

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° : Ph APP 12/2020



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique Appliquée

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par : CHELLALI Sara

Intitulé

Etude comparative des propriétés
optoélectroniques et mécaniques des
semiconducteurs

Soutenu le 30/06 /2020 devant le jury composé de :

BENYETTOU Samia	Université de M'sila	Président
SAIB Salima	Université de M'sila	Rapporteur
FERAHTIA Samia	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2019/2020

REMERCEMENTS

- ❖ Je remercie **Allah** tout puissant d'avoir me donner la force et le Courage d'établir ce modeste travail. Je tiens à remercier particulièrement mon encadreur « Mme **Salima SAIB** », qu'elle a accepté de superviser mon humble travail, qui a fourni des conseils judicieux et ainsi son exigence de rigueur. Ses compétences et ses bonnes directives m'ont aidé à achever ce mémoire de master.
- ❖ Je tiens également à remercier les membres du jury Mme Samia **FERAHTIA** et Mme Samia **BENYETTOU** de l'université MOHAMED Boudiaf de M'sila, pour avoir accepté d'assister à la présentation de ce travail.
- ❖ Je tiens également à remercier tous mes professeurs de département de physique.
- ❖ Enfin, je remercie tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.

DÉDICACES

❖ **Je dédie ce travail :**

À ma chère mère

À mon père

À mes frères

Tous mes amis

Pour tous ceux que j'aime

Sommaire

Introduction générale	1
Références	3

Chapitre I : Théorie de la fonctionnelle de la densité

I.1. Introduction	4
I.2. L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin	4
I.3. L'approximation de Born- Oppenheimer	5
I.4. L'approximation de Hartee- Fock	6
I.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	8
I.5.1. le théorème de Hohenberg et Kohn	9
I.5.2. L'approche de Thomas-Fermi	10
I.5.3. les équations de Kohn- Sham	11
I.5.4. L'approximation de la densité locale (LDA)	12
I.5.5. L'approximation du gradient généralisé (GGA)	12
I.6. L'auto-cohérence dans les calculs	13
Références	15

Chapitre II : La méthode de pseudo-potentiel

II.1. Introduction	16
II.2. Description du cristal	16
II.3. Théorème de Bloch	17
II.4. Une base d'onde planes	17

II.5. A propos de l'approximation du pseudo-potentiel	18
II.6. Construction d'un pseudo-potentiel	19
II.7. La zone de Brillouin	20
Références	21

Chapitre III : résultats et discussions

III.1. Propriétés structurales	22
III.1.1. Introduction	22
III.1.2. Structure cristalline	22
III.1.3. La structure zinc blende	22
III.2. Propriétés élastiques	26
III.2.1. Introduction	26
III.3. Propriétés électroniques	33
III.4. propriétés optiques	38
Références	46
Conclusion générale	48

Liste de Figures :

N°	Titre	Page
Figure I.1.	Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).	14
Figure II.1.	Représentation schématique de la construction de la pseudo fonction d'onde et des pseudo-potentiels.	19
Figure. III. 1.	La structure cristalline zinc-blende de nitrure d'indium (InN).	23
Figure. III. 2.	L'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de nitrure d'indium (InN).	25
Figure. III. 3.	. Représentation à 3D de la compressibilité de nitrure d'indium (InN).	31
Figure. III. 4.	Représentation à 3D du module de Young de nitrure d'indium (InN).	32
Figure. III. 5.	La première zone de Brillouin d'un réseau FCC.	34
Figure. III. 6.	La structure de bandes de nitrure d'indium (InN).	36
Figure. III. 7.	La densité d'états, totale et partiels, de nitrure d'indium (InN).	37
Figure. III. 8.	Fonction diélectrique, la partie réelle $\epsilon_1(\omega)$ (en noire) et la partie imaginaire $\epsilon_2(\omega)$ (en rouge), de InN.	41
Figure. III. 9.	La réflectivité $R(\omega)$ de l'InN.	42
Figure. III. 10.	Indice de réfraction $n(\omega)$ (en noir) et d'extinction $k(\omega)$ (en rouge) de l'InN.	43
Figure.III.11.	Spectre d'absorption $I(\omega)$ de l'InN.	44
Figure. III.12.	La fonction de perte d'énergie de L'InN dans la phase zinc-blende.	45

Liste des Tableaux

N°	Titre	Page
Tableau III-1	Valeurs des constantes de réseau (a) en Å, module de compressibilité (B) en GPa, la dérivée (B') et l'énergie (E) en (eV) à l'équilibre.	25
Tableau III.2	Les constantes élastiques de l'InN.	27
Tableau III.3.	Valeurs calculées de module de Young, coefficient de poisson, vitesses d'ondes V_s , V_p et V_m (m/s) et la température de Debye θ_D (K) pour les composés InN.	30
Tableau III.4.	Les gaps énergétiques : $E_{\Gamma-\Gamma}$, $E_{\Gamma-L}$, $E_{\Gamma-X}$ et EBV	36

INTRODUCTION

GÉNÉRALE

Introduction Générale

Les composés semi-conducteurs III-V sont considérés comme une classe importante de matériaux et présentent généralement une haute mobilité électronique et une bande interdite directe, et sont utilisés dans des applications opto-électroniques (diodes lasers, cellules solaires, etc.) ainsi qu'électroniques (transistors...) [1,2]. Le gap de ces matériaux est situé entre 5.70 eV pour **BN**, 6.2 eV pour **AlN** et 0.7 eV **InN**. Ils sont de bons candidats à la réalisation des dispositifs émettant aussi bien dans le spectre visible que dans l'ultraviolet proche et l'ultraviolet lointain [3] ; ils sont particulièrement utilisés dans la fabrication des diodes électroluminescentes vertes, bleues et violettes ; ainsi que dans les diodes lasers bleues [4,5]. Ils trouvent aussi une grande place dans le domaine militaire. Après le Silicium, ce sont les deuxièmes matériaux semi-conducteurs les plus utilisés dans l'industrie. Parmi les nitrures du groupe-III-V, le nitrure d'indium qui a la masse électronique effective la plus faible et la mobilité électronique la plus élevée [2,6], ce qui le rend adapté aux applications potentielles dans les cellules solaires et de l'électronique à haute fréquence.

Le nitrure d'indium peut cristalliser dans la structure cubique (zinc blende) ou hexagonale (wurtzite), cette dernière est stable et s'obtient dans des conditions habituelles de croissance. De nombreuses études ont été effectuées, et ne cessent de faire l'objet de plusieurs recherches sur le nitrure d'indium (**InN**), dans plus récemment dans la phase zinc blende.

Ce mémoire a pour but de déterminer les propriétés structurales, électroniques, mécaniques et optiques de l'**InN** dans la phase zinc-blende en utilisant la méthode des pseudo-potentiels couplée avec la méthode des ondes planes. Les calculs sont effectués par le code ABINIT basée sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).Après avoir fait apparaître l'importance

technologique du composé et l'intérêt de la simulation numérique. Notre travail est composé de trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous exposons un rappel sur la théorie de la DFT. Dans le second chapitre, nous présenterons le principe de la méthode des pseudo potentiels et ondes planes (PP-PW).

Le troisième chapitre démontrera nos résultats numériques obtenus, concernant les propriétés structurales, électroniques, mécaniques et optiques du semi-conducteur InN.

Finalement, notre travail est achevé par une conclusion générale qui regroupe tous les résultats de notre simulation.

Références :

- [1] S.Berrah, H.Abid, A.Boukort, M.Sehil, Turk J Phys 30 (2006).
- [2] H. Morkoc, Nitride Semiconductors and Devices (Springer, New York, 1999).
- [3] AHMED.R, AKBARZADEH.H, F. E-ALEEM.F, a first principle study of band structure of III-nitride compounds, Physica B, Vol. 370, 2005, pp. 52-60.
- [4] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, J. Appl. Phys. 94 (2003) 3675 and references cited therein .
- [5] S. Nakamura, G. Fasol, Springer, Berlin, 1997.
- [6] S. Nagahama et al., Jpn. J. Appl. Phys. 40, 3075 (2001).

CHAPITRE I
LA THÉORIE DE LA
FONCTIONNELLE DE LA
DENSITÉ (DFT)

$$T_N = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_K \Delta_k : \text{est l'énergie cinétique des (noyaux) } \dots \dots \dots (I. 4)$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} U_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} : \dots \dots \dots (I. 5)$$

est l'énergie potentielle de la répulsion (électron-électron)

$$V_{N-N} = \frac{1}{2} \sum_{k,l \neq k} U_{kl} = \frac{1}{2} \sum_{k,l \neq k} \frac{e^2 Z_k Z_l}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_k - \vec{R}_l|} : \dots \dots \dots (I. 6)$$

est l'énergie potentielle de répulsion (noyau-noyau)

$$V_{e-N} = \sum_{i,k} U_{ik} = - \sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_k - \vec{r}_i|} : \dots \dots \dots (I. 7)$$

est l'énergie potentielle d'attraction (électron-noyau)

e : la charge de l'électron .

m : la masse de l'électron.

M : masse du noyau.

\vec{r}_i, \vec{r}_j : définissent les positions des électrons (i) et (j), respectivement.

\vec{R}_k, \vec{R}_l : définissent les positions des noyaux (k) et (l), respectivement.

Z_k, Z_l : sont les nombres atomiques des noyaux (k) et (l), respectivement.

Donc on peut écrire l'équation de Schrödinger sous la forme suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_K \Delta_k + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{k,l \neq k} \frac{e^2 Z_k Z_l}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_k - \vec{R}_l|} - \sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_k - \vec{r}_i|} \right] \psi = E\psi \dots (I. 8)$$

I.3.1'approximation de Born Oppenheimer :

Cette approximation [2] prévoit la possibilité de négliger le mouvement des noyaux par rapport au mouvement des électrons. Cela est dû à la masse du noyau élevée et à sa vitesse lente par rapport à la masse et à la vitesse des électrons. Cela nous permet d'isoler le mouvement des électrons du mouvement des noyaux et le résultat est de maintenir les termes qui contiennent

l'énergie cinétique. Ainsi, nous nous sommes limités à résoudre l'équation de Schrödinger pour les électrons, donc l'hamiltonien des électrons H_e qui est donné par :

$$H_e = T_e + V_{e-e} + V_{e-n} \dots \dots \dots (I. 9)$$

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_k - \vec{r}_i|} \dots \dots \dots (I. 10)$$

L'équation de Schrödinger électronique peut s'écrire alors comme suit :

$$H_e \psi = E_e \psi \dots \dots \dots (I. 11)$$

E_e : représente l'énergie des électrons qui se déplacent dans le champ créé par des noyaux fixes.

A cause des interactions électrons-électrons la résolution de l'équation de Schrödinger à plusieurs corps reste encore très complexe, donc on recourt à d'autres approximations supplémentaires.

I.4.L'approximation de Hartree-Fock :

Cette approximation est basée sur le modèle des électrons indépendants, où Hartree a supposé que chaque électron se déplaçait dans un champ moyen généré par les noyaux et le reste des autres électrons (le modèle des électrons libres), et donc notre problème passe d'un grand nombre d'électrons à un seul électron, et l'Hamiltonien s'écrit comme :

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \dots \dots \dots (I. 12)$$

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) \dots \dots \dots (I. 13)$$

L'hamiltonien H_i représente l'hamiltonien de l'électron i

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) \right] \psi_i(\vec{r}_i) = E \psi_i(\vec{r}) \dots \dots \dots (I. 14)$$

Avec :

$$U_i(\vec{r}_i) = - \sum_k \frac{Z_k e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_k^0|} \dots \dots \dots (1.15)$$

U_i : Représente l'énergie potentielle de l'électron, Dans le domaine du noyau k .

R_k^0 :représente la position du noyau k .

$$V(\vec{r}_i) = v_H(\vec{r}_i) = - \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}|} \dots \dots \dots (I. 16)$$

Nous écrivons l'équation :

$$H_i = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{eff}(r_i) \dots \dots \dots (I. 17)$$

Le potentiel effectif peut être exprimé par la relation suivante :

$$V_{eff}(r_i) = V_H(r_i) + V_{ext}(r_i) \dots \dots \dots (I. 18)$$

En ajoutant le potentiel effectif de l'équation de Schrödinger pour les électrons, nous trouvons :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{eff}(r) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i(r) \dots \dots \dots (I. 19)$$

Avec :

$\psi_i(r)$ est la fonction d'onde des électrons indépendants.

La fonction d'onde totale du système est écrite en fonction des fonctions d'état de tous les électrons par l'expression :

$$\psi(r_1, r_2, \dots \dots \dots) = \prod_i^N \psi_i(r_i) \dots \dots \dots (I. 20)$$

L'énergie totale s'écrit comme la somme des énergies correspondantes aux électrons indépendants

$$E = \sum E_i = E_1 + E_2 + \dots + E_n \dots \dots \dots (I. 21)$$

En 1930, Fock a démontré que la méthode de Hartree ne respecte pas le principe d'antisymétrie de la fonction d'onde **[3]**. En effet, d'après le principe d'exclusion de Pauli, deux électrons ne peuvent pas être simultanément dans le même état quantique. Pour corriger ce défaut, Fock **[4]** a proposé d'appliquer le principe d'exclusion de Pauli, donc la fonction d'onde électronique s'écrit sous la forme d'un déterminant de Slater **[4]** :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots \dots \dots, \vec{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_n) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n(\vec{r}_1) & \psi_n(\vec{r}_2) & \dots & \psi_n(\vec{r}_n) \end{vmatrix} \dots \dots \dots (I. 22)$$

$\frac{1}{\sqrt{N!}}$: Est le coefficient de rationnement.

Parmi les difficultés rencontrées dans le calcul de la structure des anneaux énergétiques, se trouve la détermination de la latence au sein du cristal.

L'équation de Schrödinger après la correction de Fook est écrite avec la phrase suivante :

$$\frac{-\nabla^2}{2m} \psi_i(\vec{r}) + V_i(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) + V_H(\vec{r})\psi(\vec{r}) - \sum_j \int \frac{d\vec{r}'}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_j^*(\vec{r}')\psi_i(\vec{r}')\psi_j(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}) \dots \dots \dots (I. 23)$$

Le terme d'échange est donné par :

$$V_x = - \sum_j \int \frac{d\vec{r}'}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_j^*(\vec{r}')\psi_i(\vec{r}')\psi_j(\vec{r}) \dots \dots \dots (I. 24)$$

I.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) :

Le principe fondamental de cette théorie (la DFT) c'est que toutes les propriétés physico-chimiques d'un système physique à plusieurs particules en interaction peuvent être considérées comme une fonctionnelle de la densité de l'état fondamental $\rho(\vec{r})$. Du point de vue historique, l'origine de la DFT revient au modèle théorique développé par Thomas et Fermi [5, 6] à la fin des années 1920, mais ce n'est qu'au milieu des années 1960 que les contributions de Hohenberg et Kohn [7] d'une part et Kohn et Sham [8] d'autre part permettent d'établir le formalisme théorique sur lequel repose la DFT moderne que l'on utilise aujourd'hui. Le modèle de Thomas-Fermi est intéressant dans le sens où il constitue le premier pas vers une théorie où le calcul compliqué de la fonction d'onde dépendant de 3N coordonnées spatiales est remplacé par celui d'une fonction plus simple qui est la densité électronique dépendant uniquement de 3 coordonnées. C'est dans cet esprit qu'en 1964, Hohenberg et Kohn [7] ont formulé et démontré deux théorèmes qui ont mis dans un cadre mathématique les idées précédentes. Ces deux théorèmes sont les piliers de la DFT telle qu'elle est admise aujourd'hui.

I-5-1.Les théorèmes de Hohenberg et Kohn :

C'est en 1964 que Hohenberg et Kohn établissent deux théorèmes qui constituent les bases de la DFT qui s'appliquent à tout système de N électrons en interaction dans un potentiel externe V_{ext} [8]. Ces deux théorèmes s'énoncent comme suit :

Théorème 01 :

L'énergie totale de l'état fondamental E est une fonctionnelle unique de la densité des particules $\rho(\vec{r})$ pour un potentiel externe $V_{ex}(\vec{r})$ donné. Ce théorème signifie qu'il suffit de connaître seulement la densité électronique pour déterminer toutes les fonctions d'onde.

En conséquence, l'énergie totale E d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel extérieur est représentée comme une fonctionnelle de la densité électronique de l'état fondamental $\rho_0(\vec{r})$ comme suit :

$$E=E[\rho(\vec{r})].....(I.25)$$

Théorème 02 :

Il existe une fonctionnelle universelle $E(\vec{\rho})$ exprimant l'énergie en fonction de la densité électronique $\rho(\vec{r})$, valide pour tout potentiel externe V_{ext} . Pour un potentiel V_{ext} et un nombre d'électrons N donnés, l'énergie de l'état fondamental du système est la valeur qui minimise cette fonctionnelle, et la densité $\rho(\vec{r})$ qui lui est associée correspond à la densité exacte $\rho_0(\vec{r})$ de l'état fondamental [9].

$$\frac{\partial E[\rho(r)]}{\partial \rho(r)} = 0 \rightarrow E(\rho_0) = \min E(\rho)(I.26)$$

ρ_0 : la densité de l'état fondamental.

Hohenberg et Kohn ont montré que la vraie densité de l'état fondamental c'est celle qui minimise l'énergie $E[\rho]$, et toutes les autres propriétés sont aussi une fonctionnelle de cette densité.

L'énergie de l'état fondamental d'un système électronique dans un potentiel extérieur est déterminée par la méthode variationnelle.

I.5.2. L'approche de Thomas-Fermi :

La théorie de la fonctionnelle de densité considère l'énergie d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel dépendante de la distribution de densité $\rho(\vec{r})$ de ces électrons.

Cette idée forme la base de la méthode de Thomas-Fermi. La théorie de Thomas-Fermi considère un système d'électrons en interaction dans un champ de coulomb

$V_e(\vec{r})$ créée par l'ensemble des noyaux fixes [10]. L'énergie totale du système se constitue par :

1- L'énergie cinétique des électrons.

2- Leur interaction coulombienne.

3- Leur interaction avec noyaux.

Pour simplifier l'écriture de cette énergie totale, la théorie a fait une approximation très draconienne et représente l'énergie cinétique par l'énergie cinétique d'un gaz d'électron uniforme.

On sait que l'énergie cinétique par unité de volume dans un tel gaz dépend seulement de la densité ρ des électrons donnés comme suit [6] :

$$E_c(\rho) = \frac{3(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}\hbar^2\rho^{\frac{3}{5}}}{10m} \dots\dots\dots(1.27)$$

C'est-à-dire que le système inhomogène est considéré localement comme étant un système homogène, c'est la même approximation utilisée dans la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le point faible de cette démarche réside cependant dans l'expression de l'énergie cinétique en l'absence d'orbitale et ne lui permet pas d'atteindre une précision satisfaisante. Un peu plus tard, Dirac [11] a proposé que les effets d'échanges soient pris en compte en incorporant un terme correspondant à la densité d'énergie d'échange dans un gaz homogène d'électrons. Toutes

ces approximations auparavant ont contribué au développement de la théorie de la fonctionnelle de densité.

I.5.3. Les équations de Kohn- Sham:

Kohn et Sham [8] ont écrit la densité électronique comme une somme de densité à une particule, et ils ont utilisé un principe variationnelle pour déterminer l'état fondamental du système. Ils ont montré que la vraie densité est donnée par la solution auto-cohérente de l'ensemble des équations à une particule de type Schrödinger, encore appelées équation Kohn-Sham sont données par:

$$[-\nabla^2 + V_{en}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r})]\Psi_i(\vec{r}) = E_i\Psi_i(\vec{r}).....(1.28)$$

Où la charge est donnée en sommant la densité de probabilité sur les orbitales occupées (on unité atomique u. a)

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{occ} \Psi_i^*(\vec{r})\Psi_i(\vec{r}).....(1.29)$$

Où :

$\Psi_i(\vec{r})$ est la fonction d'onde à une particule l'énergie mono particule,

$V_{en}(\vec{r})$ le potentiel coulombien dû aux noyaux,

$V_H(\vec{r})$ potentiel de Hartree et $V_{xc}(\vec{r})$ le potentiel d'échange-corrélation.

Ces potentiels sont donnés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} V_H(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}'-\vec{r}|} \\ V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \\ V_{en}(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}, \vec{R}} \frac{Z_{\tau}}{|\vec{r}-\vec{R}-\vec{r}|} \end{array} \right.(1.30)$$

Jusqu'ici la DFT est une méthode exacte, mais pour que la DFT et les équations de Kohn-Sham deviennent utilisables dans la pratique, on a besoin de proposer une formule pour $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ et pour cela, on est obligé de passer par des approximations.

I.5.4. L’approximation de la densité locale (LDA):

L’approximation la plus simple de l’énergie d’échange-corrélation est celle de la densité locale (LDA). L’idée de LDA est de substituer la densité électronique d’un système réel par celle d’un gaz d’électrons homogène. En autre terme, on suppose que dans une petite région spatiale, la distribution de charges d’un gaz non- homogène à une densité similaire à une distribution de charges d’un gaz homogène

$$E_{xc}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] d^3\vec{r} \dots\dots\dots (I.31)$$

$\epsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ représente l’énergie d’échange-corrélation par électron dans un gaz d’électrons dont la distribution est supposée uniforme.

Généralement, la dépendance de potentiel d’échange et de corrélation est de la forme.

$$V_x = C_x \rho(\vec{r})^{\frac{1}{3}} \dots\dots\dots (I.32)$$

I.5.5.L’approximation du gradient généralisé (GGA):

Pour améliorer certains nombres de problème de la **LDA** pour certaines applications, il faut introduire des termes en gradient dans l’expression de l’énergie d’échange et de corrélation, c. à. d tenant compte de l’inhomogénéité de la densité électronique. Cette amélioration est connue sous le nom de L’approximation du gradient généralisé (GGA, GeneralizedGradient Approximation) [12].

Ainsi la fonctionnelle $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ rend compte du caractère non uniforme du gaz d’électrons. Dans ce cas, la contribution de $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ à l’énergie totale du système peut être additionnée de façon cumulée à partir de chaque portion du gaz non uniforme comme s’il était localement non uniforme.

Elle s’écrit de la forme :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{xc}[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|] d^3(\vec{r}) \dots\dots\dots (I.33)$$

Où $\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})]$, $|\nabla\rho(\vec{r})|$ représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme.

L'utilisation des fonctionnelles de type **GGA** permet d'accroître de façon significative la précision des calculs en comparaison avec la description fournie par la **LDA** en particulier pour l'énergie de liaison des molécules. Ce qui est à l'origine de l'utilisation massive de la **DFT** par les chimistes dans les années 90.

I.6. L'auto-cohérence dans les calculs :

Les équations de Kohn et Sham sont résolues d'une manière itérative, en utilisant un cycle auto cohérent qui est illustré dans la figure I.1. En introduisant une densité de départ ρ_{in} , l'équation séculaire $(H - \varepsilon_i S)C_i = 0$ (**H** représente la matrice Hamiltonienne et **S** la matrice des recouvrements) est diagonalisée en assurant que les orbitales sont ortho normales. Une nouvelle densité ρ_{out} est calculée en utilisant l'équation (I.26), si l'on n'obtient pas la convergence des calculs, cette densité est mélangée avec la densité d'entrée de la manière suivante :

$$\rho_{in}^{i+1} = (1-\alpha)\rho_{in}^i + \alpha \rho_{out}^i \dots \dots \dots (I.35)$$

i:représente la i^{ieme} itération.

α : Un paramètre de mélange (mixage).

La procédure est poursuivie jusqu'à ce que la convergence soit atteinte.

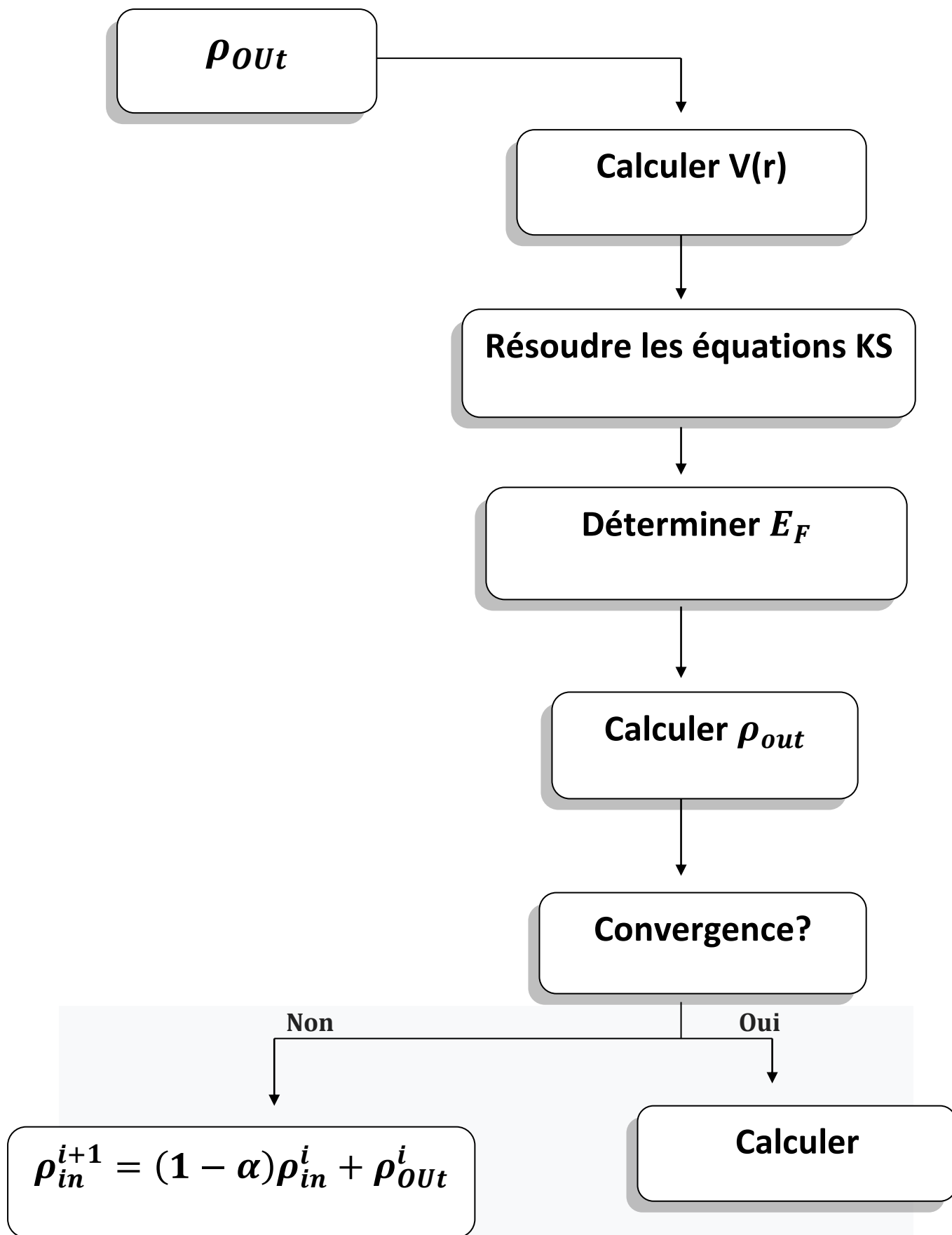


Figure I.1. Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).

Références :

- [1] C. Kittel. 5e édition Dunod. (1996).
- [2] M. Born, J. R. Oppenheimer, Ann. Phys. **87** (1927) 457.
- [3] V. Fock, Z. Physik 61 (1930) 126.
- [4] L. Fast, J. M. Wills, B. Johansson, and O. Eriksson, Phys. Rev. B 51 (1995) 17431.
- [5] L.H. Thomas, Proc. Cambridge Philos. Soc. 23 (1928) 542.
- [6] E. Fermi. Z. Phys. 48 (1928) 3.
- [7] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864.
- [8] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. A 140 (1965) 1133.
- [9] A. Ibrahim, Etude par les méthodes ab initio les propriétés structurales électroniques et optiques du VO₂ en vue de ses applications comme matériau intelligent, thèse, Université A. Belkaid Tlemcen, (2016).
- [10] L. H. Thomas, Pro. Combridge Philos. Soc 23 (1927) 542.
- [11] P. A. M. Dirac. Proc. Cambridge Philos. Soc.26 (1930) 376.
- [12]J.A.White and D.M.Bird. Implementations of gradient-corrected exchange-correlation potentials in Car-Parrinello total-energy calculations. Phys .Rev. B. 50(70) (1994) 4957.

CHAPITRE II :

LA MÉTHODE DE PSEUDO-

POTENTIEL

II.1. Introduction :

Dans le formalisme de la DFT, certaines observables à plusieurs corps peuvent être représentées par des observables dans le problème à une particule, Mais il reste l'énorme tâche de manipuler un nombre infini d'électrons sans interaction qui se meuvent dans le potentiel statique d'un nombre infini de noyaux ou d'ions. A ce stade une fonction d'onde doit être calculée pour chaque électron parmi un nombre infini dans le système. Ce problème peut être surmonté en appliquant le théorème de Bloch à la fonction d'onde électronique, ce qui va naturellement conduire à utiliser une base d'ondes planes et la technique des points spéciaux \mathbf{K} dans l'espace réciproque.

II.2. Description du cristal :

Un cristal est définie par un motif cristallin et trois vecteurs $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ qui définissent le réseau de Bravais du cristal, le système étudié consistera en une collection d'ion et d'électrons contenus dans une cellule de forme parallélépipédique, dont les cotés sont les vecteurs $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$, le potentiel a la symétrie de translation du réseau, donc il est périodique.

$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$ et \vec{R} est un vecteur primitif du réseau :

$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ et les, n_i sont des entiers. La densité électronique $\rho(\vec{r})$ et le potentiel effectif Kohn et Sham $V_{eff}(\vec{r})$ ont \vec{R} comme vecteur de translation

$$\rho(\vec{r} + \vec{R}) = \rho(\vec{r})$$

$$V_{eff}(\vec{r} + \vec{R}) = V_{eff}(\vec{r})$$

Cette périodicité de potentiel effectif Kohn-Sham $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ constitue la base sur laquelle peut être développé le théorème de Bloch .

II.3. Théorème de Bloch :

Le théorème de Bloch [2] utilise la périodicité du cristal pour réduire le nombre infini de fonctions d'onde électroniques au nombre d'électrons dans la maille élémentaire du cristal. Bloch a démontré un important théorème qui établit la solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique peuvent être mises sous la forme d'un produit d'une onde plane par une fonction $u_i(\vec{r})$ qui a la périodicité du réseau cristallin [3.4] :

$$\Psi_i(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \text{ Avec } u_i(\vec{r}) = u_i(\vec{r} + \vec{R})$$

\vec{k} est vecteur d'onde, i est l'indice de bande et \vec{R} est le vecteur du réseau direct. Pour la fonction $u_i(\vec{r})$ on peut toujours écrire : $u_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{i\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$

Où \vec{G} est vecteur du réseau réciproque défini par $\vec{G}\cdot\vec{R} = 2\pi m$ (m est un entier). En remplaçant $u_i(\vec{r})$ par son expression, la fonction d'onde peut être mise sous la forme d'une somme d'ondes planes. $\Psi_{ik}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{i(\vec{G}+\vec{k})} e^{i(\vec{G}+\vec{k})\cdot\vec{r}}$

La théorie de Bloch permet de simplifier le problème, c'est-à-dire au lieu d'avoir à Solution de zone entière (cristal de dimensions presque infinies), peut être résolue Dans une protocellule d'un cristal infini (en fait c'est la première zone de Brillouin).

II.4. Une base d'onde plane :

Suite au théorème de Bloch, la fonction d'onde en chaque point \vec{k} peut être représentée en utilisant une base discrète d'ondes planes. En principe pour bien représenter la fonction d'onde on

a besoin d'un très grand nombre d'ondes planes. Cependant, les coefficients $C_{i, \vec{K} + \vec{G}}$, pour les ondes planes de petite énergie cinétique $\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{K} + \vec{G}|^2$ sont plus importants que ceux associés aux ondes planes avec grande énergie cinétique [5]. En conséquence, la base des ondes planes peut être limitée aux ondes planes qui ont une énergie cinétique inférieure à une valeur critique "cut-off energy" E_{cut} . La limitation de la base d'ondes planes conduit à des erreurs dans le calcul de l'énergie totale. L'ordre de grandeur de cette erreur peut être réduit en augmentant la valeur de l'énergie critique. En principe la valeur de l'énergie critique doit être augmentée jusqu'à ce que l'énergie totale converge, ce qui signifie que le choix de E_{cut} détermine le degré d'exactitude du calcul.

II.5. A propos de l'approximation du pseudo-potentiel :

D'après l'approximation du coeur gelé il est juger utile de remplacer le vrai potentiel ionique du cœur par un potentiel ionique effectif "pseudo potentiel" auquel est associé une fonction d'onde adoucie (sans nœuds). Pratiquement, on cherche un opérateur qui reproduit les résultats (forme et énergie des orbitales) d'un calcul précis dans lequel tous les électrons sont traités explicitement. L'approximation du pseudo-potentiel présente un grand intérêt dans le calcul théorique de la structure électronique de la matière, car elle permet de ne traiter explicitement que les électrons de valence, permettant un gain important dans les ressources informatiques du calcul [6]. Il existe trois types de pseudo potentiel qui ont chacun leurs avantages et leurs inconvénients :

- Les pseudo potentiels à norme conservée introduits par **Humman** et al [7-8].
- Les pseudo potentiels "Dual-space Gaussien" introduits par **Goedecker** et al [9].
- Les pseudo potentiels Ultra-doux introduits par **Vanderbilt** [10].

II.6. Construction d'un pseudo-potentiel :

Le pseudo-potentiel doit vérifier les propriétés suivantes :

- Il doit être additif, c'est à dire Le pseudo-potentiel total de plusieurs atomes est la somme des pseudo-potentiel des atomes individuels.
- Il doit être transférable c'est-à-dire pour les environnements chimiques différents on doit pouvoir utiliser le même pseudo-potentiel.
- Il induit des variations de potentiel plus faibles que dans le cas du potentiel de cœur réel.
- Il est nécessaire d'avoir différents pseudo-potentiels pour les états s, p, d, c.-à-d., le Pseudo potentiel dépend du moment angulaire (pseudo potentiel non-local). Ceci est illustré dans la figure suivante :

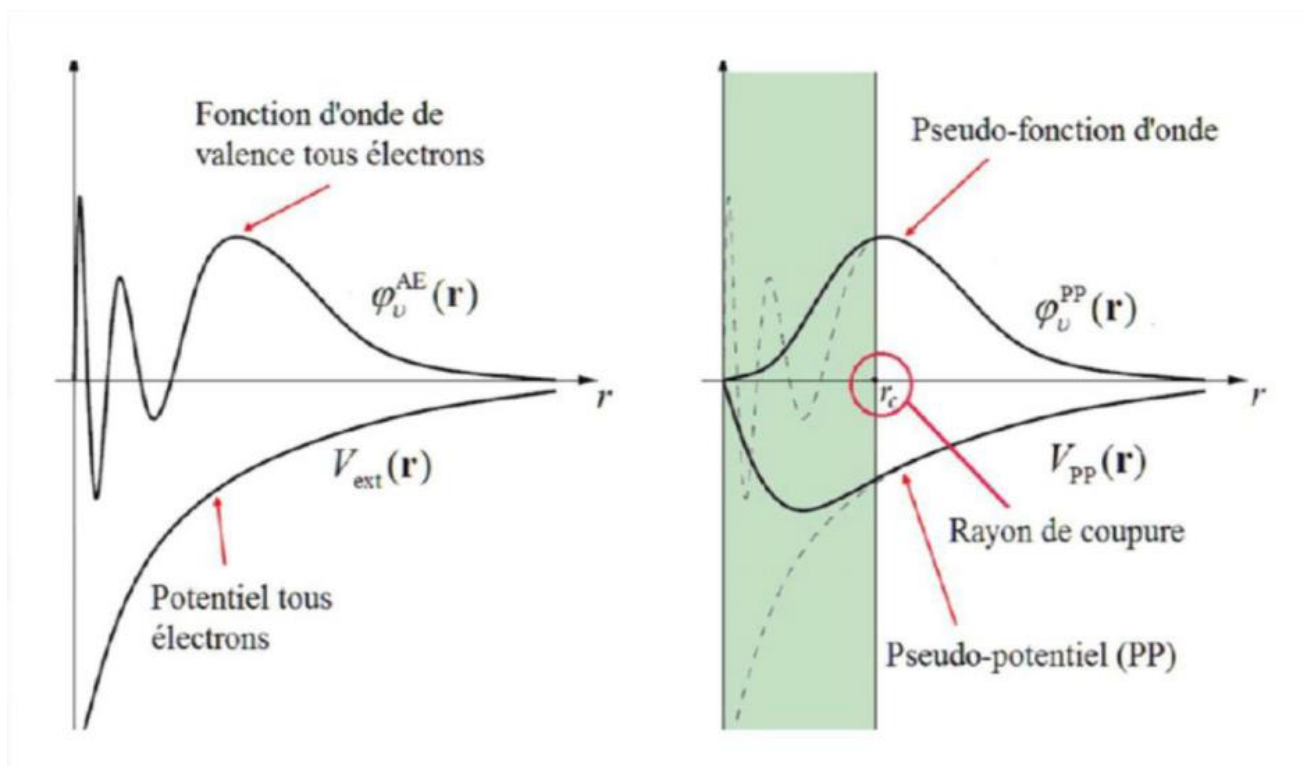


Figure II.1. Représentation schématique de la construction de la pseudo fonction d'onde et le pseudo potentiels.

II.7. La zone de Brillouin :

Dans l'étude des solides, on est très souvent amené à calculer une moyenne d'une fonction périodique de \vec{K} (vecteur d'onde) sur la zone de Brillouin (ZB). De tels calculs sont souvent longs et compliqués puisqu'en principe ils demandent la connaissance des valeurs de la fonction en tout point de la ZB et à cause du nombre infini d'électrons, un nombre infini de points \mathbf{k} sont présents dans cette zone. En pratique, la connaissance des valeurs des fonctions d'un ensemble réduit de points \mathbf{k} dans la ZB est suffisante pour obtenir la valeur moyenne de Ces fonctions à travers la ZB. Pour obtenir une grande exactitude dans les calculs, il est nécessaire en générale de connaître les valeurs de la fonction d'un ensemble de points Suffisamment large. De nombreuses procédures existent pour générer les pavages des Points \vec{K} , on peut citer celle de Chadi et Cohen [28] et celle de Monk horst et Pack [29].

Références:

- [1] S. Ouendadji, Thèse de doctorat, Université d'Annaba, Algérie (2010).
- [2] M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias, J.D. Giannopoulos. Rev. Mod. Phys., 64, 1045(1992).
- [3] Dilmisouad, Mémoire de Master, université de M'sila (2013)
- [4] H. Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, (Dunod, 2004)
- [5] U. Von Barth, C.D. Gelatt. Phys. Rev. B, 21 2222, (1980)
- [6] I. V. Abarenkov, and V. Heine, Phil. Mag. 13, 552
- [7] M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias, J.D. Giannopoulos. Rev. Mod. Phys. 64, 1045 (1992)
- [8] D.R. Hamman, M. Schluter, C. Chiang, Rev. Lett. 1494, 43 (1981)
- [9] Goedecker and J. Hutter, Phys. Rev. B 3641, 58 (1998)
- [10] Warren E. Pickett, Computer Physics Report. 115, 9 (1989)
- [11] Goedecker and J. Hutter, Phys. Rev. B 3641, 58 (1998).
- [12] P. Giannozzi, S. de Gironcoli, P. Pavone and S. Baroni, Phys. Rev. B 43 (1991) 7231.
- [13] X. Gonze: Phys. Rev. B 55, 10337 (1997).

CHAPITRE III :

RÉSULTATS ET

DISCUSSIONS

III.1. Propriétés structurales :

III.1.1. Introduction

Les nitrures du groupe III sont des matériaux prometteurs pour le développement de dispositifs opto-électroniques et microélectroniques fonctionnant dans la région spectrale ultraviolette et sous hautes températures. Ces possibilités sont minutieusement liées à la largeur de leurs bandes interdites, leurs faibles constantes diélectriques et leurs fortes Liaisons (mixte ionique et covalente) [1–4]. Bien que le nitrure d'indium InN soit rarement, voire jamais, utilisé dans les appareils sous sa forme binaire, lorsqu'il est allié au GaN, il forme un élément central de la diode la serbleue [4,5].

III.1.2. Structure cristalline

Le nitrure d'indium InN se cristallise sous deux formes différentes, la structure hexagonale ou wurzite (h-InN), et la structure cubique (zinc blende : c-InN), et appartient au groupe d'espace est $F\bar{4}3m$.

III.1.3. La structure zinc blende

Cette structure est formée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées comprenant chacun un type d'atome décalé d'un quart par rapport à la diagonale de la maille. Cette structure est thermodynamiquement instable et est moins exploitée par rapport à la structure hexagonale wurzite d'InN.

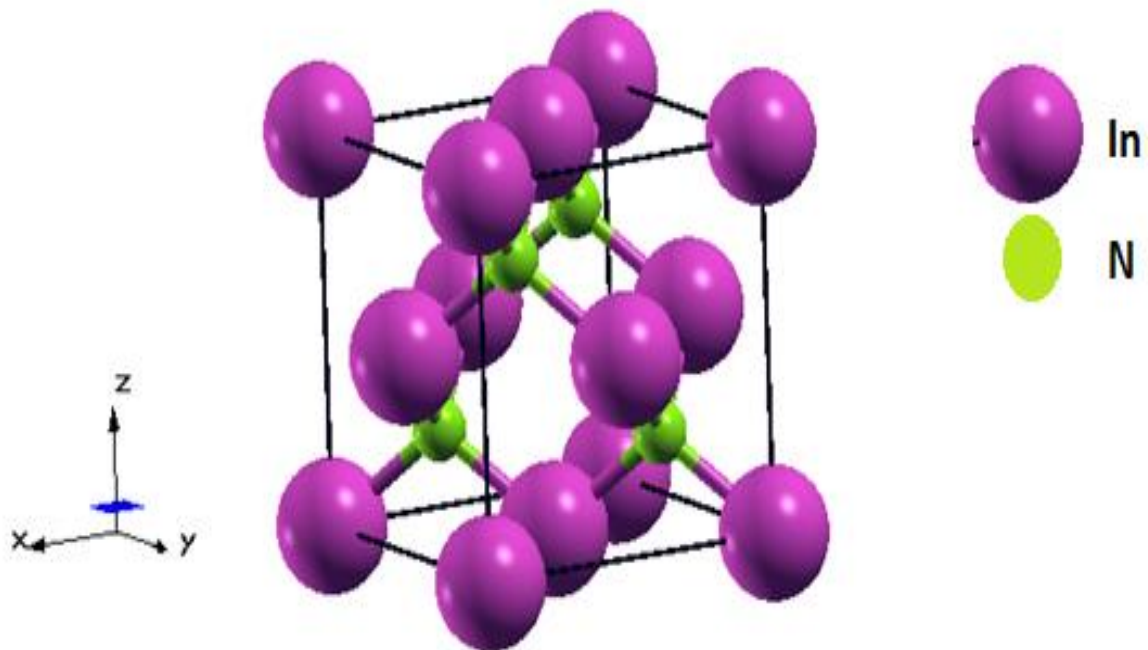


Figure. III. 1. La structure cristalline zinc-blende de nitrure d'indium (InN)

La base de la maille primitive de la structure zinc -blende contient deux atomes ; l'un (In) dans la position (0,0,0) et l'autre (N) dans la position- (1/4,1/4,1/4), avec un paramètre de maille a de l'ordre de 0.51 nm.

Afin d'obtenir les propriétés structurales de nitrure d'indium dans la phase Zinc blende (InN), nous avons effectué un calcul auto-cohérent (self consistent) de l'énergie totale pour plusieurs valeurs du paramètre du réseau prises au voisinage du paramètre expérimental et on ajuste l'énergie totale en fonction du volume (V), en utilisant l'équation de Murnaghan pour la détermination de l'état fondamental. L'équation de Murnaghan [6] est donnée par l'expression suivante :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'+1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \dots \dots (III.1)$$

Où E_0 , V_0 , B et B' sont respectivement : l'énergie totale, le volume à l'équilibre, le module de compressibilité et sa dérivée. Le module de compressibilité est donné par la formule suivante :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \dots \dots \dots (III.2)$$

Et la dérivée du module de compressibilité B' :

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \dots \dots \dots (III.3)$$

Les calculs ont été effectués en utilisant la méthode des pseudo potentiels et ondes planes (PP-PW), dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)[7] implémentée dans le code ABINIT [8-9]. Les électrons de valence ont été pris respectivement 13 et 5 pour In et N et les configurations électroniques de ces éléments sont similaires [Kr] 4d¹⁰ 5s² 5p¹ et [He] 2s² 2p³, respectivement. L'énergie de coupure dans l'expansion des ondes planes est de 160 Ry. Les interactions entre les ions et la valence les électrons ont été décrits en utilisant les pseudo potentiels à norme conservée [10], ils ont été utilisé pour décrire l'interaction des électrons ioniques dans le cadre de l'approximation de gradient généralisée de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)[11]. La zone de Brillouin est échantillonnée selon un schéma Monk horst –Pack [12] avec des grids de 8 x 8 x 8.

La figure. III. 2. Représente la variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire obtenue par nos calculs, les résultats des paramètres structuraux sont regroupés dans le tableau1. À titre de comparaison, les données expérimentales et théoriques disponibles dans la littérature sont également présentées. Notons que, notre constante de réseau d'équilibre obtenue a_0 est en très bon accord avec la valeur expérimentale et celle rapportée dans Réf [13].

Le facteur de compressibilité et son dérivé par rapport à la pression, à leurs tours, s'accordent très bien avec ceux rapportés dans la Réf [14].

Tableau III-1 : Valeurs des constantes de réseau (a) en Å, module de compressibilité (B) en GPa, la dérivée (B') et l'énergie (E) en (eV) à l'équilibre.

InN	$a(\text{Å})$	$B(\text{Gpa})$	B'	E (eV)
Notre travail	5.0797	118.20	5.11922	-1766.82145
Expérimental [13]	4.98	137	/	/
Autres calculs[14]	4.96 ; 5.04	142.37 ; 123.23	4.69 ; 4.44	/

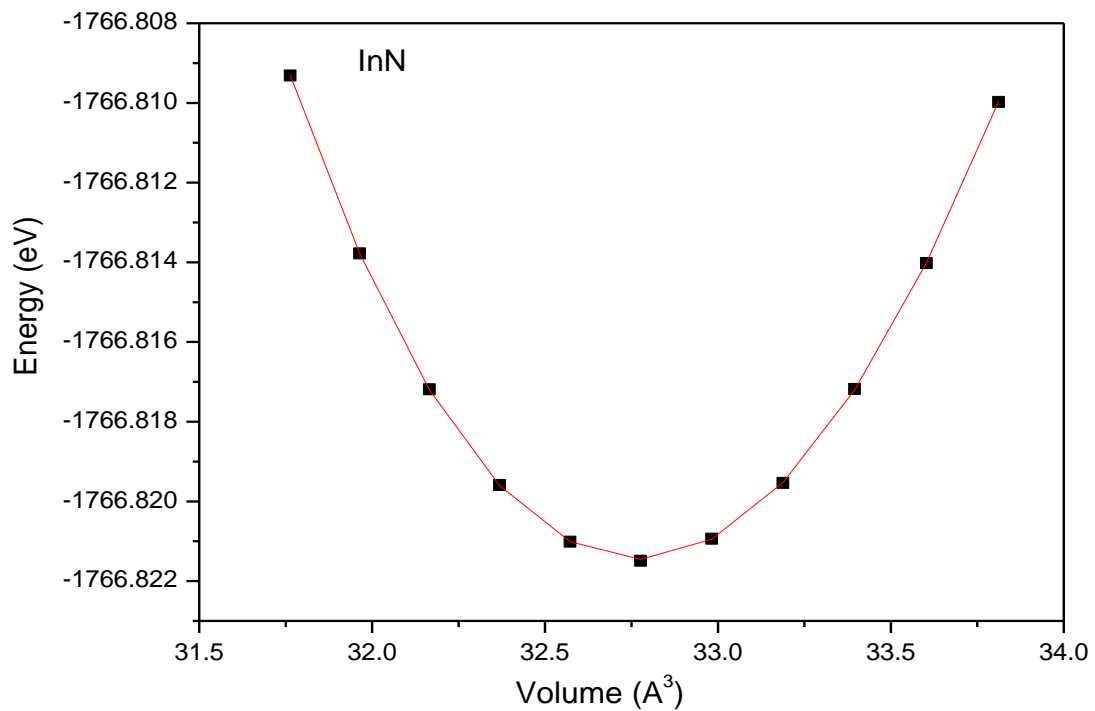


Figure.III.2. L'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de nitrure d'indium (InN)

III.2. Propriétés élastiques :

III.2.1. Introduction :

En science et technologie, les propriétés élastiques des solides sont d'une grande importance, car leur mesure fournit des informations sur les forces de liaison des atomes ou des ions qui composent un solide, qui sont essentielles pour comprendre et expliquer la nature des liaisons chimiques à l'état solide. Les propriétés élastiques décrivent et étudient le comportement mécanique des matériaux et sont importantes pour l'ingénierie

Les constantes élastiques peuvent également déterminer la stabilité mécanique du solide. Pour que le point d'équilibre soit un point d'équilibre stable, la forme quadratique de l'énergie doit être un déterminant positif, ce qui impose des conditions aux constantes élastiques

Les constantes élastiques peuvent être obtenues de plusieurs manières, compris la méthode de Nielsen et Martin, qui est basée sur la déformation du cristal dans différentes directions et le calcul de la déformation résultante à l'aide de la mécanique quantique. Les relations entre la contrainte et la tension sont résolues en décomposant en valeurs individuelles pour obtenir les constantes élastiques

Les matériaux de réseau bravais cubique possèdent trois constantes élastiques indépendantes : C_{11} , C_{12} et C_{44} . Pour le InN, nous avons les résultats représentés dans le tableau 3: À notre connaissance, les données expérimentales de C_{ij} et B des nitrures de zb-III ne sont pas encore disponibles. Nos résultats concordent bien par ceux de la réf [15].

Tableau III.2 : Les constantes élastiques de l'InN.

InN	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
Notre travail	155.006	99.913	75.297
Expérimental	/	/	/
Autres calculs[15];[16]	172 ;163.92	119 ;105.57	37 ;73.251

Pour une structure cubique les conditions de la stabilité mécanique de Born sont données par les inéquations suivantes [17] :

$$(C_{11} - C_{12}) > 0, C_{11} > 0, C_{44} > 0, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \dots \dots (III.4)$$

On remarque que les constantes élastiques de l'InN satisfont bien ces relations donc l'InN est mécaniquement stable dans la phase cubique.

Le comportement élastique d'un système polycristallin n'est décrit que par deux constantes élastiques ; Module de Young (ou rigidité) E et coefficient de Poisson η , module de compressibilité B et module de cisaillement G . Dans le cas général, la rigidité uniaxiale d'un solide ou la résistance solide à la déformation uniaxiale est caractérisée par le module de Young. Il donne les relations suivantes :

Le module de cisaillement G est calculé à partir des équations suivantes :

$$G = \frac{1}{2}(G_R + G_V) \dots \dots (III.5)$$

$$\text{Ou } G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \dots \dots (III.6)$$

$$\text{et } G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}} \dots \dots (III.7)$$

Le module de compressibilité est donné par :

$$B = \frac{(C_{11} + 2C_{12})}{3} \dots\dots (III.8)$$

Le module de Young isotopique (E) est donné par :

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \dots\dots (III.9)$$

Un essai de dureté peut généralement servir à la caractérisation du comportement mécanique des semi-conducteurs. La dureté de Vickers peut être calculée en utilisant la formule empirique suivante [18],

$$H = 2 \left(\left(\frac{G}{B} \right)^2 G \right)^{0.585} - 3 \dots\dots (III.10)$$

Un matériau est ductile si le rapport de Pugh (B / G) > 1.75, sinon il est fragile. La valeur estimée du rapport Pugh est 2.35 donc **InN** est un matériau ductile.

La vitesse de l'onde de cisaillement (V_s) et la vitesse de l'onde de compression (V_p) sont déterminées comme suit [19]:

$$V_s = \left(\frac{G}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \dots\dots (III.11)$$

ρ est la densité ($\rho = m/v$).

$$V_p = \left(\frac{3B+4G}{3\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \dots\dots (III.12)$$

La connaissance de V_s et V_p may permet de calculer la vitesse moyenne du son V_m à travers la relation,

$$V_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_s^3} + \frac{1}{V_p^3} \right) \right]^{-\frac{1}{3}} \dots\dots (III.13)$$

La Température de Debye Θ_D est l'un des paramètres les plus importants liés à la stabilité thermique et à la conductivité thermique du réseau. Elle est peut-être estimée à partir de la vitesse moyenne du son V_m en utilisant la relation,

$$\Theta_D = \frac{h}{K_B} \left(\frac{3n}{4\pi V} \right)^{\frac{1}{3}} V_m \dots \dots \dots (III.14)$$

où h , K_B , n et V sont la constante de Planck, la constante de Boltzmann, le nombre d'atomes dans la maille élémentaire et le volume de la maille élémentaire.

Dans un système cubique, nous avons le facteur d'anisotropie donné par la relation suivante:

$$Z = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} \dots \dots \dots (III.15)$$

on a $A=1$ et l'écart par rapport à 1 est une mesure du degré d'anisotropie. Si $A < 1$ le cristal est plus rigide le long de la direction $\langle 100 \rangle$ du cube, alors que si $A > 1$, il est plus rigide le long des axes $\langle 111 \rangle$. À partir du calcul des résultats de la table, il a été constaté que A pour la composante binaire est différente de 1, ce qui signifie qu'il est anisotrope. Pour le composé binaire étudié $A=2.73$, ce qui signifie que le nitride d'indium (InN) est plus rigide dans la direction $\langle 111 \rangle$.

L'anisotropie élastique du cristal peut être également estimée par la surface tridimensionnelle qui représente la dépendance de la direction du module de compressibilité B (ou de la compressibilité $\beta = 1 / B$) et du module de Young E .

Pour le système cristallin cubique, E et B sont exprimés comme suit [20] :

$$\beta = (S_{11} + 2S_{12})(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) \dots \dots \dots (III.16)$$

$$\frac{1}{E} = S_{11} - 2(S_{11} - S_{12} - \frac{S_{44}}{2})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_1^2 l_3^2) \dots \dots \dots (III.17)$$

Où $l_1, l_2, \text{ et } l_3$ désignent les cosinus directeurs qui relient les directions a, b et c du réseau en coordonnées sphériques et S_{ij} sont les composantes du tenseur de la compliance élastique. Dans la représentation tridimensionnelle (3D) de matériaux élastiquement isotropes, les surfaces fermées du module de Young E et de la compressibilité linéaire β devraient avoir une forme sphérique parfaite. Pour traiter l'anisotropie, nous avons obtenu la dépendance directionnelle à la fois du module d'Young, E, et de la compressibilité linéaire, comme le montre la figure (II. 1) et (II. 2) respectivement. On peut évidemment observer la déviation de la surface fermée par rapport à la forme sphérique. Pour la forme du module de Young E, ce qui indique que cette structure a un certain degré d'anisotropie élastique.

Tableau III.3. Valeurs calculées de module de Young, coefficient de poisson, vitesses d'ondes Vs, Vp et Vm (m/s) et la température de Debye θ_D (K) pour les composés InN.

InN	G(GPa)	E (GPa)	H	Vs(m/s)	Vp (m/s)	Vm(m/s)	Θ_D (K)
Notre travail	50.33	132.24	4.29	2776.04	3205.23	2894.5686	538.82
Expérimental	/	/	/	/	/	/	/
Autres calculs [16]	46.065	123.36	/	2664.03	6924.07	3021.14	445.38

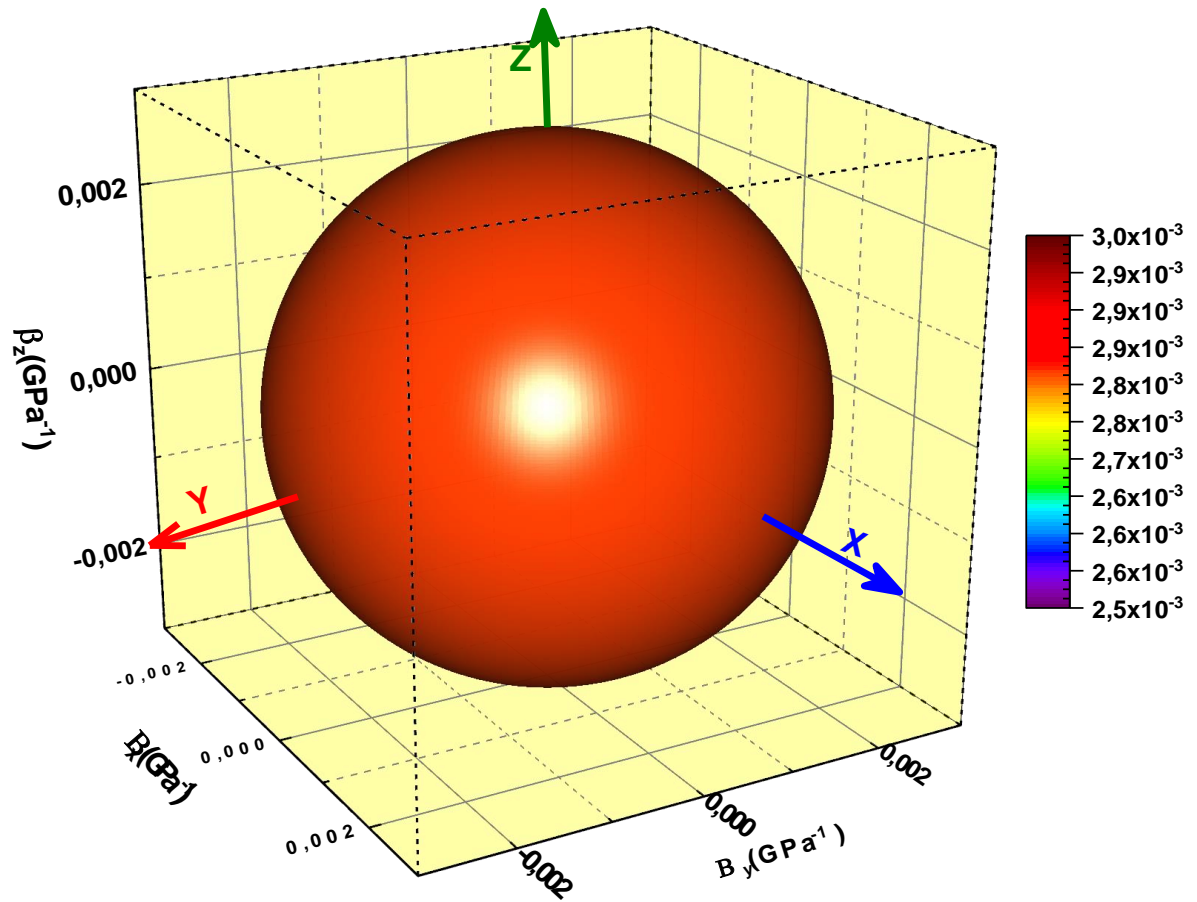


Figure. III.3. Représentation à 3D de la compressibilité denituration d'indium (InN).

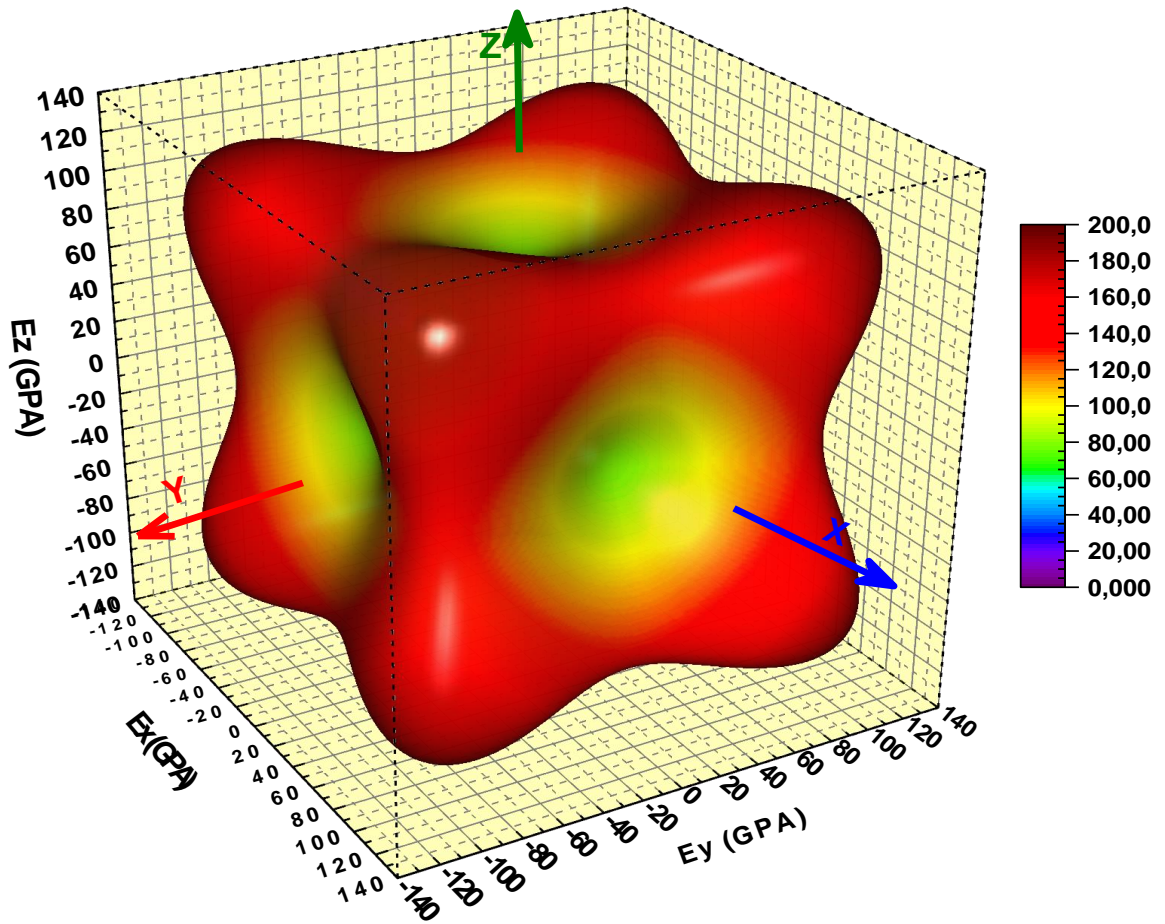


Figure. III. 4. Représentation à 3D du module de Young de nitrure d'indium (InN)

III.3. Propriétés électroniques :

Pour étudier les propriétés électroniques des matériaux, il est nécessaire de comprendre la distribution des bandes d'énergie et leurs origines. La théorie des bandes est une modélisation quantique des valeurs d'énergie dans la physique du solide. Dans cette approche, les électrons ne peuvent pas occuper des niveaux d'énergie, les valeurs d'énergie sont incluses dans certains intervalles d'énergie, qui sont séparés par des « gaps » sont appelés gaps d'énergie ou zone interdites. Cette approche explique clairement la différence de comportement entre les différents matériaux et permet de comprendre les propriétés électroniques. Ces états actifs sont représentés par une région dans l'espace réciproque appelée zone de Brillouin, est définie de manière unique comme la maille primitive dans l'espace réciproque, elle est définie par la même méthode que la maille de Wigner-Seitz dans le réseau de Bravais. La première zone de Brillouin d'un réseau de bravais cubique à faces centrées est représentée dans la Figure (III. 1). Certains points de haute symétrie revêtent un intérêt particulier, et ils sont notés par des lettres majuscules ; par exemple, Γ , **X, L, W, ...**

Γ : ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $K_{\Gamma} = (0,0,0)$

X : ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'un des axes K_x , K_y ou K_z avec l'une des faces carrées. Où :

$$K_x = \frac{2\pi}{a} (\pm 1, 0, 0), K_y = \frac{2\pi}{a} (0, \pm 1, 0), K_z = \frac{2\pi}{a} (0, 0, \pm 1)$$

L : ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont les coordonnées sont

$$K_L = \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1)$$

W : ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées. Les coordonnées sont

$$K_W = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$$

Z : ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre avec les coordonnées

$$K_Z = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{1}{2}, 1\right)$$

Tous ces points sont liés par des directions, elles-mêmes décrites par des symboles. Ces descriptions sont particulièrement utilisées lors de la caractérisation des propriétés électroniques d'un solide, comme par les diagrammes de bandes électroniques.

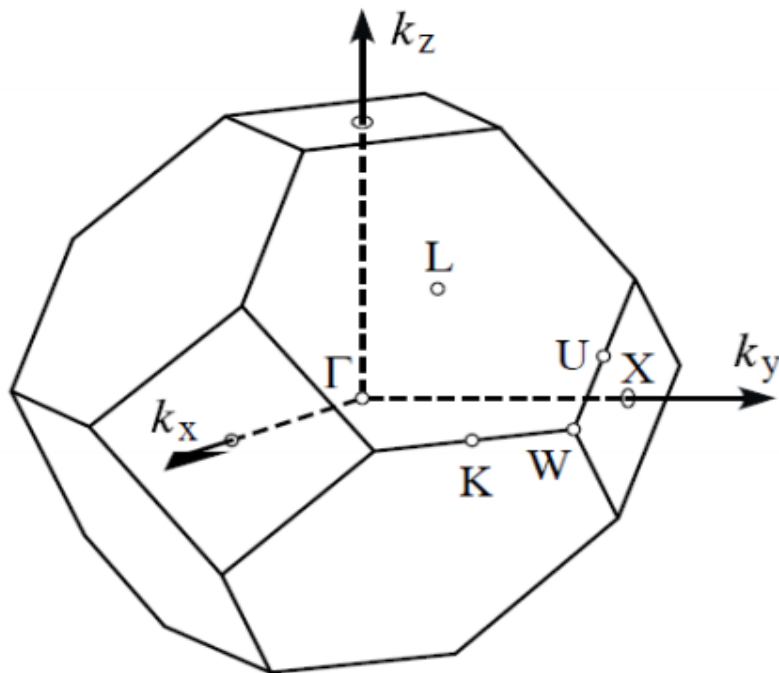


Figure.III. 5. :La première zone de Brillouin d'un réseau de FCC .

La structures de bandes d'énergie pour le composé InN est calculée dans la phase zinc blende est illustrée dans la figure. III. 2., qui nous permet de calculer et regrouper les valeurs des gaps directs et indirects dans le tableau III.1. Le maximum de la bande valence et le minimum de la bande de

conduction se situent au point de haute symétrie (Γ) ($k = 0$), donc le composé InN dans la phase zinc blende est un semi conducteur à gap direct. Les gaps des bandes d'énergie, directe (fondamentale) $\Gamma_v \rightarrow \Gamma_c$, et indirectes $\Gamma_v \rightarrow X_c$, $\Gamma_v \rightarrow L_c$, calculées théoriquement, par autres auteurs et expérimentalement sont démontrées dans le Tableau III. 1. La valeur de gap fondamental obtenue est 0.0eV, inférieure à la valeur expérimentale 0.67 eV. La grande différence entre la valeur calculée et celle de l'expérimental est dû à l'utilisation de l'approximation GGA. Cette approximation sous-estime les gaps d'énergies cela est dû principalement à la simplicité de cette approche.

La densité des états électronique est une grandeur essentielle pour calculer la distribution d'énergie d'électrons dans les bandes de valence et conduction. Pour mieux comprendre la structure de bande, il est intéressant de déterminer les spectres des densités d'états totales et partielles afin d'analyser et connaître le type d'hybridation les états responsables de la liaison. La densité du nitrure d'indium a été calculée, est illustrées sur la figure. III.3. Le niveau d'énergie de fermi est pris comme origine des énergies.

En analysant les DOS partielles et la densité d'états totale (TDOS), la bande de valence peut être divisée en deux parties séparées entre elles par un gap. La première partie de la bande de valence la au voisinage de niveau de fermi (0) est dominée essentiellement par l'orbitale p de l'anion In avec une participation des orbitales s et p de l'atome cation In. Cette hybridation montre l'aspect de la liaison covalente de l'InN.

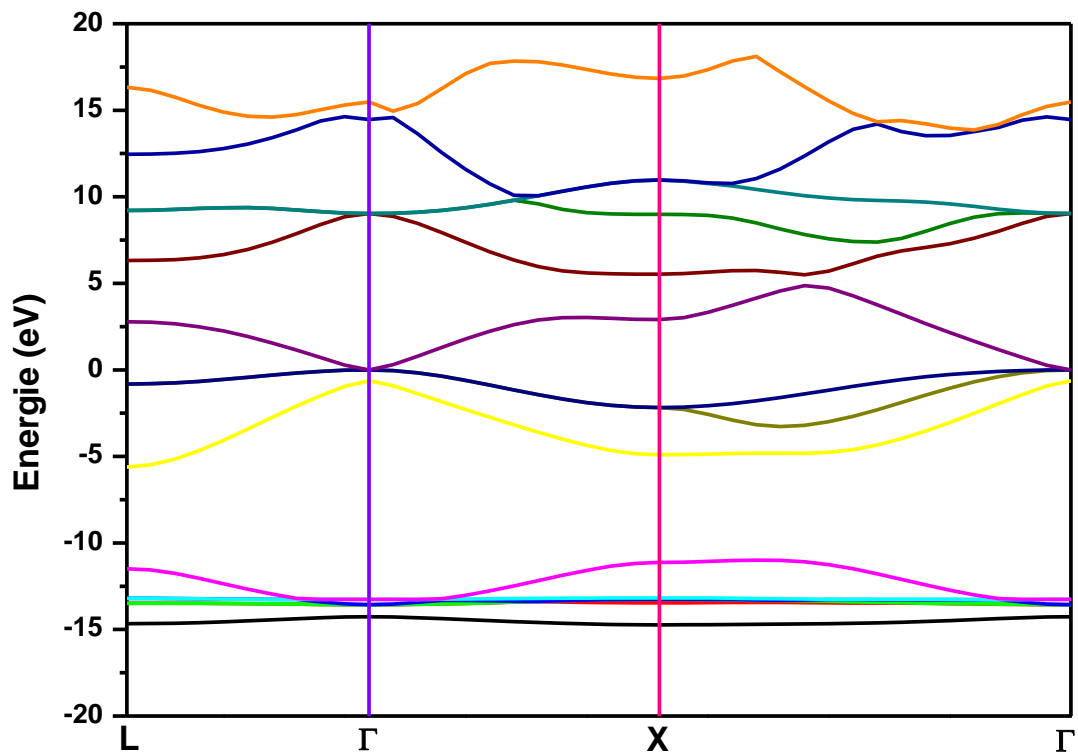


Figure. III. 6. La structure de bandes de nitrure d'indium (InN)

Tableau III.4. Les gaps énergétiques : $E_{\Gamma-\Gamma}$, $E_{\Gamma-L}$, $E_{\Gamma-X}$ et EBV.

InN	$E_{\Gamma-\Gamma}$ (eV)	$E_{\Gamma-L}$ (eV)	$E_{\Gamma-X}$ (eV)	EBV (eV)
Notre travail	0.0	2.784	2.904	14.731
Expérimental [27]	0.7-0.9	/	2.84	/
Autres calculs[25]	0.0	/	2.765	/

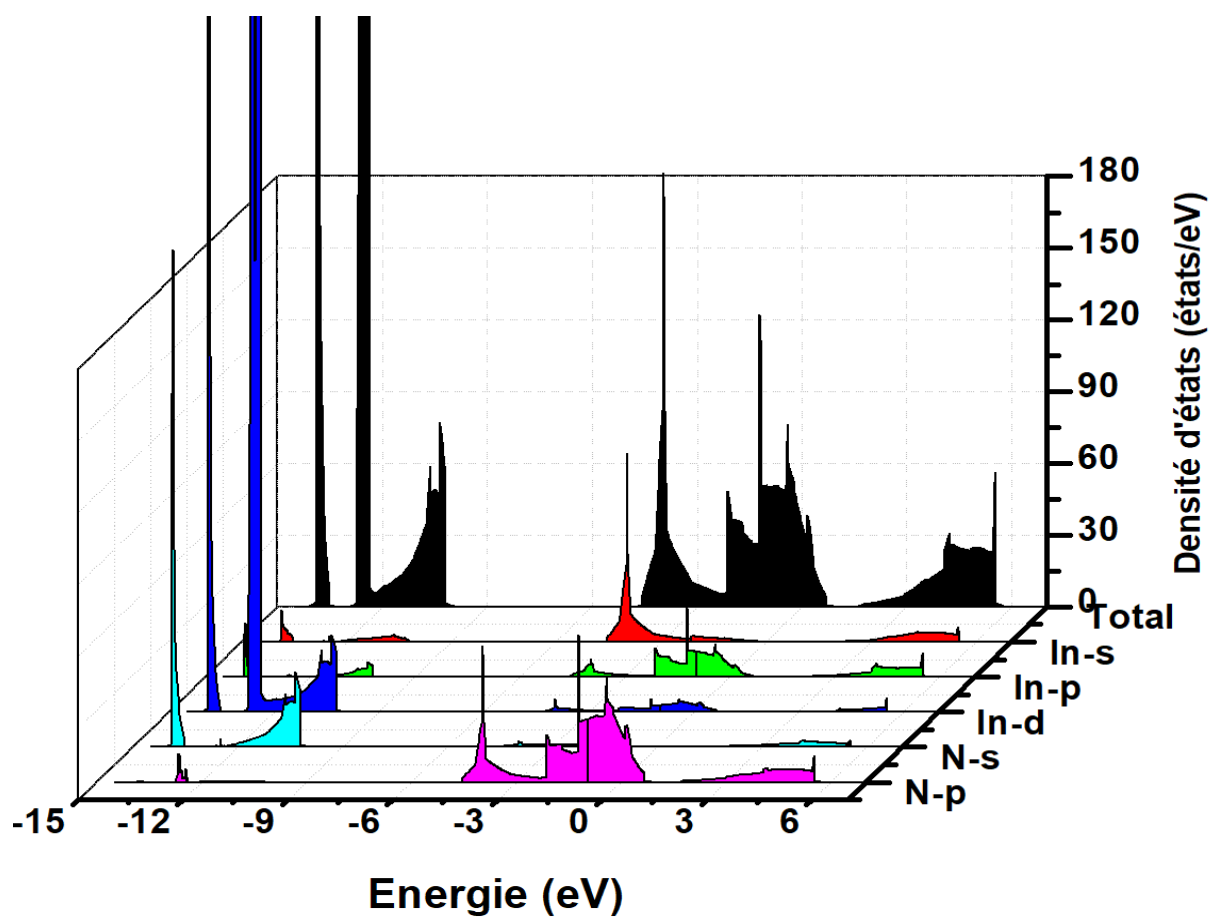


Figure. III. 7. La densité d'états, totale et partiels, de nitrure d'indium (InN)

III.4. propriétés optiques :

Les propriétés optiques ont une relation directe avec la structure électronique de la matière. L'InN est un semi-conducteur à une bande étroite, qui a des propriétés optiques intéressantes dans l'infrarouge et le champ visible, les propriétés optiques sont d'une grande importance pour connaître les façons dont la lumière interagit avec la matière en physique du solide.

L'interaction lumière-matière conduit à plusieurs phénomènes parmi lesquels :

La réfraction : Déviation d'un rayonnement à la surface d'un corps, à l'interface entre deux milieux d'indices différents dans une direction fixée par la loi de Snell- Descartes [38].

L'absorption : Elle se produit au cours de la propagation de l'onde. Si la fréquence de la lumière est résonante avec les fréquences de transition des atomes dans le matériau, le faisceau sera atténué à mesure qu'elle progresse.

La transmission : Elle est clairement liée à l'absorption, parce que la lumière non absorbée sera transmise. L'absorption sélective est responsable de la coloration de nombreux matériaux optiques.

La réflectivité : Tout corps qui reçoit une certaine quantité d'énergie adiante d'une source extérieure peut en réfléchir une partie. Le rapport entre l'énergie réfléchie et l'énergie reçue est appelée coefficient de réflectance.

Fonction diélectrique :

La fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ est indispensable pour décrire le comportement des semi-conducteurs subissant l'effet d'une excitation lumineuse externe. Cette fonction est complexe et elle est écrite comme :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \dots \dots \dots \text{III.18} .$$

Où $\varepsilon_1(\omega)$ est la partie réelle de la fonction diélectrique et $\varepsilon_2(\omega)$ est la partie imaginaire de la fonction diélectrique. Et elle s'exprime sous la forme suivante :

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi e^2}{\Omega \varepsilon_0} \sum_{K,V,C} |\varphi_K^C|^2 |u, r| |\varphi_K^V|^2 \delta(E_K^C - E_K^V - \omega) \dots \text{III.19.}$$

Où e est la charge de l'électron. Ω est le volume de la cellule unitaire. φ_K^C et φ_K^V sont des fonctions propres de type Bloch correspondants à E_K^C et E_K^V respectivement. ω est la fréquence de la lumière incidente. En effet, les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique sont données par la relation Kramers-Kronig [21] :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \dots \text{III.20.}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \dots \text{III.21.}$$

Où :

P est la partie principale de l'intégrale de Cauchy. Avec la connaissance de la fonction diélectrique complexe, d'autres constantes optiques, telles que l'indice de réfraction $n(\omega)$, le coefficient d'extinction $k(\omega)$, le coefficient d'absorption $I(\omega)$, La réflectivité $R(\omega)$ et la fonction de perte $L(\omega)$, peuvent être calculées à l'aide des formules suivantes :

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\varepsilon_1(\omega)) + \sqrt{(\varepsilon_2^2(\omega)) + \varepsilon_1^2(\omega)}]^{1/2} \dots \text{III.22}$$

$$K(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varepsilon_1(\omega) - \sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}]^{1/2} \dots \text{III.23}$$

$$I(\omega) = \sqrt{2\omega} [\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)]^{1/2} \dots \text{III.24}$$

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2} \dots \text{III.25}$$

$$L(\omega) = \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \dots \text{III.26.}$$

Nos résultats calculés de la partie réelle $\varepsilon_1(\omega)$, la partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$, la réflectivité $R(\omega)$, l'indice de réfraction, le coefficient d'absorption $I(\omega)$, la conductivité optique et la fonction de perte en fonction de l'énergie des photons incidents, sont présentés dans les figures. **III.8**, **III.9**, **III.10**, **III.11**, et **III.12** respectivement.

La partie imaginaire de la fonction diélectrique reflète l'absorption du matériau, la courbe de $\varepsilon_2(\omega)$ indique que les premiers quatre points critiques de la fonction diélectrique se produisent à 1.5, 4.73, 6.33, 10.61 et 11.83 respectivement, qui sont attribués à des transitions électroniques des bandes de valence occupées aux bandes inoccupées lors des excitations optiques. La partie réelle de la fonction diélectrique au point 0 est égale à 11.8. Il est bien connu que la limite de fréquence zéro $\varepsilon_1(0)$ est une quantité importante qui représente la réponse diélectrique à un champ électrique statique, la valeur expérimentale de $\varepsilon_1(0)$ n'est pas encore disponible pour faire la comparaison et notre résultat peut servir comme estimation de cette quantité. De plus, le début du spectre énergétique $\varepsilon_2(\omega)$ correspondant à une transition proche de l'écart fondamental direct $\Gamma_v - \Gamma_c$, cela est connu sous le nom de seuil d'absorption.

La partie réelle de la fonction diélectrique devient négative à partir de 10.32 eV jusqu'à 15.63 eV. La permittivité négative signifie que le vecteur de déplacement électrique et le vecteur de champ électrique pointent dans des directions opposées mais cela ne signifie pas nécessairement que l'énergie électrique stockée dans ce milieu est négative. Un matériau à constante diélectrique négative est une clé essentielle pour créer des méta matériaux ou des matériaux artificiels à indice négatif.

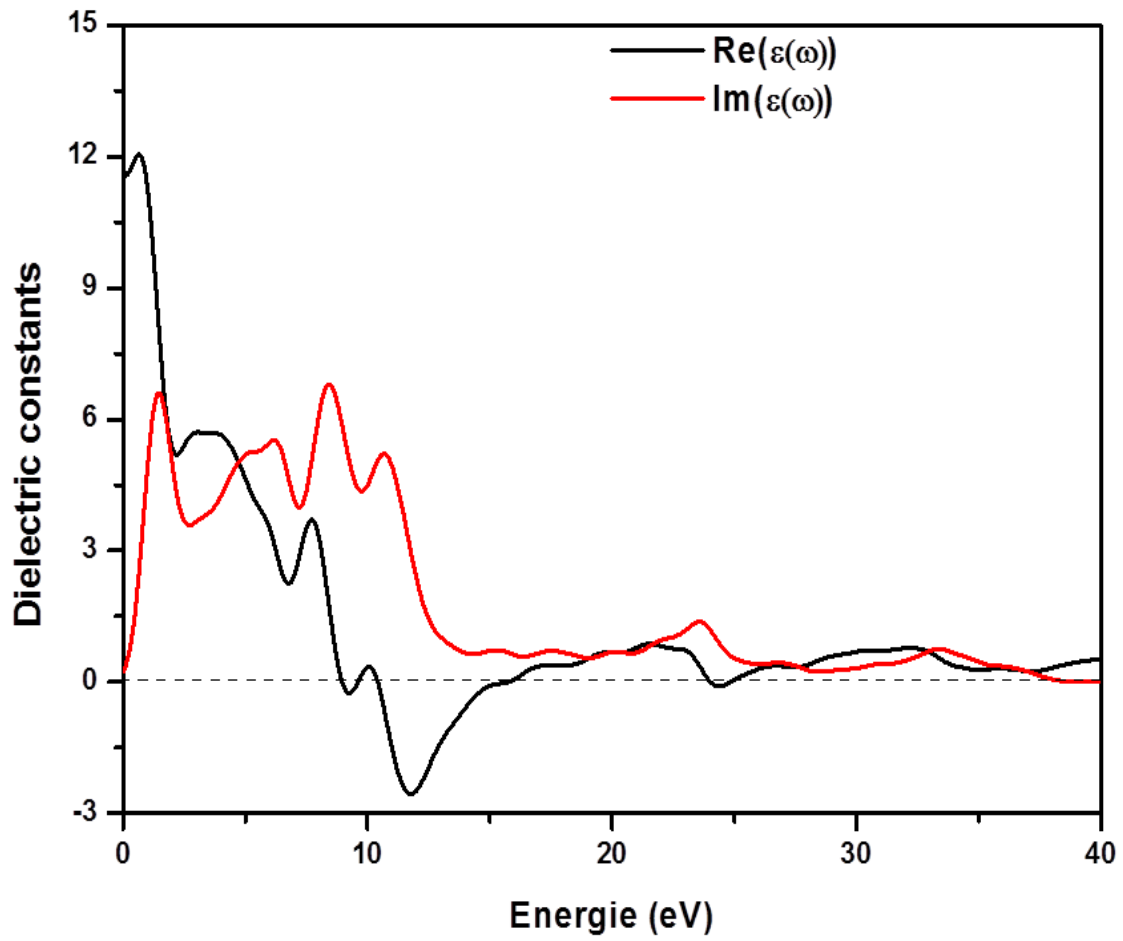


Figure. III.8. Fonction diélectrique, la partie réelle $\epsilon_1(\omega)$ (en noire) et la partie imaginaire $\epsilon_2(\omega)$ (en rouge), de InN.

La réflectivité $R(\omega)$ du composé binaire InN est calculé à l'aide de l'équation (III.25), et illustrée sur la Figure. III.9. La réflectivité maximale correspond à une énergie de (12.5 eV) cette valeur se situe dans la région ultraviolette, et atteint approximativement 55%. Par conséquent, le présent résultat suggère que la structure zb du matériau InN peut servir dans des dispositifs optiques tels que des écrans pour le rayonnement ultraviolet. Ce matériau est réfléchissant dans la gamme d'énergie 0-15 eV.

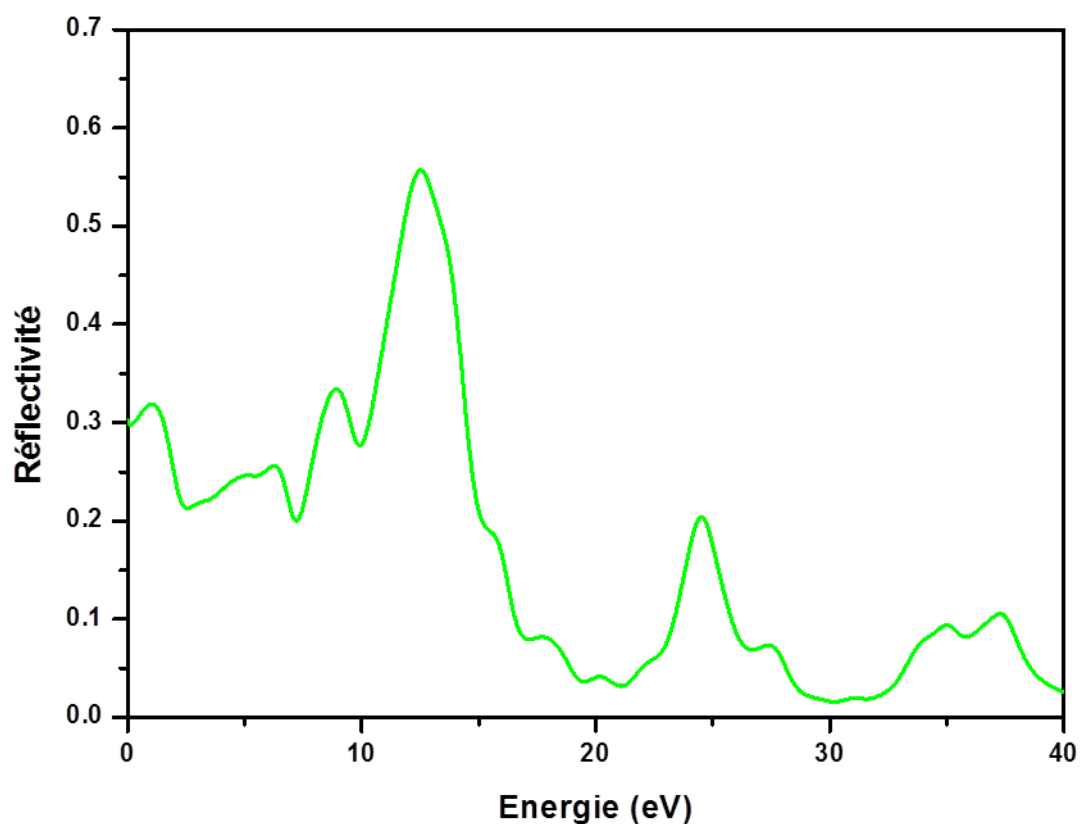


Figure. III. 9:La réflectivité $R(\omega)$ de l'In N.

L'indice de réfraction $n(\omega)$ et l'indice d'extinction $K(\omega)$ de notre composé sont illustrés sur la figure.III.10, l'indice de réfraction statique $n(0)$ égale à 3.45. De plus, le spectre d'indice d'extinction $K(\omega)$ augmente avec l'évolution de l'énergie des photons dans le domaine visible du spectre solaire puis avec un pic dans la région UV à environ 12.3 eV.

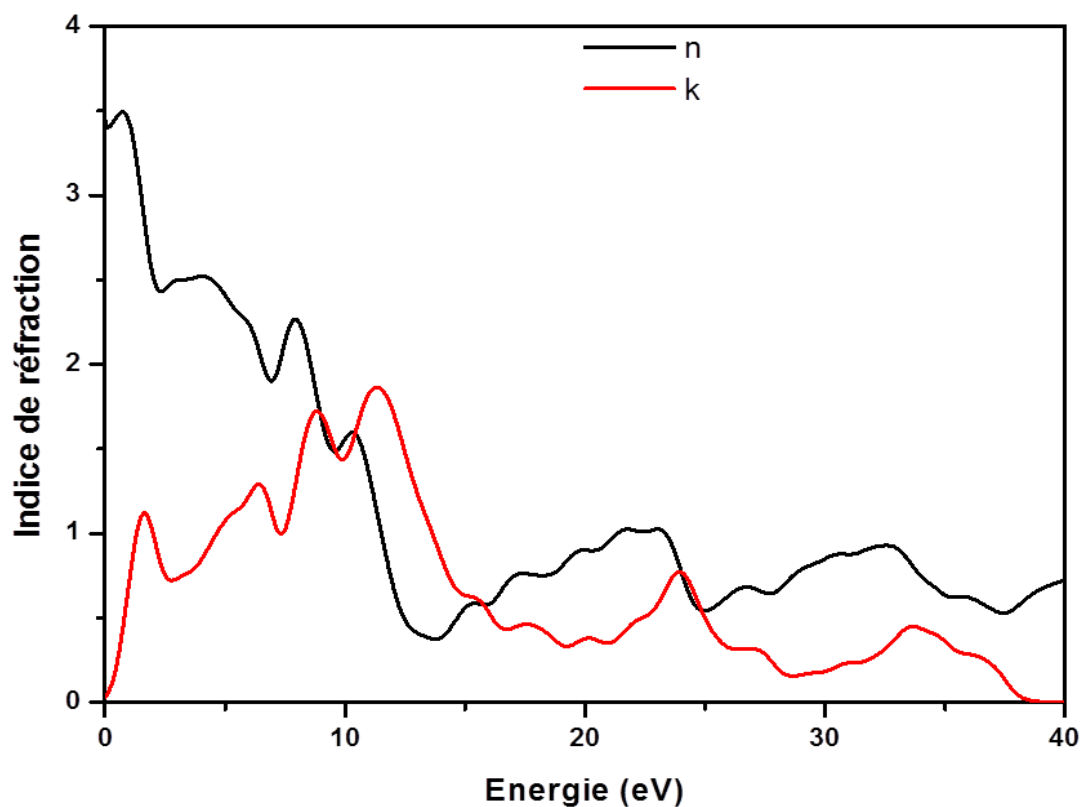


Figure. III. 10. Indice de réfraction $n(\omega)$ (en noir) et spectres d'extinction $k(\omega)$ (en rouge) de l'InN .

La Figure .III.11. montre les résultats de coefficient d'absorption $I(\omega)$ de InN en fonction de l'énergie lumineuse incidente .on peut voir que le bord d'absorption part de valeur d'énergie de (0.7 eV) , correspondant au gap fondamental de l'InN dans la structure Zb. Le coefficient d'absorption est très élevé donc l'InN possède une bonne propriété d'absorption. La région d'absorption de l'InN dans la phase Zb se situe dans le proche-ultraviolet.

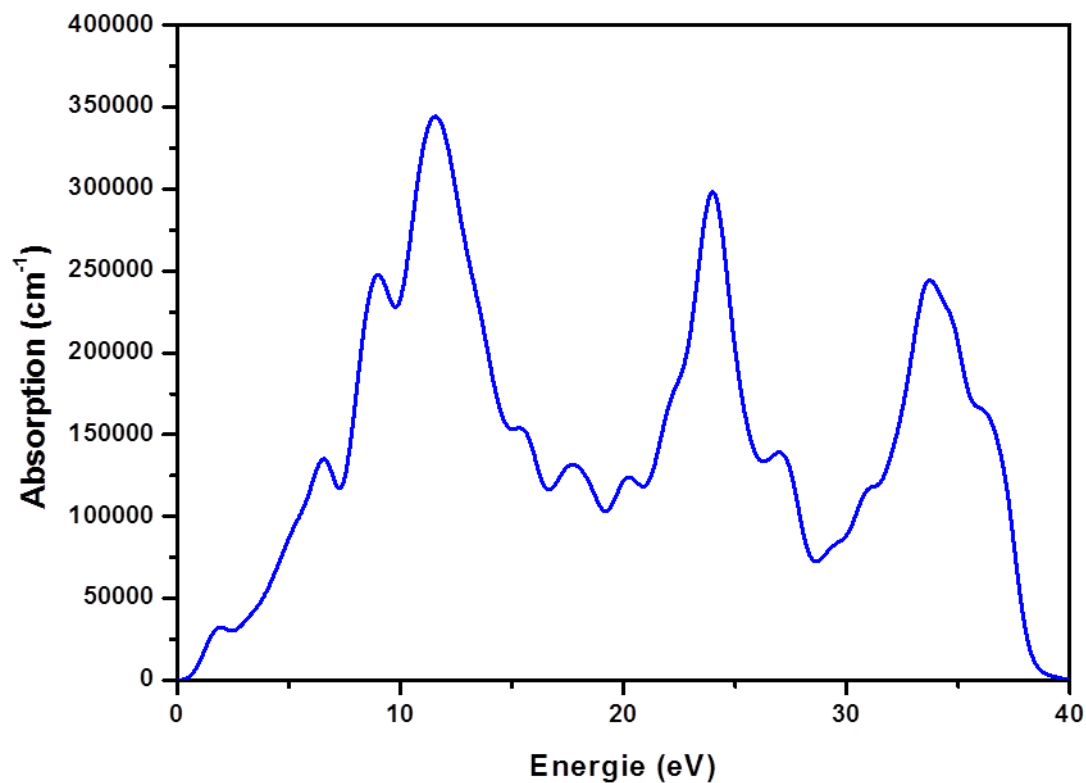


Figure.III.11. Spectre d'absorption $I(\omega)$ de InN.

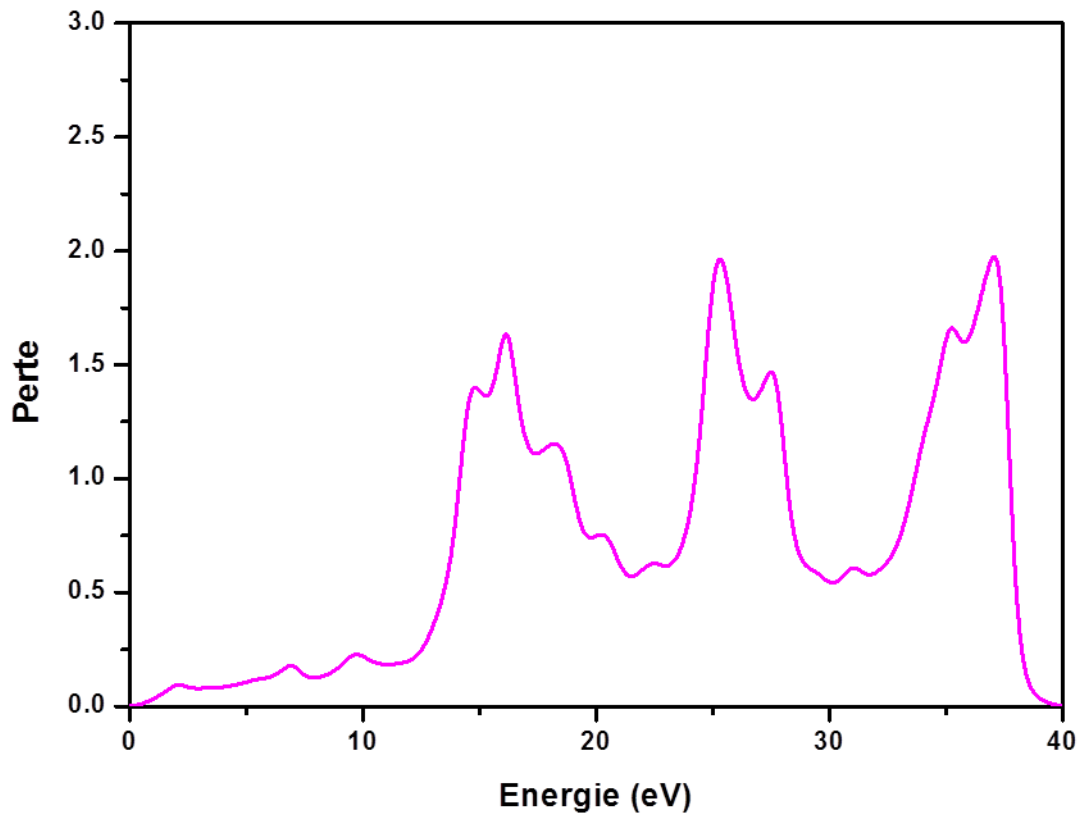


Figure. III.12.La fonction de perte d'énergie de L'InN dans la phase zinc-blende.

La spectroscopie de perte d'énergie des électrons consiste à analyser un spectre par un faisceau d'électrons monocinétiques ayant interagit avec les électrons d'un échantillon. Lors de l'interaction avec le matériau, les électrons perdent une partie de leur énergie: c'est cette perte d'énergie qui est mesurée. Ce spectre donne des informations très diverses. La zone des pertes où apparaissent les plasmons ainsi que les excitons dans les isolants ou semi conducteurs, permet la caractérisation de phases, la mesure de gaps. Cette gamme d'énergie s'étend approximativement de 0 à 40 eV et correspond aux excitations de la bande de valence vers la bande de conduction[28].De la figure III.12., On retrouve ainsi le maximum de perte d'énergie à 16.2 eV pour InN.

References:

- [1] J.H. Edgar, Institution of Electrical Engineers, London, 1994.
- [2] J.W. Orton, C.T. Foxon, Rep. Prog. Phys. 61 (1998) 1 and references cited therein.
- [3] S.C. Jain, M. Willander, J. Narayan, R. van Overstraeten, J. Appl.Phys. 87 (2000) 965 and references cited therein.
- [4] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, J. Appl. Phys. 94 (2003) 3675 and references cited therein.
- [5] S. Nakamura, G. Fasol, Springer, Berlin, 1997.
- [6] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 30 (1944) 5390.
- [7] W. Kohn and L.J. Sham, Phys .Rev,140(1965) A1133-A1138.
- [8] The abinit code is a common project of the UnivrsitéCatholique de Louvain, Corning Incorporated, and other contributors, URL <http://www.abinit.org>.
- [9] X. Gonze, B. Amadon, P.M. Anglade, J.M. Beuken and al. Phys. Commun. 180 (2009) 2582
- [10] N. Troullier, J.L. Martins, Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization, Physical Review' B 43 (1991) 1993.
- [11] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, generalized gradient approximation made simple, Physical Review Letters. 77 (1996) 3865–3868.
- [12] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations' Physical Review. B 13 (1976) 5188.
- [13] J. Serrano, A. Rubio, E. Hernandez, A. Munoz, A. Mujica, Phys. Rev. B 62 (2000) 16612 and references cited therein.
- [14] S. Saib , N. Bouarissa, Physica B 387 (2007) 377–382
- [15]M.E.Sherwin,T.J.Appl.Phys.,Vol.69,No.12(1991)15
- [16]SAADA Sara Etude ab-initio des propriétés physiques des composésbinaires et ternaires à base de Scandium Université Mohamed Khider – BiskraFaculté des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et de la Vie, 2020.

- [17] M. Born, K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattices, Oxford University Press, London, 1954, p. 140.
- [18] X-Q .Chen, H .Niu, D. Li, Y .Li, Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses, Intermetallics.19 (2011)1275–81.
- [19] O.L .Anderson. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants. Journal of Physics and Chemistry of Solids. 24 (1963)909–917
- [20] R. Hill, The elastic behaviour of a crystalline aggregate, Proc. Phys. Soc. 65 (5)(1952) 349.
- [20] R.C. R Graine, F Z Gasmi, R Nouri, H Meradji, R Khenata "First principles calculations of structural,electronic and optical properties of InN compound", International Journal of Modern Physics B 29 (2015)1550028
- [21] V.Y. Davydov, A.A. Klochikhin, R.P. Seisyan, V.V. Emtsev, S.V. Ivanov, F. Bechstedt, J. Furthmüller, H. Harima, A.V. Mudryi, J. Aderhold, O. Semchinova, J. Graul, "Absorption and emission of hexagonal InN.Evidence of narrow fundamental band gap", Phys Status Solidi B, 229 (2002) R1-R3.
- [22] S.-H.W. Pierre Carrier, "Theoretical study of the band-gap anomaly of InN", Journal of Applied Physics,97 (2005) 033707.
- [23] M.Sparvolia, R.D. Mansano, J.F.D. Chubaci, , "Study of Indium Nitride and Indium Oxynitride BandGaps", Materials Research, 16(4) (2013) 850-852.
- [24] S. Adachi, "Properties of Group -IV, III -V and II-VI Semiconductors ", Wiley, England, (2005).
- [25] A .Abdiche,H.Abid,R.Riane and A.Bouaza,"First-principles study of cubic $B_xIn_{1-x}N$ ternary alloys.Acta Physica Polonica Series a 117(6) (2010)921-927
- [26] SAADA Sara, Etude ab-initio des propriétés physiques des composés binaires et ternaires à base de Scandium, Université Mohamed Khider – Biskra Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et de la Vie, 2020
- [27] P. Carrier and S. H. Wei, J. Appl. Phys. 97(2005) 033707
- [28] BETTORKI K'heira, Master, Université Abdelhamid Ben Badis – Mostaganem (2018)

CONCLUSION

GÉNÉRALE

Conclusion Générale

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, mécaniques et optiques du composé binaire nitrure d'indium, InN, en utilisant la méthode des pseudo-potentiels et ondes planes dans le cadre de la théorie de la densité (DFT) avec l'approximation GGA.

L'étude des propriétés structurales du composé InN nous a permis de déterminer le paramètre de maille, le module de compression, sa dérivée première et l'énergie de l'équilibre. Les résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux disponibles dans la littérature.

Nous avons calculé les constants élastiques c_{11} , c_{12} et c_{44} de nitrure d'indium InN dans la phase zinc blende. Nos résultats concordent avec ceux de l'expérimental et théorique. Pour mieux comprendre la stabilité de phase, nous avons calculé les critères de stabilité généralisée pour le nitrure d'indium InN. Nous avons trouvé que le InN est mécaniquement stable dans la phase zinc blende. En plus, nous avons calculé le facteur d'anisotropie élastique de InN. Nos résultats montrent que le facteur d'anisotropie est supérieur à 1.75, donc le nitrure d'indium InN est anisotrope. Les valeurs des rapports de B/G et basant sur la proposition de Pugh on a montré que le InN doit être classé comme matériau ductile.

Nous avons déterminé la structure électronique de nitrure d'indium InN dans la phase zinc blende. Notre calcul de la structure de bandes montre que l'InN adopte un gap d'énergie direct où le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent au point Γ . Les gaps énergétiques calculés pour le nitrure d'indium InN par l'approximation GGA. Les valeurs des gaps sont inférieures aux valeurs expérimentales, cela est dû à l'utilisation de l'approximation

GGA. Cette approximation sous-estime les gaps d'énergies cela est dû principalement à la simplicité de cette approche.

Les propriétés optiques, telles que, la fonction diélectrique, la réflectivité, les indices d'absorption, de réfraction, ...en fonction de la fréquence des photons incidents ont été présentées en détail.

On espère que les résultats présentés pourront fournir des données pour la production d'applications optoélectroniques.

Résumé :

Une méthode de calcul Ab-Initio a été utilisée pour étudier les propriétés structurales, électroniques, mécaniques, élastiques et optique de InN En utilisant l'approximation GGA, la méthode des pseudo-potentiels et ondes planes dans le cadre de la théorie de la densité (DFT) dans la structure cubique (zinc blende), En effet, les structures de bandes et les densités d'états « DOS » obtenus montrent que InN est à gap direct. Une cohérence a été montrée entre nos résultats concernant les propriétés mécaniques et optiques et ceux d'autres calculs théoriques et d'autres données expérimentales.

Abstract:

An Ab-Initio calculation method was used to study the structural, electronic, mechanical, elastic and optical properties of InN using the GGA approximation, the method of pseudo-potentials and plane waves as part of the density theory (DFT) in the cubic structure (zinc blende), Indeed, the band structures and the densities of states "DOS" obtained show that InN is a direct gap semiconductor. Consistency has been shown between our results of mechanical and optical properties and those of other theoretical calculations and other experimental data.

ملخص:

تم استخدام طريقة "ab-initio" لدراسة الخصائص البنيوية, الالكترونية, الميكانيكية, المر ونية والبصرية لشبه الموصل InN, باستخدام تقريب GGA, طريقة الكمون الزائف و الموجات المستوية في إطار نظرية الكثافة (DFT) في الشكل مكعب كبريت الزنك, بناء على ذلك فان بنية عصابات الطاقة و كثافة الحالات المتحصل عليها بينت بأن InN ذو فجوة مباشرة, وقد تبين أن النتائج المحصل عليها للخواص الميكانيكية و الضوئية وتلك الحسابات النظرية والبيانات التجريبية الأخرى متناسقة.

Mots clés :

Structure électronique ; GGA ; ab-initio ; pseudo-potential ; zinc blende ; DFT ; propriétés mécaniques ; propriétés optiques ; InN.