

Structure et dynamique de Te et GeTe liquides et amorphes : simulation par dynamique moléculaire *ab initio*

Jean-Yves Raty⁽¹⁾, Osman Baris Malcioglu⁽¹⁾, Christophe Bichara⁽²⁾.

1) *Physique de la Matière Condensée – Université de Liège – Belgique*

2) *CINaM, CNRS et Aix Marseille Université – Marseille*

Parmi les matériaux à changement de phase les plus étudiés, GeTe fait figure de prototype. Sa phase amorphe est cependant trop instable vis-à-vis de la recristallisation pour permettre son usage dans des applications embarquées. Par dynamique moléculaire *ab initio*, nous étudions les propriétés de GeTe fortement dopé au carbone et à l'azote afin de comprendre l'augmentation de la température de cristallisation, T_c , observée expérimentalement. Par un calcul de contraintes (théorie de Phillips/Thorpe) et l'analyse des densités d'états vibrationnelles, nous établissons une corrélation entre T_c , le taux de contraintes et la densité de modes mous.

Il faut cependant être conscient que, contrairement à la plupart des éléments, les phases liquide et amorphe du tellure sont assez mal reproduites par les calculs de dynamique moléculaire basés sur la DFT. Les calculs publiés jusqu'à présent produisent en effet des structures en relatif désaccord avec les expériences de diffraction, en particulier pour ce qui concerne le nombre de premiers voisins et les distances interatomiques, quantités qui apparaissent fortement surestimées dans les simulations.

Dans ce travail, nous revisitons la structure et la dynamique du tellure liquide le long de l'anomalie de densité. Nous testons différentes approximations afin de démontrer leur importance sur la structure du liquide et de l'amorphe. En particulier, si l'interaction spin-orbite apparaît au final avoir un effet neutre, le traitement des forces de dispersion fournit une nette amélioration vis-à-vis de calculs récents utilisant des fonctionnelles hybrides [1], l'ordre atomique local étant fortement modifié dans les deux phases. L'évolution de la structure avec l'anomalie de densité est clairement reliée à la création de nombreuses interconnexions entre chaînes de tellure, ces chaînes étant de plus en plus longues avec l'abaissement de la température. Dans la phase amorphe, les chaînes sont pratiquement intactes et présentent des distributions d'angle dièdre originales. Ces modifications sont reflétées dans les propriétés dynamiques, telles que le coefficient de diffusion et la densité d'états vibrationnels.

[1] J. Akola, R. O. Jones, S. Kohara, T. Usuki, and E. Bychkov, Phys. Rev. B **81**, 094202 (2010).