

Chapitre V

*Etude des propriétés structurales et
électroniques des alliages*

$C_x(BN)_{1-x}$,

$CuCl_xBr_{1-x}$, $CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$

Introduction

Les alliages à base de carbone C et de nitrure de bore BN se présentent sous la forme $C_x(BN)_{1-x}$. Ils ont été récemment synthétisés pour $x = 0.3, 0.5, \text{ et } 0.6$ à l'aide de pressions supérieures à 30 GPa et à des températures supérieures à 1500 K [1-4]. L'existence de ces alliages, de même structure que le carbone et le BN, est favorisée par le fait que le C et le BN possèdent le même diagramme de phase ainsi que des pas de réseau voisins. Notons, en outre, la réalisation de couches minces de C-BN en phase hexagonale [5-7] et leurs études théoriques par Liu, Wentzcovitch et Cohen [8].

En ce qui concerne les alliages ternaires à base de cuivre Cu et de deux halogènes, $CuCl_xBr_{1-x}$, $CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$, l'observation par diffraction X a récemment montré qu'ils forment des solutions solides stables cristallisant dans la structure zinc blende. Les paramètres de maille varient linéairement avec la concentration x [11-13].

Au sujet des études théoriques, les propriétés structurales et électroniques de $C_x(BN)_{1-x}$ (Variation du gap, caractère ionique, paramètre de maille et module de compressibilité) ont été calculées par la méthode du pseudopotentiel empirique par Zaoui et al. [9]. En outre, l'évolution du module de rigidité et de la température de Debye de $C_x(BN)_{1-x}$ ont été étudiés en fonction de la composition x par la dynamique moléculaire (Sekkal et al. [10]).

Par ailleurs, les propriétés électroniques (structure de bandes, densité d'états) et optiques (variation du gap et indice de réfraction en fonction de la concentration x) des alliages à base des halogénures de cuivre ont été calculées en utilisant la méthode des liaisons fortes [14-16]. De même, les propriétés thermodynamiques ont été l'objet d'études par la dynamique moléculaire [46, 47].

En conséquence, il était intéressant de contribuer à l'étude des propriétés structurales et électroniques de ces composés par la méthode FP-LAPW en utilisant la technique détaillée dans les références [17-20].

V.1. La Méthode de calcul

Les méthodes traditionnelles, comme l'approximation du cristal virtuel (VCA) [21] et l'approximation du potentiel cohérent (CPA) [22], fournissent un nombre limité de grandeurs physiques avec une faible précision. Pour étudier nos alliages, nous avons préféré suivre la méthode développée par Zunger et al. [17-20] qui rend bien compte des effets chimiques et des modifications structurales. Cette méthode consiste à considérer l'alliage dans une structure ordonnée constituée par une super-cellule cubique contenant huit atomes.

Dans le cas général, Bernard et Zunger [18] considèrent un alliage du type $A_{1-x}B_xC$ à une concentration unique $x=1/2$.

$$AC(a_{AC}) + BC(a_{BC}) \rightarrow A_{0.5}B_{0.5}C(a_{eq}) \quad (V.1)$$

où, à l'équilibre, a_{AC} et a_{BC} sont les pas des réseaux des matériaux parents AC et BC, a_{eq} le pas du réseau de l'alliage. Le réseau du composé AC est ensuite dilaté et celui de BC comprimé. Le pas du réseau a de l'alliage devient une fonction de x

$$a = a(x) = \frac{a_{AC} + a_{BC}}{2} \quad (V.2)$$

et le coefficient général de désordre (bowing b) se présente sous la forme de la somme de trois composantes b_{VD} , b_{CE} et b_S :

$$b = b_{VD} + b_{CE} + b_S \quad (V.3)$$

b_{VD} représente la déformation du volume (VD) de chaque composé (effet équivalent à une pression hydrostatique) :

$$b_{VD} = 2[E_{AC}(a_{AC}) - E_{AC}(a) + E_{BC}(a_{BC}) - E_{BC}(a)] \quad (V.4)$$

b_{CE} l'échange de charge entre les deux composés AC et BC :

$$b_{CE} = 2[E_{AC}(a) + E_{BC}(a) - 2E_{ABC}(a)] \quad (V.5)$$

et b_S la relaxation de la liaison structurale de l'alliage :

$$b_S = 4[E_{ABC}(a) + E_{ABC}(a_{eq})] \quad (V.6)$$

Tous les termes dans les équations (V.3)-(V.5) sont déterminés séparément à partir d'un calcul auto-cohérent de la structure de bandes. La résolution de ces équations exige la connaissance expérimentale du pas du réseau des composés AC et BC, ainsi que de la valeur de $a(x)$ calculée à partir de la relation (V.2), ce qui équivaut à l'application de la loi de Vegard [23] pour $x=0.5$.

V.2. Propriétés structurales et électroniques de l'alliage $C_x(BN)_{1-x}$ [54]

V.2.1. Etudes structurales

Nous avons employé la méthode FP-LAPW pour étudier l'alliage $C_x(BN)_{1-x}$. Ces calculs ont été effectués dans le cadre de l'approximation du gradient généralisé (GGA), avec la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le tableau (V.1) contient les paramètres de ce calcul : L'énergie cinétique nécessaire pour assurer la convergence (Cutoff), le nombre de points k dans la zone réduite de Brillouin, le nombre d'ondes planes utilisées (PW), la distance entre les atomes les plus proches (NN-Dist) et le rayon de la sphère MT (RMT).

	Cutoff (Ry)	Nombre de points k	PW	NN-Dist (u.a.)	RMT (u.a.)		
					C	B	N
C	33	20	147	2.92201	1.4		
$C_x(BN)_{1-x}$	64	40	2639	2.93842	1.4	1.4	1.5
BN	64	30	511	2.96543		1.4	1.5

Tableau (V.1) : Paramètres constitutifs du carbone, de BN et de l'alliage $C_x(BN)_{1-x}$ utilisés dans nos calculs par la méthode FP-LAPW (1 u.a. = 0.529177 Å).

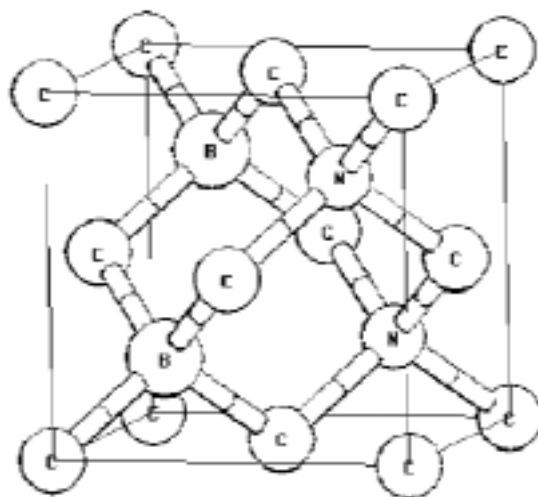


Figure (V.1) : Super-cellule cubique de l'alliage $C_{0.5}(BN)_{0.5}$.

La figure (V.1) illustre la super-cellule cubique à huit atomes utilisée pour la concentration moyenne $x=0.5$ de $C_x(BN)_{1-x}$. Dans cette cellule, il existe plusieurs arrangements atomiques possibles pour l'alliage à 50 %. Il est utile de noter que les mesures de diffraction de rayons X mous [4] confirment que le $C_x(BN)_{1-x}$ a la même structure que le diamant et le nitrure de bore.

Les figures (V.2), (V.3) et (V.4) représentent la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le carbone, $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ et BN. Ces courbes sont ajustées à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [39] afin de calculer le paramètre de maille (a_0), le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B'_0 .

Les résultats sont donnés dans le tableau (V.2) et comparés avec des résultats expérimentaux et avec des calculs *ab-initio*. La valeur du pas du réseau du carbone est de 3.571 Å, avec une légère différence de 0.11 % par rapport à l'expérience. Pour le module de rigidité et sa dérivée, les écarts sont respectivement de l'ordre de 1 et 4 %. En ce qui concerne le $C_{0.5}(BN)_{0.5}$, on remarque que le paramètre de maille de 3.591 Å est en excellent accord avec la valeur expérimentale de 3.602 Å.

		C	$C_{0.5}(BN)_{0.5}$	BN
a_0 (Å)	Nos calculs	3.571	3.591	3.623
	Expériences	3.5668[33]	3.602[4]	3.615[3, 24]
	Autres calculs	3.6068[34]	3.60[9]	3.575[25]
		3.567[37]	3.601[10]	3.576[26]
				3.649[27]
			3.606[29, 30]	
			3.623[28]	
B_0 (Mbar)	Nos calculs	4.47	4.25	3.68
	Expériences	4.42[35]		3.69[3]
	Autres calculs	5.17[34]	4.19[9]	3.86[25]
			3.696[10]	3.97[26]
			3.699[38]	3.66[27]
				3.67[29][30]
				3.65[28]
		3.59[31]		
		3.87[32]		
B'_0	Nos calculs	4.34	5.45	3.32
	Expériences	4.07[36]		4[3]
	Autres calculs	2.5159[34]	4.95[10]	3.6[26]
				2.91[27]
			3.94[28]	
			3.97[31]	

Figure (V.2) : Propriétés statiques du Carbone, de BN et de l'alliage $C_{0.5}(BN)_{0.5}$: pas du réseau a_0 , module de rigidité B_0 et sa dérivée B'_0 .

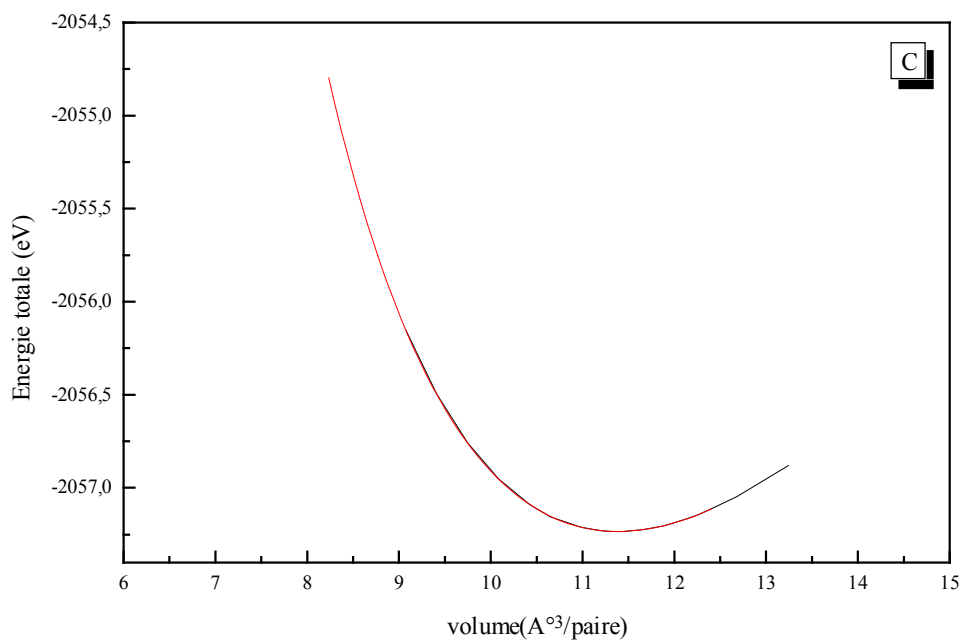


Figure (V.2) : Variation de l'énergie totale du carbone (Zinc blende) en fonction du volume.

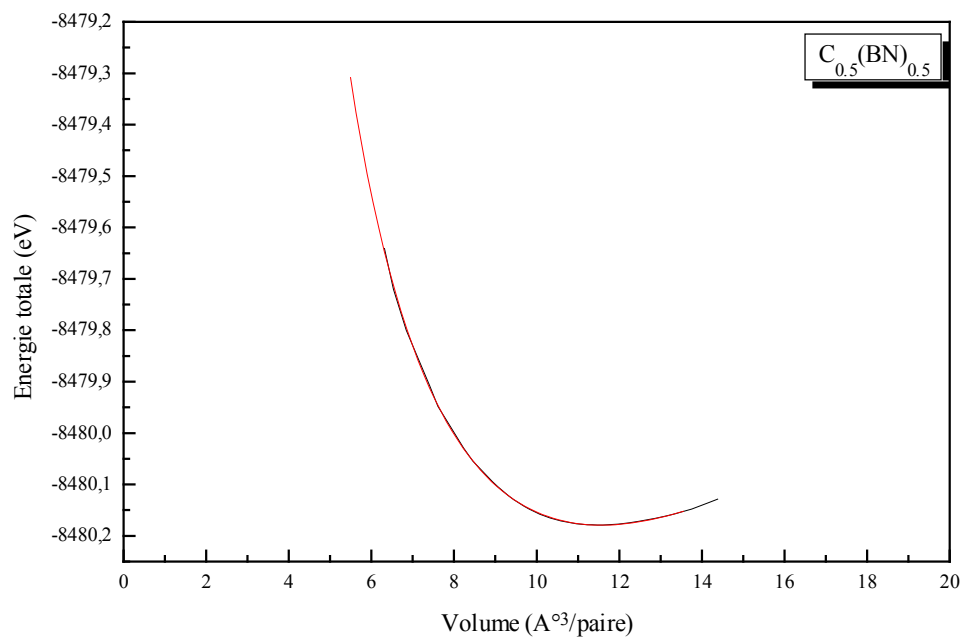


Figure (V.3) : Variation de l'énergie totale de l'alliage $C_x(BN)_{1-x}$ ($x=0.5$) en fonction du volume.

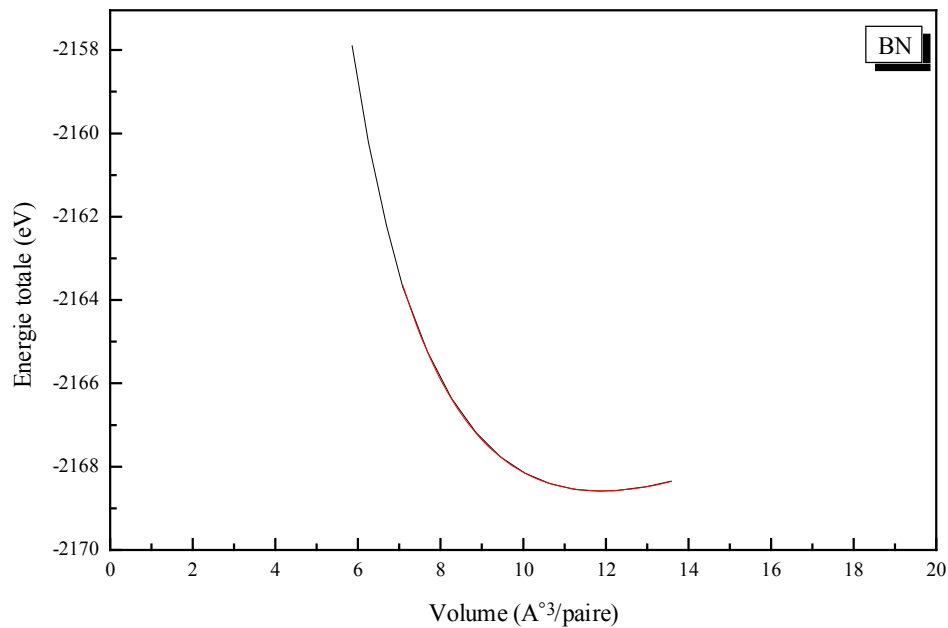


Figure (V.4) : Variation de l'énergie totale de BN (Zinc blende) en fonction du volume.

V.2.2. Propriétés électroniques de $C_x(BN)_{1-x}$

Afin de déterminer l'origine du bowing optique de $C_{0.5}(BN)_{0.5}$, nous avons tracé la structure de bandes pour C, BN et $C_x(BN)_{1-x}$ ($x=0.5$), à l'équilibre et à un pas de réseau moyen $a(x)$ {Figures (V.5), (V.6) et (V.7)}. Les résultats montrent que le diamant et le nitrure de bore possèdent un gap indirect avec un minimum de la bande de conduction au point X. Les gaps calculés pour C et BN en phase zinc blende sont respectivement de 3.49 et 4.45 eV.

Le bowing total est obtenu à partir de l'équation (V.6). Les résultats sont donnés dans le tableau (V.3). On remarque que :

- La contribution de l'échange de charge est plus importante que la contribution de la déformation volumique, ce qui est normal, compte tenu de la différence entre les valeurs de l'ionicté de ces deux composés.
- La relaxation structurales (S) est faible parce que les paramètres de maille des deux composés sont voisins.

Nous remarquons, en outre, que nos résultats sont comparables à ceux de Zaoui [9] dans les directions $\Gamma \rightarrow X$ et $\Gamma \rightarrow L$.

A notre connaissance, ce calcul du bowing optique de $C_x(BN)_{1-x}$ est le premier effectué par cette technique.

	b_{VD} (eV)	b_{CE} (eV)	b_S (eV)	b (eV)	b (eV) [9]
$\Gamma \rightarrow X$	0.05154	1.68976	-0.01032	1.73098	1.75
$\Gamma \rightarrow L$	-2.4117	8.29041	5.78944	11.66811	10.01
$\Gamma \rightarrow \Gamma$	-1.6031	22.11	-0.01032	20.484	2.35

Tableau (V.3) : Décomposition du bowing optique des gaps direct et indirect de $C_x(BN)_{1-x}$ ($x=0.5$) : Déformation de volume (VD), échange de charge (CE) et relaxation structurale (S).

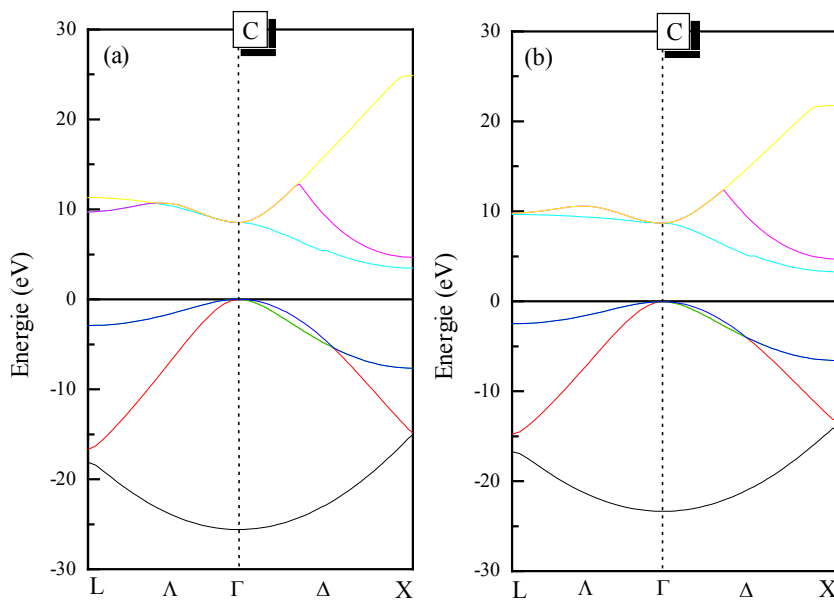


Figure (V.5) : Structure de bandes du carbon (Zinc blende) : (a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

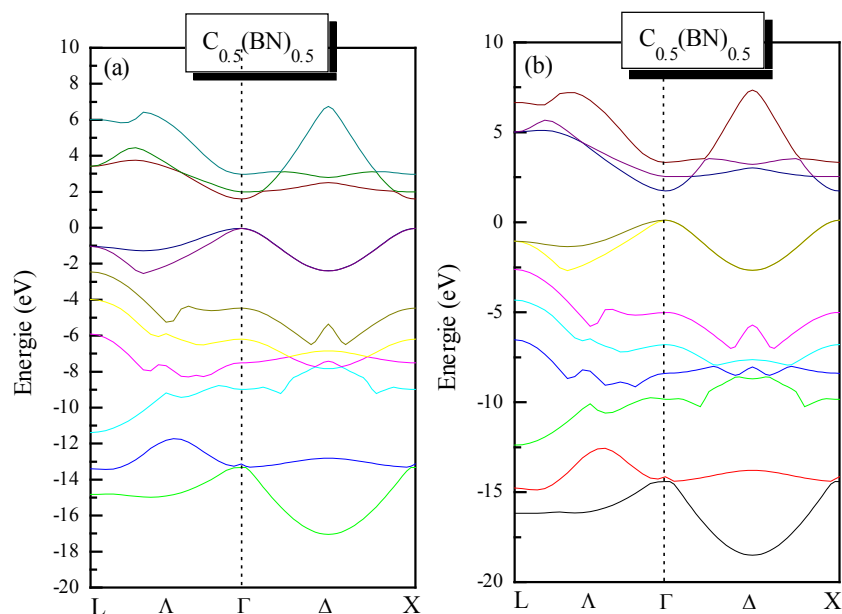


Figure (V.6) : Structure de bandes de $C_x(BN)_{1-x}$ ($x=0.5$) :
 (a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

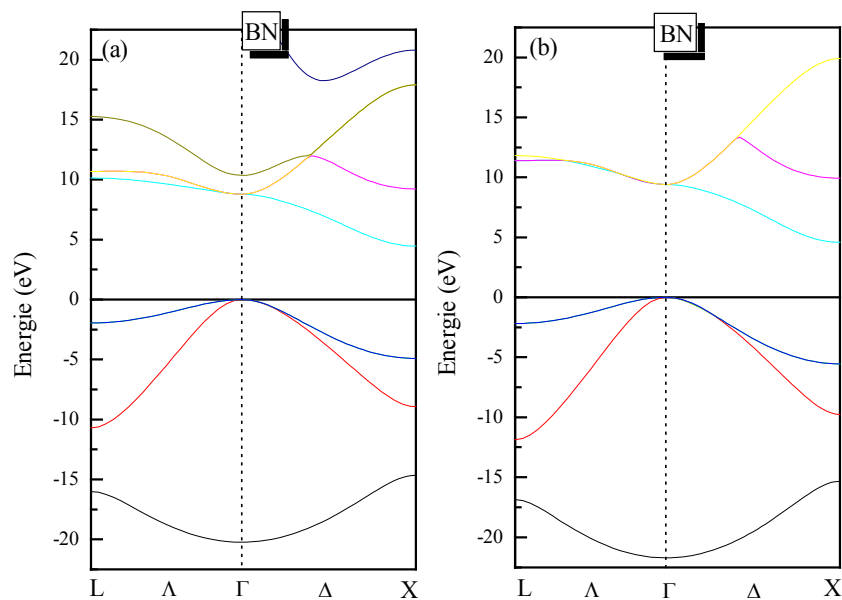


Figure (V.6) : Structure de bandes de BN en phase zinc blende :
 (a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

V.3. propriétés structurales et électroniques des alliages $CuCl_xBr_{1-x}$, $CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$ [55]

Les propriétés structurales et le bowing optique total des alliages $CuCl_{0.5}Br_{0.5}$, $CuCl_{0.5}I_{0.5}$ et $CuBr_{0.5}I_{0.5}$ sont calculés par application de la méthode FP-LAPW. L'ensemble de ces études est basé sur la GGA associée à la DFT. Une énergie cinétique maximum de 20.66 Ry, est suffisante pour assurer la convergence. Cette énergie maximum est prise pour les trois alliages et pour chaque pas du réseau. L'énergie totale est calculée de façon auto-cohérente avec 30 points k dans la zone réduite de Brillouin. Le nombre des ondes planes utilisées (PW), la distance entre les atomes les plus proches (NN-Dist) et le rayon des sphères MT (RMT) sont donnés dans le tableau (V.4).

	PW	NN-Dist (u.a.)	RMT (u.a.)	
			Cu	Cl, Br, I
$CuCl_xBr_{1-x}$	982	4.55645	2.2	2.2
$CuCl_xI_{1-x}$	1018	4.62046	2.2	2.2
$CuBr_xI_{1-x}$	1104	4.80677	2.2	2.4

Tableau (V.4) : Paramètres constitutifs utilisés dans nos calculs par la méthode FP-LAPW pour les trois alliages : $CuCl_{1-x}Br_{1-x}$, $CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$.

Les super-cellules utilisées (figure V.7) pour les alliages $CuCl_xBr_{1-x}$, $CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$ sont les mêmes que celle adoptée pour l'alliage $C_x(BN)_{1-x}$ à la concentration $x=0.5$.

Afin d'examiner les propriétés structurales des alliages $CuCl_xBr_{1-x}$, $CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$ à une concentration $x=0.5$, nous avons tracé la variation de l'énergie totale en fonction du volume de maille de chaque alliage (Figures V.8, V.9 et V.10). L'ajustement de ces courbes à l'aide de l'équation de Murnaghan donne des valeurs de a_0 , B_0 et B'_0 en bon accord avec les valeurs expérimentales d'Endo et al. [11, 12] soit avec une différence de l'ordre de 0.1-0.4 % pour le paramètre de maille. Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau (V.5).

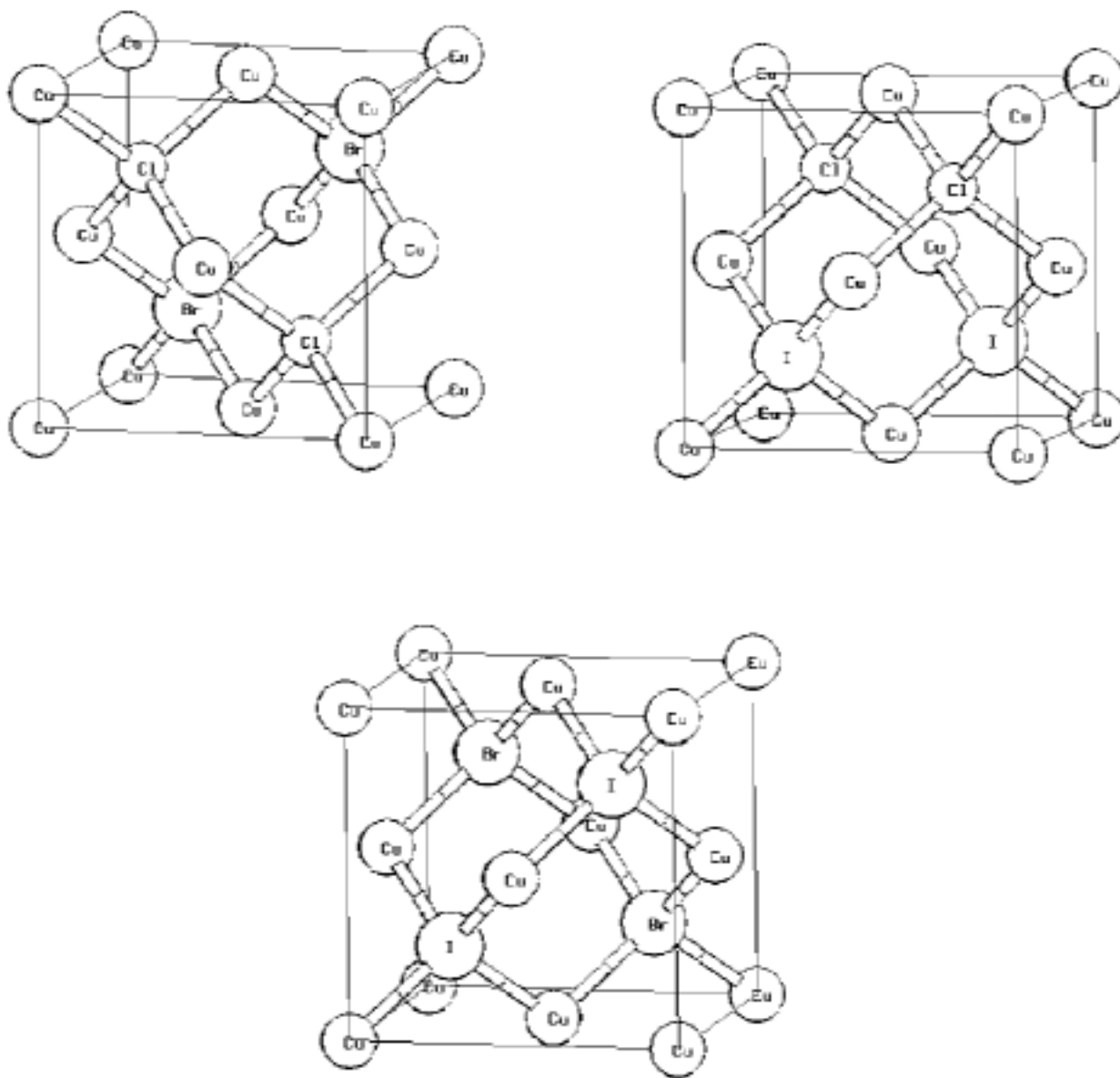


Figure (V.7) : Super-cellules cubiques des trois alliages : $CuCl_xBr_{1-x}$, $CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$ à la concentration $x=0.5$.

		CuCl	CuBr	CuI	$CuCl_{0.5}Br_{0.5}$	$CuCl_{0.5}I_{0.5}$	$CuBr_{0.5}I_{0.5}$
a_0 (Å)	Nos calculs	5.444	5.732	6.082	5.588	5.7003	5.871
	Expériences	5.424[40]	5.69[40]	6.054[40]	5.555[11]		5.865[12]
	Autres calculs	5.273 LAPW[41]	5.69[42]	6.062[43]	5.560[46]		5.878[47]
		5.34 pseudo[41] 5.47[42]					
B_0 (Mbar)	Nos calculs	0.49	0.44	0.397	0.462	0.434	0.402
	Expériences	0.38[40]	0.36[40]	0.366[40]			
	Autres calculs	0.54[44]		0.3[45]			
		0.75 LAPW[41] 0.62 Pseudo[41] 0.403[42]	0.35[42]	0.352[43]	0.374[46]		0.362[47]
B'_0	Nos calculs	5.172	4.528	4.695	5.89	5.484	5.871
	Expériences	4[40]	4[40]	4[40]			
	Autres calculs	11.25[42]	10.3[42]	3.22[43]	6.11[46]		15.56[47]

Tableau (V.5): Pas du réseau, module de rigidité B_0 et sa dérivée B'_0 des halogénures de cuivre et de leurs alliages.

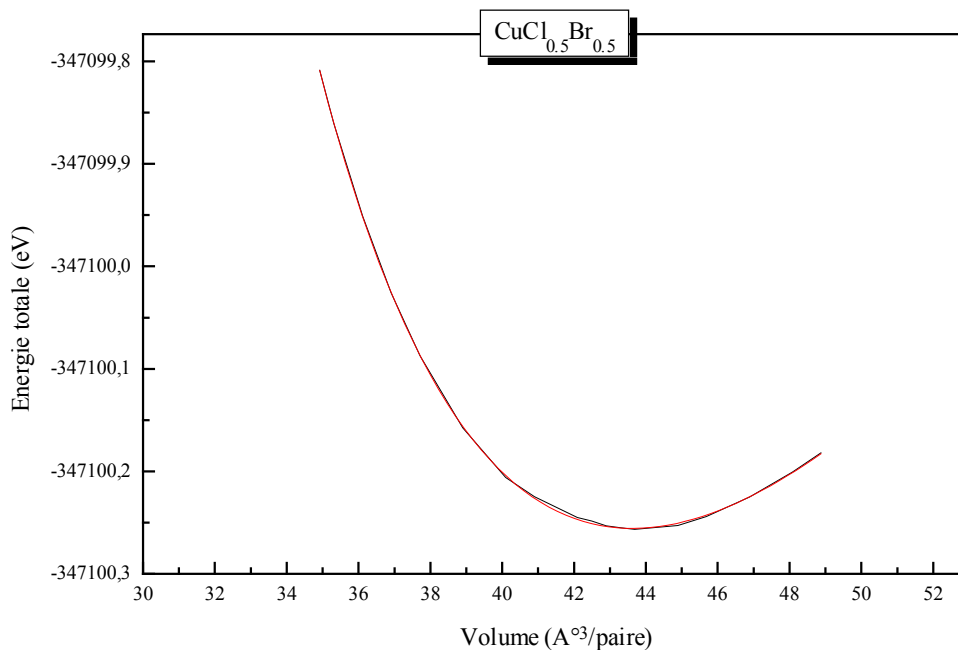


Figure (V.8) : Variation de l'énergie totale de $CuCl_xBr_{1-x}$ (Zinc blende) en fonction du volume.

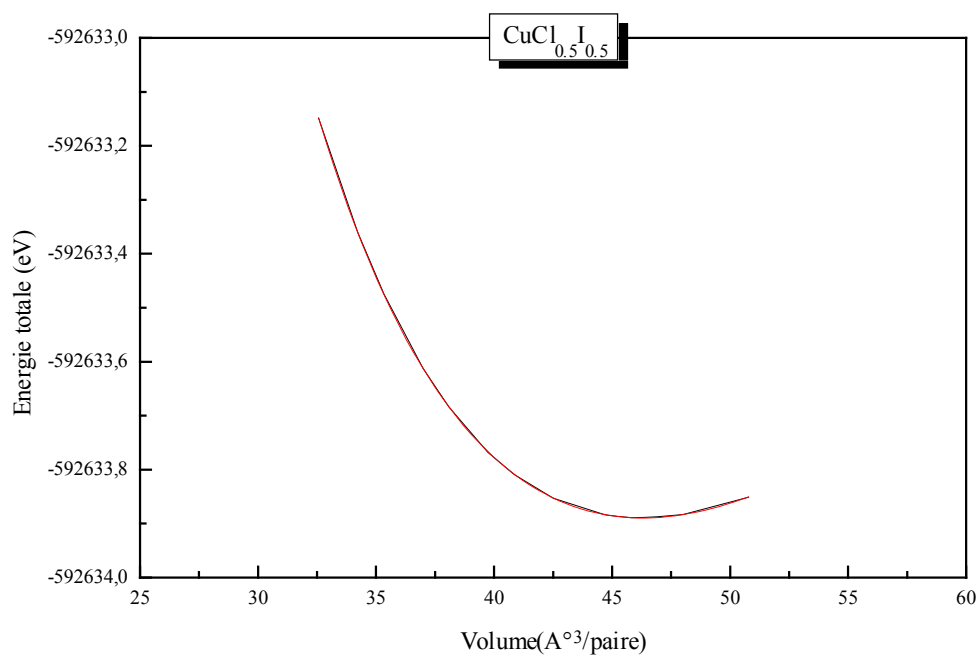


Figure (V.9) : Variation de l'énergie totale de $CuCl_xI_{1-x}$ (Zinc blende) en fonction du volume.

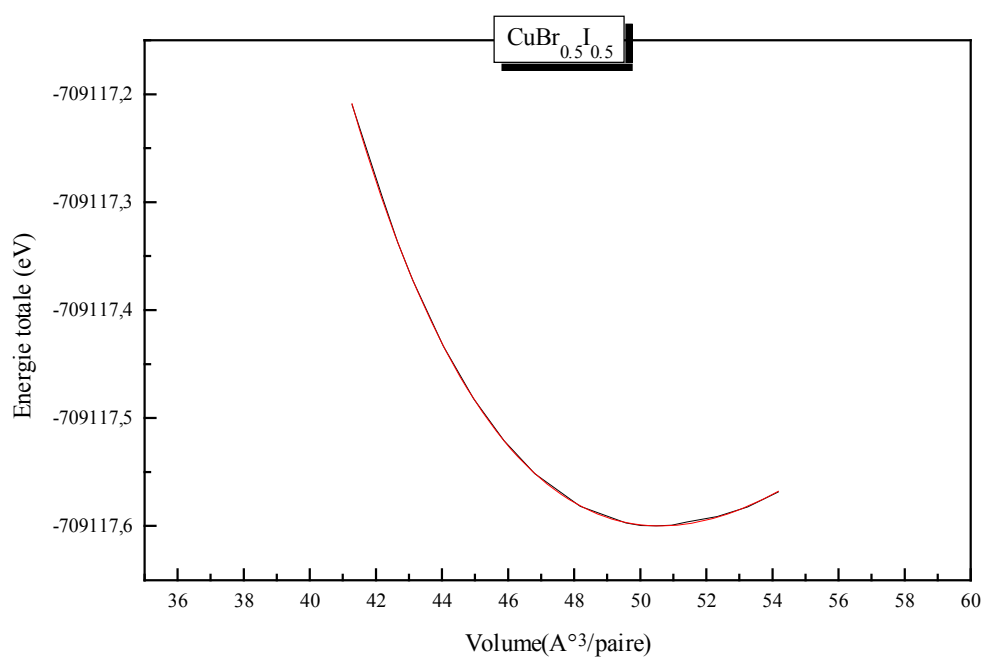


Figure (V.10) : Variation de l'énergie totale de $CuBr_xI_{1-x}$ (Zinc blende) en fonction du volume.

Le paramètre de bowing est dû au désordre chimique et structural de l'alliage. Afin d'étudier la nature de ce bowing de $CuCl_xBr_{1-x}, CuCl_xI_{1-x}$ et $CuBr_xI_{1-x}$ nous avons utilisé une nouvelle technique basée sur la variation du gap détaillée dans le paragraphe V.1. Nous avons tracé la structure de bandes pour les composés $CuCl, CuBr, CuI, CuCl_{0.5}Br_{0.5}, CuCl_{0.5}I_{0.5}$ et $CuBr_{0.5}I_{0.5}$ à l'équilibre et avec un pas de réseau moyen $a = a(x)$ {Figures (V.11), (V.12), (V.13), (V.14), (V.15) et (V.16)}. Les résultats montrent que les halogénures de cuivre possèdent un gap direct. Les gaps calculés de $CuCl, CuBr$ et CuI en phase zinc blende sont respectivement 0.538, 0.445 et 1.118 eV.

Le bowing total est obtenu à partir de l'équation (V.6). Les résultats sont donnés dans le tableau (V.6) et comparés avec des résultats expérimentaux et théoriques. La relaxation structurale est plus importante que la contribution de l'échange de charge et la contribution de la déformation volumique (VD) est faible.

Ainsi, nos résultats montrent que le bowing total est plus important pour $CuBr_xI_{1-x}$ (0.424) que pour $CuCl_xI_{1-x}$ (0.372), et très petit pour $CuCl_xBr_{1-x}$ (0.107), ce qui est en bon accord avec les résultats expérimentaux de Cardona [48].

Ces valeurs révèlent la possibilité de former des alliages stables, sans qu'il y ait apparition d'un grand désordre.

Selon Van Vechten et Bergstresser [51], l'origine du désordre est due à la différence d'électronégativité entre les atomes qui joue un rôle important dans la valeur du paramètre de désordre. Cette différence est variable pour les trois alliages. Dans le cas de $CuBr_xI_{1-x}$, elle est de 0.38 entre les atomes Br et I [52]. Elle est de 0.47 dans l'alliage $CuCl_xI_{1-x}$ entre les atomes Cl et I. Elle devient négligeable pour $CuCl_xBr_{1-x}$ avec une différence entre les atomes de Cl et Br de l'ordre de 0.09.

La relation entre le bowing C et l'électronégativité $\Delta\chi$ de l'échelle de Phillips [52] est exprimée par [53] :

$$C = \frac{5}{4} \Delta\chi \quad (V.7)$$

	b	b _S	b _{CE}	b _{VD}	Expériences [48]	Autres calculs	C=5/4Δχ
$CuCl_{0.5}Br_{0.5}$	0.107	0.129	0.016	-0.039	<0.2	0.109[49]	0.110
$CuCl_{0.5}I_{0.5}$	0.372	0.363	0.163	-0.153		0.398[50]	0.587
$CuBr_{0.5}I_{0.5}$	0.424	0.370	0.204	-0.150	0.44	0.419[15]	0.475

Tableau (V.6) : Décomposition du bowing optique du gap direct de $CuCl_{0.5}Br_{0.5}, CuCl_{0.5}I_{0.5}$ et $CuBr_{0.5}I_{0.5}$: Déformation de volume (VD), échange de charge (CE) et relaxation structurale (S).

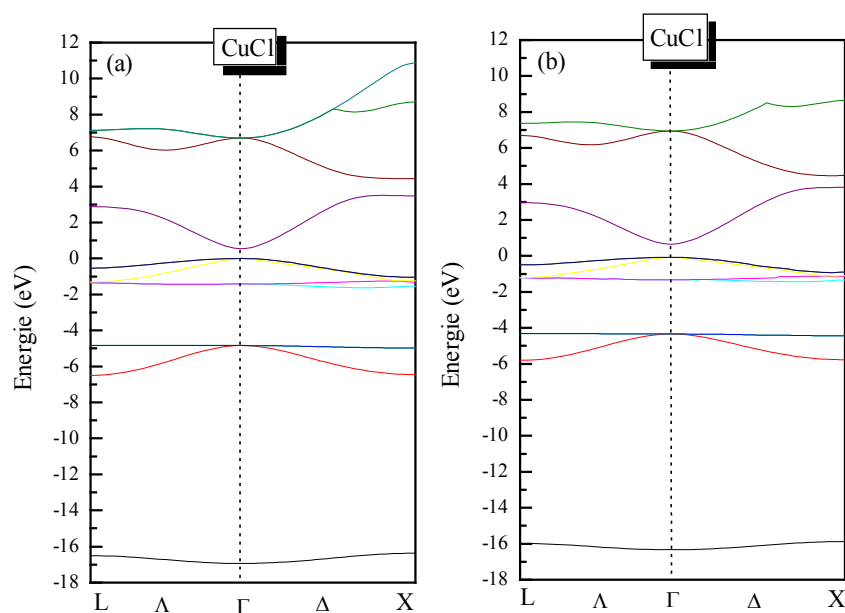


Figure (V.11) : Structure de bandes de CuCl :
(a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

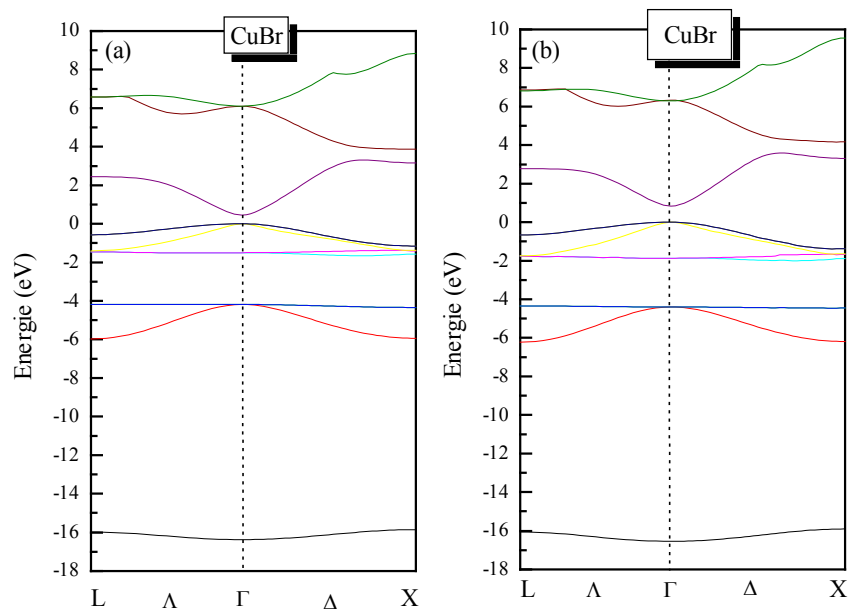


Figure (V.12) : Structure de bandes de CuBr :
(a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

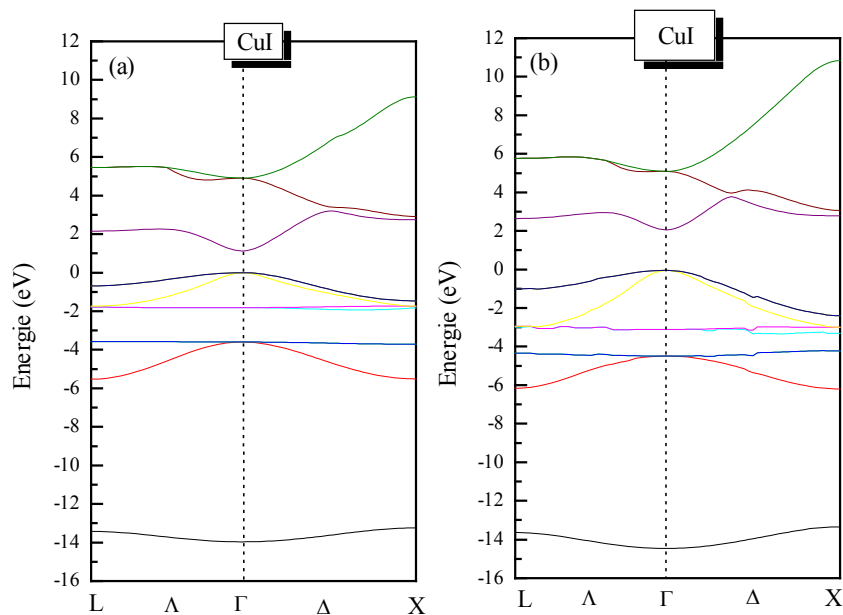


Figure (V.13) : Structure de bandes de CuI :
 (a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

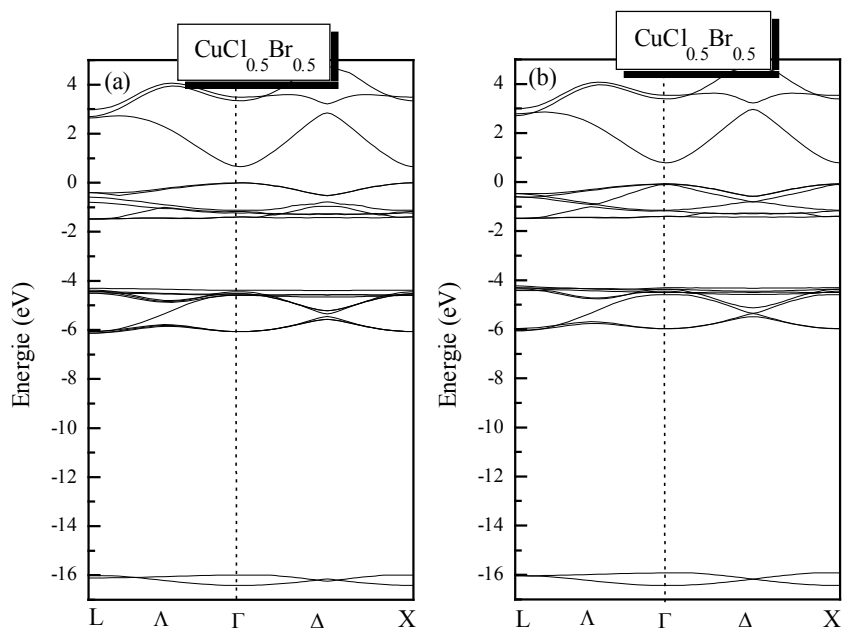


Figure (V.14) : Structure de bandes de $CuCl_{0.5}Br_{0.5}$:
 (a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

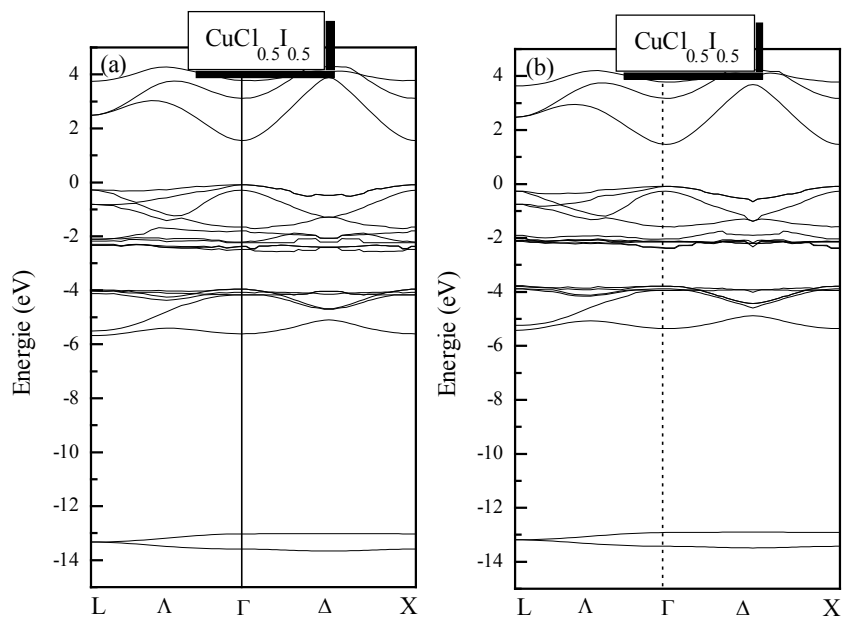


Figure (V.15) : Structure de bandes de $CuCl_{0.5}I_{0.5}$:
(a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

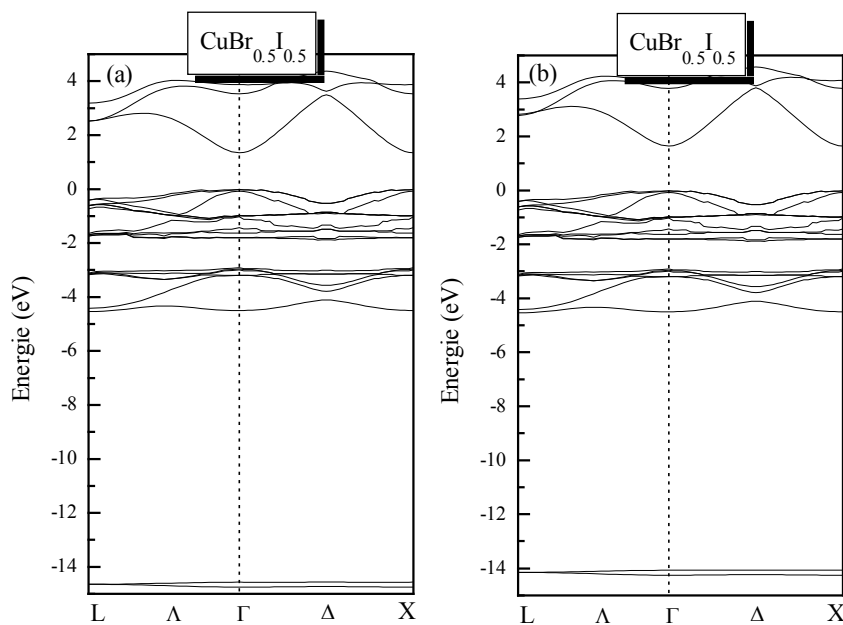


Figure (V.16) : Structure de bandes de $CuBr_{0.5}I_{0.5}$:
(a) A l'équilibre, (b) Au pas de réseau moyen $a=a(x)$.

Références

- [1] R. C. Vries, « *Cubic Boron Nitride* », A Handbook of Properties ; G Report N 72CRD178 (1972).
- [2] H. J. Meskimin, and P. I. Andreatch, J. Appl. Phys. **43**, 2944 (1972).
- [3] E. Knittle, R. M. Wentzcovitch, R. Jeanloz, and M. L. Cohen, Nature **337**, 349 (1989).
- [4] E. Knittle, R. B. Kaner, R. Jeanloz, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **51**, 12149 (1995).
- [5] A. R. Badzian, Mater. Res. Bull. **16**, 1385 (1981).
- [6] Ya T. Kosolalapova, B. N. Makarenko, T. I. Serebryakova, E. V. Prilutskii, O. T. Khorpyakov, and O. I. Chenysheva, Poroshk, Metall. **1**, 27 (1971).
- [7] R. B. Kaner, J. Kouvetakis, C. E. Warble, M. L. Sarrler, and N. Barlett, Mater. Res. Bull. **22**, 299 (1987).
- [8] A. Y. Liu, R. M. Wentzcovitch, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **39**, 1760 (1989).
- [9] A. Zaoui, M. Certier, M. Ferhat, O. Pagès, and H. Aourag, Phys. Stat. Sol (b) **212**, 307 (1999).
- [10] W. Sekkal, A. Zaoui, A. Laref, H. Aourag, and M. Certier, J. Phys. : Condens. Matter **11**, 3875 (1999).
- [11] K. Endo, K. Yamamoto, and K. Deguchi, J. Phys. Chem. Solids **54**, 357 (1993).
- [12] K. Endo, K. Yamamoto, and K. Deguchi, J. Phys. Chem. Solids **54**, 15 (1993).
- [13] K. Endo, and T. Fujito, Bull. Chem. Soc. Jpn. **63**, 1860 (1990).
- [14] A. Goldmann, Phys. Stat. Sol (b) **81**, 9 (1977).
- [15] B. Bouhafs, H. Heireche, W. Sekkal, H. Aourag, M. Ferhat and M. Certier, Phys. Stat. Sol (b) **209**, 339 (1998).
- [16] B. Bouhafs, M. Ferhat, M. Certier, H. Aourag, J. Phys. Chem. Solids **59**, 759 (1998).
- [17] G.P. Srivastava, J.L. Martins and A. Zunger, Phys. Rev. B **31**, 2561 (1985).
- [18] J.E. Bernard and A. Zunger, Phys. Rev. B **34**, 5992 (1986).
- [19] S-H. Wei, L.G. Ferreira, J.E. Bernard and A. Zunger, Phys. Rev. B **42**, 9622 (1990).
- [20] S-H. Wei and A. Zunger, Phys. Rev. B **43**, 1662 (1991).
- [21] R.H. Parmenter, Phys. Rev. **97**, 587 (1955).
- [22] S. Krishnamurthy, A. Sher and A.B. Chen, Phys. Rev. Lett. **55**, 320 (1985).

- [23] j.c. Wooley, « *Compound Semiconductors* » edited by R.K. Willardson and H.L. Goering (Reinhold, New York, 1962), p.3.
- [24] 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).
- [25] P. Rodriguez-Hernandez, M. Gonzalez-Diaz, and A. Munoz, Phys. Rev. B **51**, 14705 (1995).
- [26] V. A. Pesin, Sverktverd, Mater. **6**, 5 (1980).
- [27] P. E. Van Camp, V. E. Van Doren, and J. T. Devreese, Phys. Stat. Sol. (b) **146**, 573 (1988).
- [28] W. Sekkal, B. Bouhafs, H. Aourag, and M. Certier, J. Phys. : Condens. Matter **10**, 4975 (1998).
- [29] R. Wentzcovitch, K.J. Chang and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **34**, 1071 (1986).
- [30] R. Wentzcovitch, M. L. Cohen, and Pui K. Lam, Phys. Rev. B **36**, 6058 (1987).
- [31] K. Karch, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **56**, 7404 (1997).
- [32] I. Gorczyca and N. E. Christensen, Physica B **185**, 410 (1993).
- [33] W. Kaiser and W.L. Bond, Phys. Rev. **115**, 857 (1959).
- [34] P.E. Van Camp, V.E. Van Doren and J.T. Devreese, Phys. Rev. B **34**, 1314 (1986).
- [35] M. Grimsditch and A. Ramdas, Phys. Rev. B **11**, 3139 (1975).
- [36] H.J. McSkimin and P. Andreatch, J. Appl. Phys. **43**, 2944 (1972).
- [37] J. Donohue, « *The Structure of Elements* », New York : Wiley, (1974).
- [38] M.L. Cohen, Phys. Rev. B **32**, 7988 (1985).
- [39] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [40] S.Hule and D. A. Keen, Phys. Rev. B **50**, 5868 (1994).
- [41] H-C. Hsueh, J. R. Maclean, G. Y. Guo, M-H Lee, S. J. Clark, G. J. Ackland and J. Crain, Phys. Rev. B **51**, 12216 (1995).
- [42] W. Sekkal, H. Aourag and M. Certier, J. Phys. Chem Solids, **59**, 8, 1293(1998).
- [43] W. Sekkal, A. Zaoui, A. Laref, M. Certier and H. Aourag Phys. J. Phys. Condens. Matter., submitted (2000).
- [44] G.J. Piermarini, F.A. Mauer, S. Block, A. Jayaraman, T.H. Geballe and G.W. Hull, solid state commun, **32**, 275(1979).
- [45] M. Hoffman, S. Hull, and D. A. Keen, Phys. Rev. B **51**, 12022(1995).
- [46] W. Sekkal, A. Zaoui, A. Laref, H. Aourag and M. Certier , superlattices and Microstructures, soumis (2000).

- [47] W. Sekkal, A. Laref, A. Zaoui, H. Aourag and M. Certier, Molecular simulation, soumis (2000).
- [48] M. Cardona, Phys. Rev. **129**, 69(1963).
- [49] H. Heireche, B. Bouhafs, H. Aourag, M. Ferhat and M. Certier, J. Phys. Chem Solids, **59**, 997(1998).
- [50] B. Bouhafs, H. Heireche, W. Sekkal, H. Aourag, and M. Certier, Phys. Letters A **240**, 257 (1998).
- [51] J. A. Van Vechten and J. K. Bergstresser, Phys. Rev. B **1**, 3351 (1970).
- [52] J.C. Phillips, « *Bonds and Bands in semiconductors* » (Academic, New York 1973).
- [53] T. Tinoco, M. Quintero and C. Rincon, Phys. Rev. B **44**, 879 (1985).
- [54] F. El Haj Hassan, A. Zaoui and M. Certier, Solid State commun. Soumis (2000).
- [55] A. Zaoui, F. El Haj Hassan and M. Certier, Physics Letters A. Soumis (2000).