

## Conclusion

Ce travail est une contribution à l'étude des propriétés structurales et électroniques des semiconducteurs et alliages à base de bore et de cuivre par la méthode FP-LAPW.

Les composés à base de bore BN, BP, BAs et BSb cristallisent dans la structure zinc blende. Nous avons étudié la stabilité relative des phases NaCl (rocksalt) et  $\beta$ -Sn sous l'effet de pression hydrostatique élevée. Nous avons confirmé que la nouvelle phase pour ces composés ne peut être que la structure NaCl bien que la contribution covalente des BP, BAs et BSb soit plus forte que pour les autres semiconducteurs III-V.

Nous avons également étudié la densité de charge de valence des BN, BP, BAs et BSb en phase zinc blende et à la pression de transition structurale. Nos résultats montrent que, dans le cas de BN, la densité de charge est fortement localisée dans la région de l'atome d'azote et que le transfert de charge de B vers N augmente avec la pression. Dans le cas des BP, BAs et BSb, cette situation est inversée. Le transfert de charge a lieu de l'atome d'azote vers l'atome de bore et la distribution de charge est plus homogène entre les atomes. Le comportement de BN sous l'effet de la pression est semblable à celui de la majorité des semiconducteurs de type III-V. Par contre, le comportement des BP, BAs et BSb s'explique en raison de transfert de charge inversé sous l'effet de la pression.

Notre calcul de la structure électronique de BP, BAs et BSb indique la présence d'un gap fondamental indirect près de X ( $\Gamma_{15V} \rightarrow \Delta_{\min}$ ) et d'un gap direct suivant  $\Gamma_{15V} \rightarrow \Gamma_{15c}$ , tandis que pour le BN nous avons trouvé un gap fondamental indirect suivant  $\Gamma_{15V} \rightarrow X_{1c}$ . Ces résultats sont en accord avec ceux de Wentzcovitch.

Nous avons calculé les densités d'états totales et partielles (DOS) des BP, BAs et BSb. Nous avons pu distinguer deux régions de valence importantes dues à une hybridation de type  $sp^3$ . Une première région au voisinage de l'origine, due à une participation forte de l'orbitale p, et une seconde, plus profonde due à l'orbitale s. La bande de conduction résulte d'une présence majoritaire de l'orbitale p.

Nous avons ensuite étudié les propriétés structurales des halogénures cuivreux (CuCl, CuBr, CuI) ainsi que leurs propriétés électroniques (structure de bandes, densité de charge, ionicité et masses effectives). L'étude détaillée de la densité d'état totale et partielle nous a permis de déterminer le type d'hybridation des orbitales et de préciser la participation de chaque bande dans la liaison. Parmi toutes les valeurs calculées des constantes élastiques mentionnées la bibliographie, nos valeurs sont les plus proches de l'expérience.

Notre étude a établi la stabilité et les propriétés physiques des alliages  $C_x(\text{BN})_{1-x}$ ,  $\text{CuCl}_x\text{Br}_{1-x}$ ,  $\text{CuCl}_x\text{I}_{1-x}$  et  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ .

La rigidité de l'alliage  $C_x(\text{BN})_{1-x}$  est plus proche du carbone que de celle du nitrure de bore. Nous avons utilisé pour la première fois la technique de Zunger pour étudier l'origine du bowing optique. La contribution chimique (transfert de charge) est plus importante que les

effets de structure et de déformation volumique par suite de la grande différence d'ionicté entre les deux composés parents. L'étude structurale du carbone (pas du réseau et module de rigidité) est en bon accord avec les expériences.

En ce qui concerne les alliages à base de cuivre, nous avons pu également calculer le bowing par la technique de Zunger. Le paramètre de désordre de  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$  est plus important que celui de  $\text{CuCl}_x\text{I}_{1-x}$  alors que celui de  $\text{CuCl}_x\text{Br}_{1-x}$ , est très petit.

En conclusion, les calculs présentés dans cette thèse ont l'originalité d'être effectués avec la méthode FP-LAPW. La fiabilité de nos résultats montre que cette méthode est bien, en général, un outil efficace pour la compréhension, le calcul et la prédiction des propriétés des matériaux. En particulier, la méthode FP-LAPW s'est révélée bien adaptée pour l'étude des propriétés des matériaux possédant une hybridation de type p-d et à caractère ionique prononcé tels que les halogénures de cuivre. En outre, elle a aussi donné de bons résultats pour les matériaux à base de bore où les états p sont absents.