



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home : www.cu-relizane.dz

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



Open
Access

Etude structurales et électroniques du ZnO pure et dopé par le Fluor

BELOUFA NABIL L^{a*}, MEBARKI DJALLEL^a, CHERCHEB YUCEF^c, BEKHEIRA SAMIR^b

^a Laboratoire de Micro et Nanophysiques (LaMiN), ENP, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Oran

^b Laboratoire de Micro des Matériaux (LabMat), ENP, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Oran

^c Centre universitaire de Relizane, Département des sciences exacte , BP 48000, Bormadia, 048000 Relizane, Algeria

RESUME

En utilisant des ondes phases augmentées linéairement (FP-LAPW), basé sur la théorie de la densité DFT, nous avons calculé les propriétés structurales, électroniques et optiques du composé ZnO. Nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA et mbj dans certaines phases et nous avons déterminé la phase la plus stable, Nous avons dopé l'oxyde de zinc avec du fluor à différents taux et le calcul a été effectué en utilisant Wien2K.

Les résultats ainsi obtenus étaient confrontés aux données expérimentales issues de la littérature ainsi qu'avec d'autres résultats des travaux théoriques.

Article history:

Received 18 April 2020

Received in revised form ... 19 April 2020...

Accepted 10 June 2020

Keys word: DFT, FP-LAPW, Wien2k, ZnO :F, mbj, GGA.

Copyright © 2020 - All rights reserved

1. Introduction

Les oxydes transparents conducteurs (OTC) sont des matériaux qui présentent une double propriété intéressante une conductivité électrique et une transparence dans le visible, par conséquent, font constamment des candidats idéaux pour des applications en optoélectronique, en photovoltaïque, médicale ou encore des fenêtres électro-chromiques.

Nous avons choisi d'étudier un TCO qui possède d'excellentes propriétés, c'est l'Oxyde de Zinc (ZnO), c'est l'un des matériaux les plus prometteurs, puisque il a un gap très large, faible toxicité, activité antibactérienne, disponibilité et il est caractérisé par une stabilité thermique, mécanique et chimique. Par conséquent les travaux de recherche sur ce type de matériaux sont de plus en plus nombreux.

Le dopage est l'un des moyens pour atteindre une performance élevée, effectivement, les recherches ont prouvé que le ZnO dopé par Ga, Al et Si présente une conductivité électrique élevée sans perturbée significativement la transmittance optique . Plusieurs études montrent que la substitution de l'atome d'oxygène (O) par l'atome de Fluor (F), conclus à des résultats intéressants, effectivement, il peut réduire les défauts native du ZnO.

2. Matériel et Méthodes

Nous avons utilisé le code (Wien 2K) [1] (Wien pour le nom de la ville de Wien (Vienne) et 2K pour 2000 l'année de lancement de la version wien2k) l'implémentation de la méthode FP-LAPW . Ce code permet de calculer les propriétés

* beloufa.nabil@gmail.com

physiques comme la structure de bande électronique, la densité d'états électroniques et l'énergie totale d'un cristal périodique en se basant sur la connaissance du groupe spatial et le numéro atomique (Z) du matériau considéré. Pour le calcul du potentiel d'échange et de corrélation nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA (PBE96) [2]. En ce qui concerne la région des sphères muffin-tin nous avons utilisé pour assurer la Convergence des harmoniques sphériques $l_{max}=10$, les fonctions d'ondes dans la région interstitielle sont étendue en ondes planes avec une énergie de coupure $k_{max}= 9RMT$ (où RMT est le petit rayon des sphères muffin –tin. Le critère de convergence des cycles auto cohérents (self-consistent) n'est atteinte que lorsque l'énergie totale est stable à 0.1 mRy[3]. Nous avons pris comme oxydes métalliques des semiconducteurs, Le ZnO qui présente des caractéristiques physiques importantes, telle que la largeur de leurs bandes interdites qui fait de ZnO un candidat promoteur pour les applications dans le domaine de l'optoélectronique et les photovoltaïques. Dans cette partie, nous présentons les propriétés structurales et électroniques du ZnO dans les phases Rock-Salt (B1), CsCl (B2), ZincBlende (B3) et Wurtzite (B4) .

3. Résultats et discussions

3.1 ZnO pure

3.1.1 Propriétés structurales

Pour déterminer les propriétés statiques d'équilibre du ZnO, à savoir le paramètre du réseau à l'équilibre a_0 , le module de compressibilité B et sa dérivée B' , on a effectué un calcul auto cohérent de l'énergie totale pour différentes valeurs du paramètre du réseau. Ces paramètres sont pris au voisinage du paramètre du réseau expérimental. Le paramètre du réseau à l'équilibre est calculé en ajustant la courbe de l'énergie totale obtenue à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan[4] donnée par :

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{B_0 V}{B'(B'-1)} \right] \cdot \left[B' \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad \text{Eq : I}$$

Où V_0 est le volume de la maille unitaire à l'état fondamental. le module de compressibilité B et sa dérivée B' sont à leur tour liés au volume de la maille unitaire .

L'optimisation structurale du ZnO dans les trois structures « B3, B1, B2 » se fait en calculant l'énergie totale en fonction du volume. Pour la phase Wurtzite (B4) du ZnO, l'optimisation structurale s'effectue en calculant l'énergie totale en fonction des trois variables u (décalage entre le cation et l'anion), c/a , et V .

3.2 Recherche de la stabilité structurale du ZnO

Les propriétés structurales a été effectué en utilisant la GGA sont obtenues par une minimisation de l'énergie en respectant les critères de convergence. Les paramètres du réseau à l'équilibre, le module de compressibilité B et sa dérivée B' sont calculées à partir de l'équation d'état du Murnaghan. Le composé ZnO cristallise dans quatre phases différentes: la phase NaCl (B1), la phase CsCl (B2), la phase zinc-blende (B3) et la phase wurtzite (B4). La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les quatre Phase du ZnO est illustrée à Fig (I). Les paramètres structuraux de maille a_0 , le module de compression B ainsi que sa dérivée B' et le volume minimal V_0 sont calculées par l'approche (GGA) et comparés avec des résultats expérimentaux et théoriques. Tous les résultats sont regroupés dans les tableaux suivant. Les résultats sont regroupés dans les tableaux (1).

Phase	Paramètres	Nos Calculs	Autres Calculs	Expérimental
Rocksalt NaCl(B1)	$E_{coh}(eV/cell)$	6.83	7.61 ^b , 6.91 ^c , 6.2 ^d	7.61 ^b , 6.2 ^d
	B (GPa)	162.60	170.86 ^a , 161.45 ^b , 167.8 ^c , 222 ^d	228 ^a , 202.5 ^b , 194 ^c , 228 ^d
	B'	4.92	4.18 ^a , 4.66 ^b , 5.3 ^c , 4 ^d	4 ^a , 3.54 ^b , 4.8 ^c , 4 ^d
	V (Å) ³	20.35	20.39 ^b , 20.3 ^d	19.60 ^b
CsCl(B2)	a (Å)	4.334	4.334 ^a , 4.334 ^c , 4.33 ^d	4.271 ^a , 4.271 ^d
	$E_{coh}(eV/cell)$	5.68	5.1 ^d	
	B (GPa)	156.36	158 ^d	
	B'	4.81	4.1	
Zincblende ZnS (B3)	V (Å) ³	19.443	19.4 ^d	
	a (Å)	2.689	2.69 ^d	
	$E_{coh}(eV/cell)$	7.10	7.88 ^b , 7.19 ^c , 6.5 ^d	6.2 ^d
	B (GPa)	134.58	133.73 ^b , 131.6 ^c , 116 ^d , 129.228 ^e	194 ^c , 228 ^d
Wurtzite(B4)	B'	4.65	3.44 ^a , 4.79 ^b , 3.3 ^c , 4.3 ^d , 4.43 ^e	4.8 ^c , 4 ^d
	V (Å) ³	24.91	24.86 ^b , 24.6 ^d	24.65 ^b
	a (Å)	4.638	4.616 ^a , 4.627 ^c , 4.61 ^d , 4.6227 ^e	4.271 ^a , 4.62 ^d , 4.47 ^e
	E_{coh} eV/cell)	7.12	7.905 ^b , 7.20 ^c	7.52 ^b , 7.52 ^c
	B (GPa)	134.74	135.05 ^a , 129.73 ^b , 131.5 ^c	181 ^a , 142.6 ^b , 181 ^c , 181 ^e
	B'	4.44	4.9 ^a , 4.68 ^b , 4.2 ^c , 4.3 ^d , 4.424 ^e	4a, 3.3.6 ^b , 4 ^c , 4 ^e
	V (Å) ³	24.95	24.9.39 ^b , 24.6 ^d	23.819 ^b ,
	a (Å)	3.299	3.281 ^a , 3.283 ^c , 3.294 ^e	3.258 ^a , 3.258 ^c , 3.258 ^e ,
	c (Å)	5.294	5.256 ^a , 5.309 ^c , 5.316 ^e	5.22 ^a , 5.220 ^c , 5.22 ^e , 5.218 ^g
	c/a	1.604	1.6043 ^b , 1.603 ^f	1.6021 ^b , 1.601 ^f
u	0.379	0.3856 ^b , 0.3786 ^c , 0.378 ^e	0.3823 ^b , 0.382 ^c , 0.382 ^e	

Références: a) Réf. [5], b) Ref.[6], c), Réf. [7], d) Réf. [8],e) Réf. [9], f) Réf. [10], g) Réf. [11]

Tableau 1– Les propriétés structurales du ZnO (B4, B3, B2, B1).Le paramètre du réseau d'équilibre a est relié au volume d'équilibre

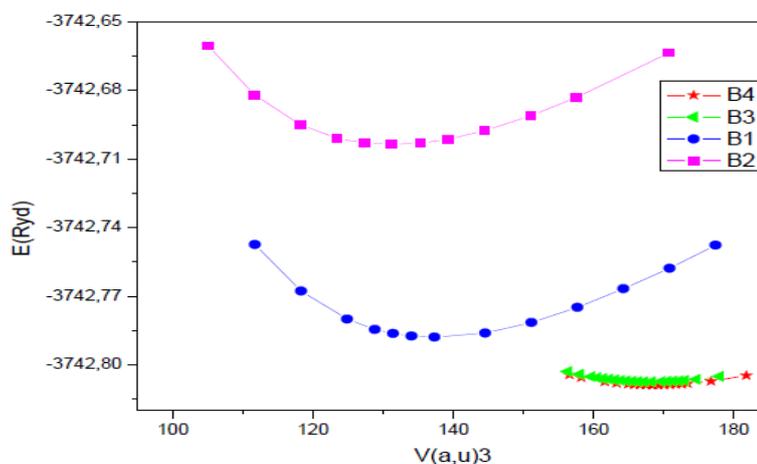


Figure 1– La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les quatre structures, en utilisant la GGA.

La variation de l'énergie totale en fonction du volume en utilisant la GGA pour les quatre structures est donnée dans la figure 1. On remarque que la structure wurtzite (B4) est une énergie minimale donc elle est la plus stable.

Nos valeurs pour le ZnO dans les quatre structures sont en générales en bon accord avec les autres calculs. A partir de la figure 1, on remarque que la structure la plus stable est la structure Wurtzite. L'ordre des phases selon leurs énergies sont d'après cette figure:

$E_{B4} < E_{B3} < E_{B1} < E_{B2}$. Nous remarquons d'après le Tableau 1 que nos résultats pour les paramètres du réseau sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques de la littérature. Pour le module de compressibilité B et sa dérivée première par rapport à la pression B' , nos résultats sont dans le même ordre avec les résultats disponibles.

On note que l'approximation de GGA corrige l'énergie de cohésion par rapport à LDA, mais surestime le paramètre de réseau et aussi elle sous-estime le module de compressibilité contrairement à LDA. Cependant, il faut se rappeler que seules les phases qui se trouvent à gauche de la phase la plus stable B4 peuvent être concernées par les transitions de phase par l'effet de pression, car cette dernière a pour effet de réduire le volume.

3.3 Propriétés électroniques

3.3.1 Structures de bandes

Nous avons effectué le calcul scalaire relativiste (sans spin-orbite) de la structure de bandes de ZnO dans la phases (B4) en utilisant la méthode FP-LAPW.

La figure 2 correspond aux structures de bandes de composé ZnO dans la phase la plus stable (wurtzite (B4)) qui appartient au groupe de symétrie P63mc, Le maximum et minimum de la bande de valence et de conduction respectivement se trouve au point Γ ; donc on a une transition directe, la dispersion des bandes est similaire à celle des résultats trouvés par les travaux théoriques et expérimentales. Les gaps d'énergie (directe et indirecte) et les largeurs des bandes de valence sont classés dans le tableau 2. A partir de ce tableau 2 on constate que la partie inférieure des bandes de valence est dominée par l'état (2s) de l'atome non métal (oxygène) avec une largeur égale à 1.155 eV pour une dispersion maximale entre Γ et M pour la phase la plus stable. Pour la position de l'état (3d) du cation Zn considérée localisée influencée par le poids de dix électrons, elle est relativement proche du maximum de la bande de valence dérivée du l'anion (p), et elle est estimée de -5.8397 eV qui est très comparable avec les calculs prédits par FPLMTO (- 5.1eV) [12], pseudo potentiel (-5.21eV) [13], GW (-6.4eV) [14] et la valeur expérimentale (-6.95eV) [15].

phase(B4)			Nos résultats		Travaux Théoriques	Exp	
Gap d'énergie (eV)	Direct	$(\Gamma \rightarrow \Gamma)^*$	GGA	mbj	Autres calculs 0.759 ^b , 2.683 ^b , 0.830 ^b , 2.647 ^b , 0.81 ^c , 0.80 ^d , 0.68 ^e , 0.75 ^e , 0.76 ^e , 0.73 ^e , 0.55 ^e , 1.57 ^f , 0.783 ^g , 1.80 ^g	3.44 ⁱ	
		(A→A)	3.63	5.32			3.90 ^c , 3.91 ^d
		(M →M)	6.19	8.20			6.73 ^c , 6.79 ^d
	Indirect	($\Gamma \rightarrow A$)	3.23	5.03	3.48 ^c		
		($\Gamma \rightarrow M$)	5.45	7.59	1.69 ^c		
Largeur des bandes (eV)		$\Delta E_{BV}(s)$	1.13	0.70			
		$\Delta E_{BV}(p)$	4.19	3.36			
		Bande de Valence-totale	17.79	18.82	18.06 ^c , 18.25 ^d		
		Zn-3d (moyenne)	4.4	3.59			
		Gap antisymétrique	10.29				

* : désigné le gap fondamental

Références: b) Réf. [16] c) Réf.[17] d) Réf.[18] e) Réf.[19] f) Réf. [6] g) Réf.[10] i) Réf.[20]

Tableau 2– résumés des différentes valeurs des gaps d'énergie et la largeur de la bande de valence dans la structure ZnO (B4).

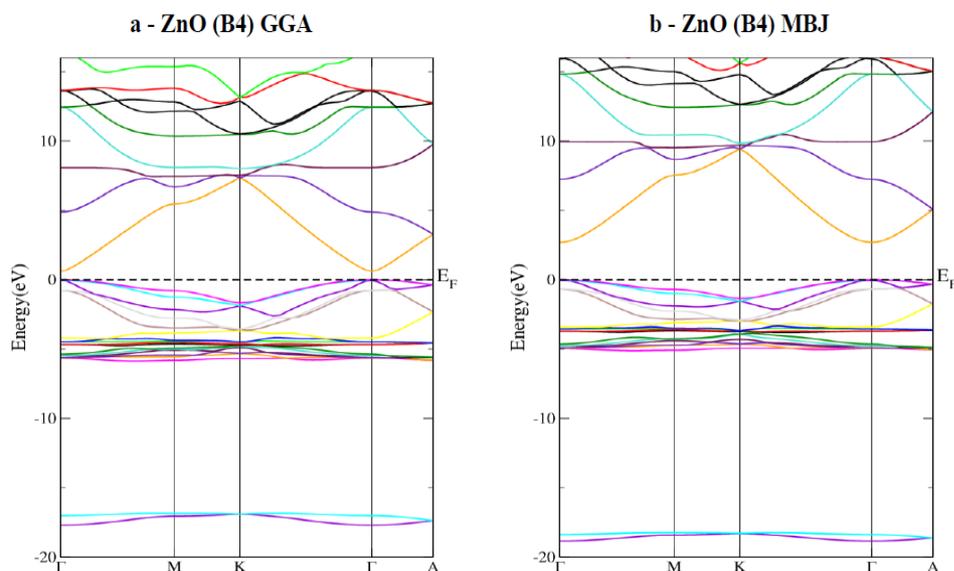


Figure 2– La structure de bandes du ZnO dans la phase Wurtzite (B4), calculés par : (a) GGA et (b) mbj.

Selon les figures (Fig 2) on voit que le composé ZnO appartient à la famille des semiconducteurs avec des bandes interdites directes. On voit aussi que les valeurs calculées des bandes interdites de ce composé en utilisant les méthodes GGA et mbj coïncide approximativement avec les résultats théoriques.

On voit que l'utilisation de mbj fait une bonne amélioration dans les valeurs des bandes interdites comparé avec celles des GGA.

3.3.2 Densités d'état total et partiel (DOS)

La densité d'états de ces composés est calculée par la méthode du Tétraèdre [16] qui nécessite un grand nombre de points spéciaux (on a utilisé 273 points spéciaux dans la zone de Brillouin pour le wurtzite (ZnO)).

Le DOS total et les PDOS (partiels) sont montrés sur la figure 3-1-2 (2D et 3D).

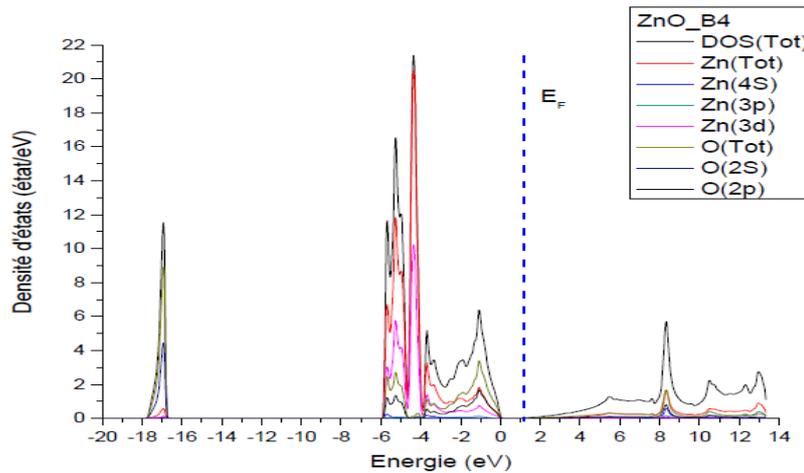


Figure 3.1– Densités d'états totale (DOS) et partielle de ZnO en phase wurtzite (B4)

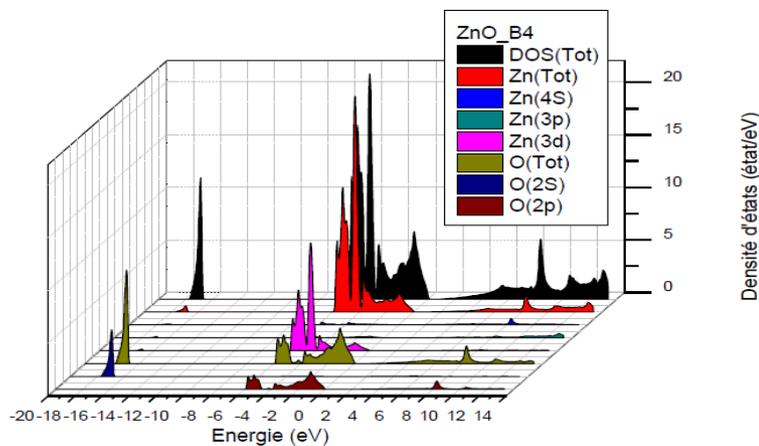


Figure 3. 2– Densités d'états totale (DOS) et partielle de ZnO en phase wurtzite (B4) (3D)

La BV est divisée en trois régions:

-La première région s'étale entre -20 eV et -16 eV est dominée principalement par la contribution des états (2s) de l'atome O.

-La deuxième région s'étale entre -6 eV et -4 eV montre une forte contribution de l'orbitale (3d) de l'atome Zn est dominante proche du maximum de la bande de valence avec une très faible contribution de orbitale (2p) de l'atome O.

-La troisième région s'étale entre -4 eV et 0 eV la contribution de l'orbitale (2p) de l'atome O avec une contribution plus petite de l'orbitale (3d) de l'atome Zn. On remarque une forte hybridation entre les états 3d du Zn et les états 2s du O. La bande de conduction CB est formée principalement des états 4s du cation Zn et 2p de l'anion O. On remarque que nos résultats obtenus par l'approximation GGA sont en bon accord avec d'autres travaux cités dans les références [21, 22].

3.4 Pour le ZnO dopé

3.4.1 Propriétés électroniques

3.4.1.1 Structure de Bandes

La structure de bandes du ZnO dopé de Fluor de 6.25% et de 12.5% est illustrée par la figure IV, nous avons tracée cette structure de bande suivant les points et les directions de hautes symétries dans la première zone de Brillouin et pour plus de clarté nous avons comparées leurs structures avec celle du ZnO non dopé (pur). On voit clairement dans la bande de valence (BV) qu'il y a des bandes supplémentaires apparait dans la région d'énergie -10 eV, qui sont due à l'introduction de l'atome de Fluor (F). Le niveau de Fermi est ramené à l'énergie 0 eV et considéré comme origine d'énergie, on peut conclure que : Pour le ZnO pur, le gap est de valeur égale à 0.8eV au point Γ , tandis on observe que le niveau de Fermi est décalé à l'intérieur de la bande de conduction, en produisant un caractère métallique de type n et relativement une conductivité électrique extrinsèque élevée [23], Quand un électron est excité de la bande de valence vers les états de la bande de conduction pour occuper les états situés au minimum de la bande de conduction qui travail comme extra barrière qui s'ajoute dans la bande interdite, on peut justifier se changement par le phénomène appelé l'effet de Burstein-Moss [24,25] où il été observer expérimentalement dans les couches minces de ZnO dopé de F [26,27] et pour d'autres dopants comme In et Ga substituant l'atome Zn [28,29]. Il est démontré que ce phénomène est derrière l'augmentation de la largeur de l'énergie du gap optique [24,25].

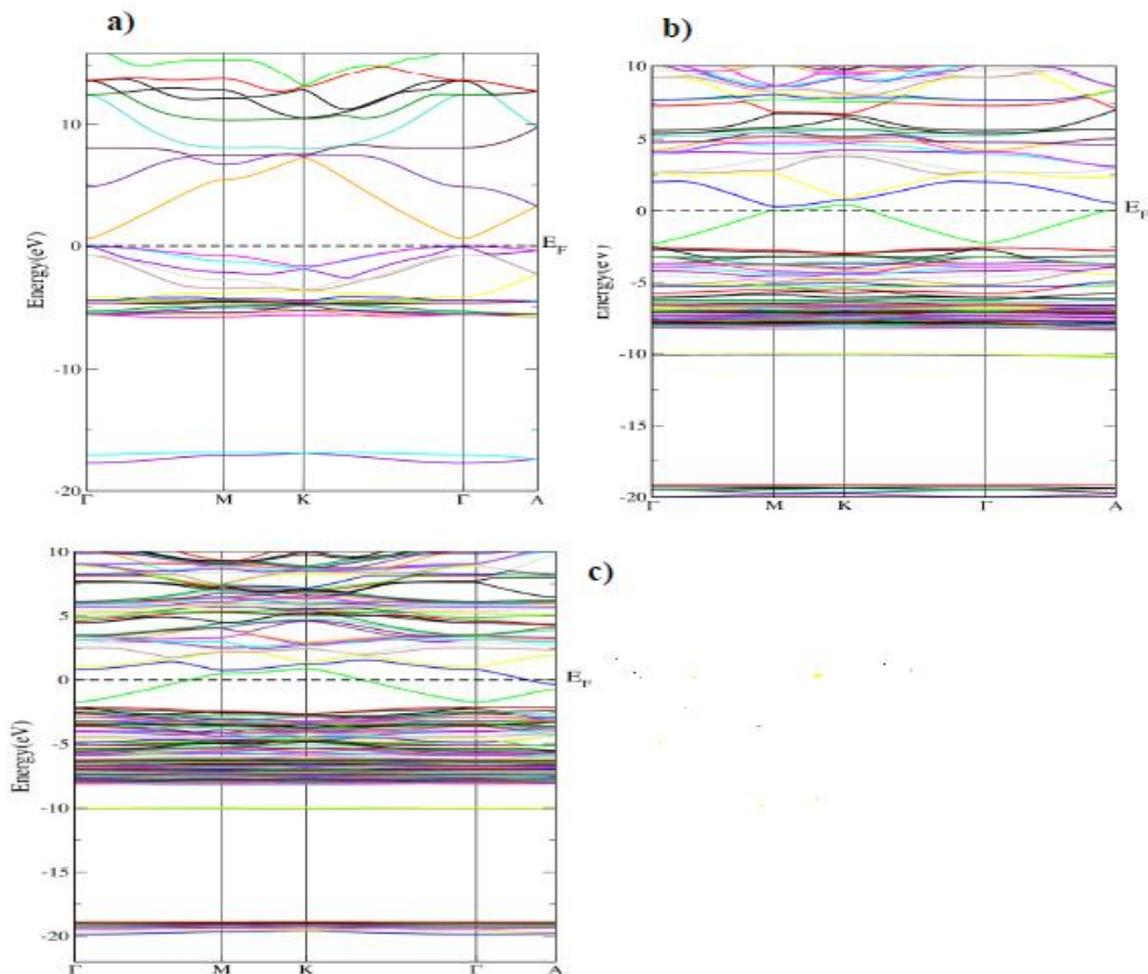


Figure 4– Structure de bandes du ZnO a) pur, b) dopé de 12.5% de F, c) dopé de 6.25% de F.

3.4.1.2 Densité d'état (DOS)

La densité d'état totale (TDOS) et partielle (PDOS) de ZnO dopé 12.5% et dopé 6.25% sont présentées sur les figures 5.1 et 5.2. Nous avons étudié le cas pur dans le chapitre III, où nous avons dévoilé que la bande de valence est divisé principalement en deux régions :

pour le maximum de la bande de valence est dominé par un mélange entre l'état O-2p et l'état Zn-3d et la l'autre région inférieur à 10 eV est dominé par l'état O-2s. La bande de conduction est dérivée principalement de l'état Zn-4s. Dans le cas de ZnO dopé, il apparait une perturbation significative au minimum de la bande de conduction et un niveau donneur est crée, à pour cause un décalage de niveau de Fermi dans la bande de conduction. Au voisinage du niveau de Fermi est caractérisé principalement par F-2p, peut être responsable premièrement de la conductivité électrique extrinsèque causé par le dopage du ZnO par le Fluor même remarque est citée dans le cas de ZnO dopé Ga [30]. On voit que la bande de valence est divisée en trois régions :

- la région située moins 10 ev est dérivée de l'état O-2s.
- la région située entre -10 eV et -7 eV est caractérisée par F-2p.
- la région située au maximum de la bande de valence dérivée principalement de Zn-3d, O-2p déjà observée dans le ZnO pur sauf qu'il y a une légère contribution de l'atome Fluor

La bande de conduction est dérivée principalement de Zn-4s, et en faible contribution d'états O-2p et F-2p.

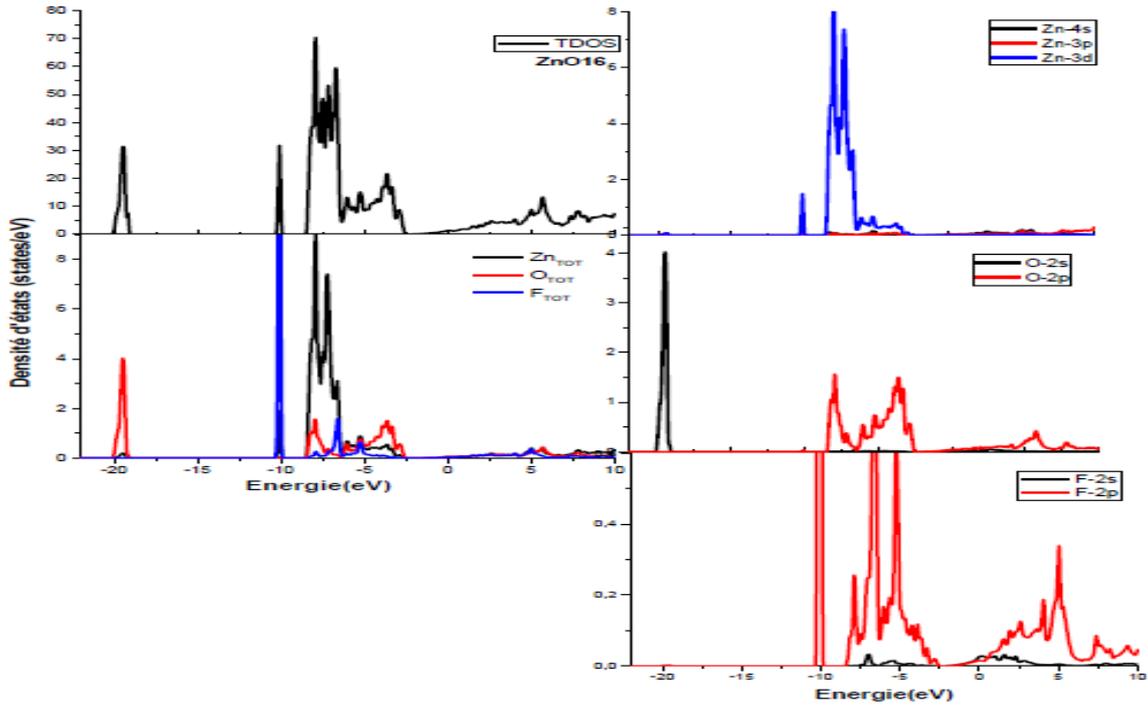


Figure5. 1– Densité d'état Totale(TDOS) et partielle du ZnO16 ZnO :F de 12.5%.

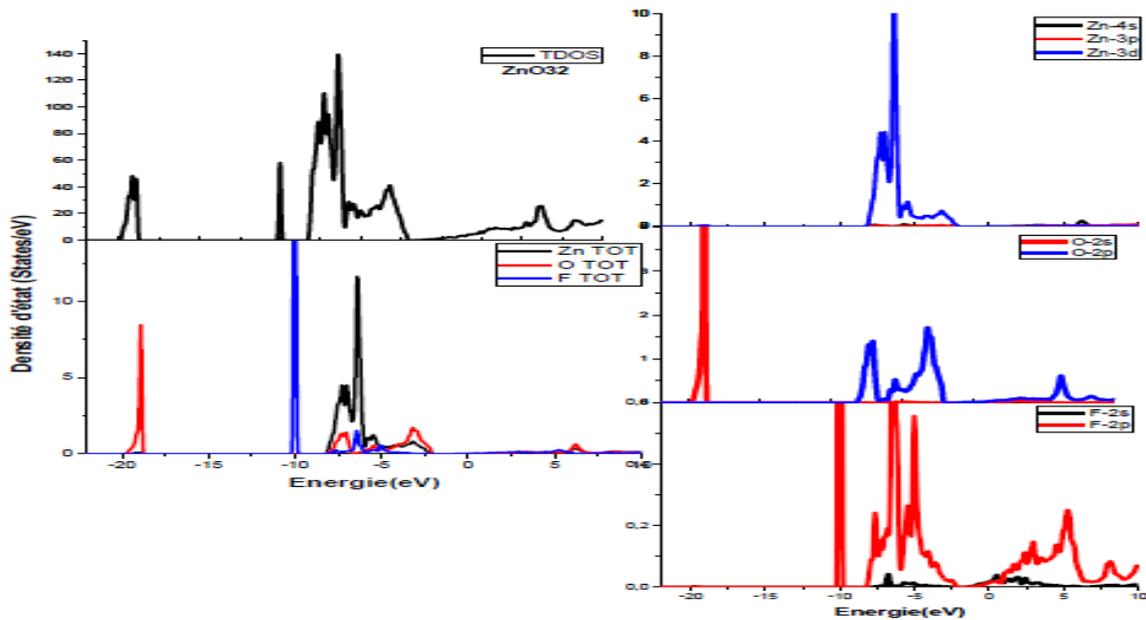


Figure5. 2– Densité d'état Totale(TDOS) et partielle du ZnO32 ZnO :F de 6.25%.

3.4.1.3 Densité d'état proche du niveau de Fermi

Nous avons tracé la densité d'état au voisinage du niveau de Fermi, la courbe correspondante est illustrée par la figure VI-6. On voit nettement la dépendance des états occupés au voisinage du niveau de Fermi de degré de dopage de Fluor et donc de niveau du dopant. En conséquence, il y a une influence sur la concentration en électrons altérée par la concentration de donneur. La figure VI, montre que l'amplitude de remplissage des états par le dopant augmente avec le taux de dopage de Fluor, qui signifie que la concentration en électrons augmente dans la bande de conduction et par conséquent, la conductivité électrique dépend fortement du taux de dopage en Fluor.

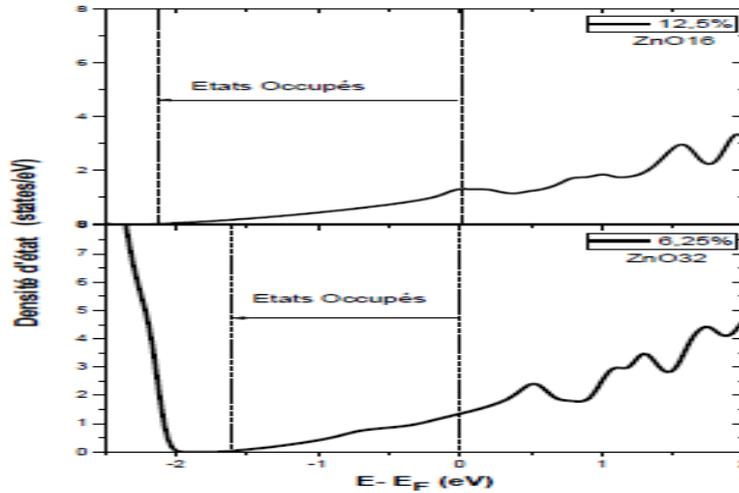


Figure 6– Densité d'état au voisinage du niveau de Fermi du ZnO :F

4. Conclusion

Dans ce travail, nous sommes intéressés à l'étude des propriétés structurales, et électroniques de l'Oxyde de Zinc (ZnO) pur et dopé, en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code WIEN2k. Nous avons utilisé l'approximation gradient généralisé GGA, pour performer le calcul des gaps nous avons utilisé l'approximation mBJ.

Pour le ZnO pur

Nous avons vérifié à partir d'un calcul effectué sur le matériau le ZnO que les propriétés de l'état fondamentale de notre composé ainsi que les autres phases incluant, le constant de réseau d'équilibre, module de compression et sa dérivée est en bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux.

Il a été constaté que la phase Wurtzite (B4) est la phase la plus stable. D'après les graphes obtenus, les phases B1 et B2 sont des phases probables à la transition de ZnO à haute pression.

La structure de bande de notre matériau dans la phase la plus stable, présente un gap direct au point Γ . Mais, avec sous-estimation de sa valeur à cause de l'utilisation de l'approximation

de GGA, pour surmonter ce problème nous avons utilisé la méthode dite (mBJ) qui a pour rôle de corriger le gap pour confronté les valeurs expérimentales. On note que nos résultats sont très comparables aux travaux expérimentaux.

La structure de bande de notre matériau dans la phase la plus stable, présente un gap direct au point Γ . Mais, avec sous-estimation de sa valeur à cause de l'utilisation de l'approximation de GGA,

pour surmonter ce problème nous avons utilisé la méthode dite (mBJ) qui a pour rôle de corriger le gap pour confronté les valeurs expérimentales. On note que nos résultats sont très comparables aux travaux expérimentaux.

Le calcul de la densité d'état donne une explication détaillée de la contribution des différents orbitaux, ainsi nous signalons l'importance de l'effet de la bande 3d pour le ZnO

Pour le ZnO dopé

On signale l'apparition des bandes supplémentaires dans la région d'énergie -10 eV, qui sont dues à l'introduction de l'atome de Fluor (F). Le niveau de Fermi est décalé à l'intérieur de la bande de conduction, en produisant un caractère métallique de type n. Quand un électron est excité de la bande de valence vers les états de la bande de conduction pour occuper les états situés au minimum de la bande de conduction qui travaille comme une barrière supplémentaire qui s'ajoute dans la bande interdite, on peut justifier ce changement par le phénomène appelé l'effet de Burstein-Moss, cette dernière est derrière l'augmentation de la largeur de l'énergie du gap optique.

Au voisinage du niveau de Fermi est caractérisé principalement par F-2p, peut être responsable premièrement de la conductivité électrique extrinsèque causé par le dopage du ZnO par le Fluor. On voit nettement la dépendance des états occupés au voisinage du niveau de Fermi de degré de dopage de Fluor et donc de niveau du dopant. En conséquence, il y a une influence sur la concentration en électrons altérée par la concentration de donneur.

L'amplitude de remplissage des états par le dopant augmente avec le taux de dopage de Fluor, qui signifie que la concentration en électron augmente dans la bande de conduction et par conséquent, la conductivité électrique dépend fortement du taux de dopage en Fluor.

References

- [1] P. Blaha, K. Schwaerz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, (2001). WIEN2K, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Vienna University of Technology, Vienna, Austria).
- [2] D. C. Langreth and J. P. Perdew (1980), Phys. Rev. B 21, 5469.
- [3] A. Schleife, F. Fuchs, J. Furthmüller, and F. Bechstedt (2006). Phys. Rev. B 73, 245212 .
- [4] Murnaghan F. D. (1944) Proc. Nat. Acad. Sci. USA 30, 244.
- [5] A. S. Mohammadi, S. M. Baizae and H. Salehi (2011) World Applied Sciences Journal 14 (10): 1530-1536.
- [6] Charifi, H. Baaziz, and Ali Hussain Reshak (2007) phys. stat. sol. (b) 244, No. 9, 3154–3167 .
- [7] A. Schleife, F. Fuchs, J. Furthmüller, and F. Bechstedt (2006). Phys. Rev. B 73, 245212 .
- [8] A.J. Cinthia, G. Sudhapriyanga, (2014) Procedia Materials Science, 5, 1034.
- [9] H.I. Berzouga, A.E. Merada, A. Zergab, Z. Sari Hassoun. (2015) Energy Procedia 74, 1517 .
- [10] Rita John, S. Padmavathi, vCrystal Structure Theory and Applications, 5, 24,.
- [11] GUERINIK Amine, (2016) Mémoire de Magister, intitulé « Elaboration et caractérisation de couches minces de monoxyde de Zinc ZnO » ENPO, Oran.
- [12] Walter R. L. Lambrecht, Sukit. Limpijumnong, and B. Segall, J. (1999) Nitride Semicond. Res. 4S1, G6.8 .
- [13] P. Schroer, Krüger, P, et Pollmann, (1993) J phys. Rev. B 47, 6971.
- [14] Massidda, S., Resta, R., Posternak, M., et Baldereschi, (1995) A. Phys. Rev. B 52, 16977.
- [15] Girard R. T, Tjernberg, O., Chiaia, G., Söderholm, S., Karlsson, U. O., Wigren, C et Lindau, (1997) I. Surf. Sci. 373, 409.
- [16] U.H. Bakhtiar, R. Ahmed, R., Khenata, Ahmed R, Hussain, R. (2013) Materials Science in Semiconductor Processing 16 1162.
- [17] B. Amran., I. Chiboub, S. Hiadi, T. Benmessabih, N. Hamdadou. (2006) Solid State Commun. 137 395–399.
- [18] CUI, S, FENG, W, HU, H, Feng, Z et Wang, (2009) Y. Journal of Alloys and Compounds, vol. 476, no 1, 306.
- [19] Azam Soltani Mohammadi, Seyed. Mahdy Baizae and Hamdollah Salehi. (2011) World Applied Sciences Journal 14 (10): 1530-1536.
- [20] A. Mang, K. Reimann, S. Rubenacke, (1995) Solid State Commun. 94, 251.
- [21] Darma, Y. Setiawa, F. G. Majidi, M. A., Rusydi, A (2015), Adv. Mater. Res. 1112, 41 .
- [22] Decremps, F, Datchi, F., Saitta, A. M., Polian, A., Pascarelli, S., Di Cicco, A et Baudalet, F. (2003) Phys. Rev. B., 68: 104101.
- [23] SLASSI, A., ZIAT, Y., ZARHRI, Z. Physica Scripta, (2015) vol. 90, no 8, 085801.
- [24] Moss T S, (1954) Proc. Phys. Soc. B 67.
- [25] Burstein E, (1954) Phys. Rev. 93 632.
- [26] Zhang, P., Tian, X., Cheng, G., Xie, Y., Zhang, H. et Wei, Z. J. (2013) Alloys Compd. 57631.
- [27] Shi Q, Zhou K, Dai M, Lin S, Hou H, Wei C and Hu F (2013) Vacuum 94 81.
- [28] Wu H-C, Peng Y-C and Chen C-C (2013). Opt. Mater. 35 509–15.
- [29] Zhou X H, Hu Q-H and Fu Y, (2008) J. Appl. Phys. 104 063703.
- [30] KHUILI, M, FAZOUAN, N, EL MAKARIM, H. (2016) Journal of Alloys and Compounds, vol. 688, 368.