [25] R. Wentzcovitch, M. L. Cohen, and Pui K. Lam, Phys. Rev. B **36**, 6058 (1987).

- [26] P. Rodriguez-Hernandez, M. Gonzalez-Diaz, and A. Munoz, *Phys. Rev. B* **51**, 14705 (1995).
- [27] L. Vel, G. Demazeau, and J. Eloumeau, *Mater. Sci. Eng. B* **10**, 149 (1991).
- [28] S. Shanfield, and R. Wolfson, *J. Vac. Sci. Technol. A***1**, 323 (1983).
- [29] M. Saton, and F. Fujimoto, *Japan J. Appl. Phys.* **2L171** (1983)
- [30] K. Inagawa, K. Watanabe, H. Ohson, K. Saitoh, and A. Itoh, *J. Vac. Sci. Technol. A***5**, 2696 (1987).
- [31] D. J. Kester, and R. Messer, *J. Appl. Phys.* **72**, 504 (1992).
- [32] Knittle, R. M. Wentzcovitch, R. Jeanloz, and M. L. Cohen, *Nature (london)* **337**, 349 (1989).
- [33] A. Rubio, J. L. Corkill, M. L. Cohen, E. L. Shirley, and S. G. Louie, *Phys. Rev. B* **48**, 1180 (1993).
- [34] M. Ferhat, B. Bouhafs, A. Zaoui, and H. Aourag, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 7995 (1998).
- [35] A. Zaoui, M. Certier, M. Ferhat and H. Aourag, *soumis, Phys. Stat. Sol.* (2000).
- [36] F.D. Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **30**, 5390(1944).
- [37] *Numerical Data and Functional Relationships in science and Technology, Physics of Group IV Elements and III-V Compounds*, edited by O. Madelung, Landolt-Börnstein, New series, Group III, Vol. 17, Pt. a (Springer-Verlag, Berlin, 1982).
- [38] *Numerical Data and Functional Relationships in science and Technology---Crystal and solid state physics*, Vol. III of Landolt-Börnstein, edited by O. Madelung (Springer, Berlin, 1972).
- [39] V. A. Pesin, *Sverktverd, Mater.* **6**, 5 (1980).
- [40] P. E. Van Camp, V. E. Van Doren, and J. T. Devreese, *Phys. Stat. Sol. (b)* **146**, 573 (1988).
- [41] K. Karch, and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* **56**, 7404 (1997).
- [42] N. E. Christensen, and I. Gorczyca, *Phys. Rev. B* **50**, 4397 (1994).
- [43] W. Wettling, and J. Windscheih, *solid state commun*, **50**, 33 (1984).
- [44] Walter R. L. Lambrecht, and Benjamin Segall, *Phys. Rev. B* **43**, 7070 (1991).
- [45] Hui Xia, Qing Xia and A. L. Ruoff, *J. appl. Phys.* **74**, 1660 (1993).
- [46] M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **32**, 7988 (1985).
- [47] I. Gorczyca and N. E. Christensen, *Physica B***185**, 410 (1993).
- [48] R.H. Wentorf, *J. Chem. Phys.* **26**, 956 (1957).
- [49] C.A. Brookes, R.M. Hooper and W.A. Lambert, *Phil. Mag.* **A47**, L9 (1983).

- [50] T. Sato, T. Ishii and N. Setaka, Commun. Am. Ceram. Soc. **C162**, (1982).
- [51] J.P. Perdew, S. Burke, M Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [52] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [53] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [54] P. Blaha, K. Schwarz and J. Luitz, Wien97, Vienna University of Technology, 1997. [Improved and updated Unix version of the original copyrighted WIEN-code, which was published by P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S.B. Trickey, in : Commun. 59, 399 (1990)].
- [55] S. Fahy and S.G. Louie, Phys. Rev. B **36**, 3773 (1987).
- [56] F. El Haj Hassan, A. Zaoui and M. Certier, J. Phys. C : Solid State Phys. Soumis (2000).