الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Université Sétif 1, Ferhat Abbas
Faculté des Sciences

جامعة سطيف 1، فرحات عباس
كلية العلوم

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté par

OSMANI SAFIA

Pour l'obtention du diplôme de

MASTER

Filière : Physique fondamentale

Spécialité : Physique de Matériaux

Étude ab initio des propriétés structurales, électroniques et optiques du BeSe dans les phases zinc blende et NiAs

Soutenue publiquement le : 24/06/2026

DEVANT LE JURY :

PRESIDENT : AKLOUCHE NADJET

ENCADREUR : Tanto Amel

EXAMINATEUR : MELLOUL AHLEM

ANNEE UNIVERSITAIRE : 2025/2026

Sommaire

Introduction générale 1

Chapitre I : Généralités sur le BeSe et les semi-conducteurs II-VI

Introduction 4

1. Les semi-conducteurs II-VI 4

2. Propriétés des matériaux semi-conducteurs II-VI 6

2.1. Propriétés structurales 6

2.1.1. Structure zinc-blende 6

2.1.2. Structure hexagonale (Wurtzite) 7

2.1.3. Structure rocksalt 8

2.2. Propriétés électroniques 9

2.3. Propriétés optiques 10

3. Applications des matériaux II-VI 13

4. Le séléniure de béryllium BeSe 14

4.1. Structure cristalline 14

4.2. Propriétés électroniques et optiques 15

4.3. Applications du BeSe 16

Conclusion 16

Chapitre II : La théorie de la Fonctionnelle de la Densité

Introduction 20

1. L'équation de Schrödinger 20

1.1. Approximation de Born-Oppenheimer 21

1.2. Approximation de Hartree 22

1.3. Approximation de Hartree-Fock 24

2. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) 25

2.1. Les équations de Kohn-Sham 27

2.2. Fonctionnelles d'échange et de corrélation 28

2.2.1. L'approximation de la densité locale (LDA) 28

2.2.2. Approximation du gradient généralisé (GGA) 29

2.3. Les pseudopotentiels 29

2.3.1. Méthode de Phillips et Kleinman 30

2.4. Choix du potentiel et des bases 31

2.4.1. La base d'ondes planes 31

2.4.2. Échantillonnage de la zone de Brillouin 32

3. Présentation générale du module CASTEP 32

Chapitre III : Résultats et discussions

Introduction 37

1. Détails de calcul 37

2. Résultats et discussions 40

2.1. Propriétés de l'état fondamental 40

2.1.1. Optimisation de la structure cristalline 41

2.1.2. Stabilité énergétique 42

2.1.3. Détermination du module de compressibilité 43

2.1.4. Transition de phase 44

2.3. Propriétés électroniques 45

2.3.1. Structure de bandes électroniques ..... ……45

2.3.2. Densité totale et partielle 48

2.4. Propriétés optiques 51

2.4.1. Le coefficient d'absorption 51

2.4.2. La réflectivité 52

2.4.3. L'indice de réfraction 53

2.4.4. Fonction diélectrique 54

2.4.5. La fonction de perte 55

2.4.6. Conductivité 56

Conclusion générale 61

Abstract

This thesis presents an **ab initio** study of the structural, electronic and optical properties of **beryllium selenide (BeSe)** in the **Zinc Blende** and **NiAs** phases, carried out using density functional theory (**DFT**) with the **GGA-PBE** approximation, as implemented in the **CASTEP** code. Structural optimization showed that the Zinc Blende phase is the most stable under ambient pressure, with lattice parameters and a bulk modulus ($B_0 \approx 92$ GPa) in good agreement with the literature, while a phase transition to the NiAs structure occurs under high pressure (≈ 55 GPa). The electronic study reveals semiconducting behavior in both phases, with an indirect Γ→X band gap of **2.74 eV** for Zinc Blende and **0.60 eV** for NiAs, with valence bands dominated by Se-4p orbitals and conduction bands by Be-2s/Se-p orbitals, reflecting covalent hybridization. Optical analysis (absorption, reflectivity, refractive index, dielectric function, loss function and optical conductivity) highlights strong activity in the **ultraviolet** region, confirming the potential of BeSe for UV optoelectronic applications.

Keywords: DFT · CASTEP · BeSe · Semiconductors II-VI.

Résumé

Ce mémoire présente une étude **ab initio** des propriétés structurales, électroniques et optiques du composé **séléniure de béryllium (BeSe)** dans les phases **Zinc Blende** et **NiAs**, réalisée par la théorie de la fonctionnelle de la densité (**DFT**) avec l'approximation **GGA-PBE**, implémentée dans le code de calcul **CASTEP**. L'optimisation structurale a montré que la phase Zinc Blende est la plus stable à pression ambiante, avec des paramètres de maille et un module de compressibilité ($B_0 \approx 92$ GPa) en bon accord avec la littérature, tandis qu'une transition de phase vers la structure NiAs apparaît sous haute pression (≈ 55 GPa). L'étude électronique révèle un caractère semi-conducteur dans les deux phases, avec un gap indirect Γ→X de **2.74 eV** pour la Zinc Blende et **0.60 eV** pour NiAs, les bandes de valence étant dominées par les orbitales Se-4p et les bandes de conduction par les orbitales Be-2s/Se-p, traduisant une hybridation covalente. L'analyse optique (absorption, réflectivité, indice de réfraction, fonction diélectrique, fonction de perte et conductivité optique) met en évidence une forte activité dans le domaine **ultraviolet**, confirmant le potentiel du BeSe pour les applications optoélectroniques UV.

Mots-clés : DFT · CASTEP · BeSe · Semiconducteurs II-VI

الملخص

تقدّم هذه المذكرة دراسة من المبادئ الأولى (ab initio) للخصائص البنيوية والإلكترونية والبصرية لمركب سيلينيد البيريليوم (BeSe) في الطورين Zinc Blende وNiAs، باستخدام نظرية دالة الكثافة (DFT) مع تقريب GGA-PBE، المُنفّذة في برنامج CASTEP. أظهر التحسين البنيوي أن طور Zinc Blende هو الأكثر استقراراً تحت الضغط الجوي، بمعطيات شبكية ومعامل انضغاطية ($B_0 \approx 92$ GPa) متوافقة مع الدراسات السابقة، بينما يحدث تحول طوري نحو بنية NiAs تحت ضغط مرتفع (≈ 5DOS5 GPa). كشفت الدراسة الإلكترونية عن طابع شبه ناقل في الطورين، مع فجوة طاقة غير مباشرة Γ→X تساوي 2.74 eV لطور Zinc Blende و0.60 eV لطور NiAs، حيث تسيطر مدارات Se-4p على نطاق التكافؤ ومدارات Be-2s/Se-p على نطاق التوصيل، مما يعكس تهجيناً تساهمياً. أظهر التحليل البصري (الامتصاص، الانعكاسية، معامل الانكسار، الدالة العازلة، دالة الفقدان، والناقلية البصرية) نشاطاً قوياً في المنطقة فوق البنفسجية، مؤكداً إمكانية استخدام BeSe في التطبيقات الكهروضوئية بالأشعة فوق البنفسجية.

الكلمات المفتاحية: نظرية دالة الكثافة (DFT)• برنامج CASTEP • سيلينيد البيريليوم (BeSe) • أشباه الموصلات II-VI·