



N° d'ordre :

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Boudiaf - M'sila

Faculté des Sciences

Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique Appliquée : Physique des matériaux intelligents**

Par

Khaouni Reguia

THEME

Etude des propriétés physique des
alliages ternaires $In_xGa_{1-x}N$ par la
méthode mBJ-LDA

Soutenu le : 04 /06/2016

Devant le jury composé de :

Salima Saib

Miloud Ibrir

Moufdi Hadjab

Nadir Bouarissa

Prof Univ. de M'sila

MCA Univ. de M'sila

AR U.D.C.M.A, Sétif

Prof Univ. de M'sila

Président

Rapporteur

Co- Rapporteur

Examineur

Promotion Juin 2016

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Remerciements

La description de tout travail réalisé débute par des remerciements toutefois, il paraît difficile de remercier en seulement quelques lignes et comme je le voudrais toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce mémoire.

*Je tiens à remercier ALLAH qui m'a donné la force de faire ce modeste travail. Je suis heureuse de témoigner de ma profonde estime à mon encadreur Monsieur **Miloud IBRIR** et co-encadreur **Moufdi HADJAB**. Je lui suis très reconnaissant de m'avoir fait bénéficier de ses compétences très scientifiques et d'avoir proposé et dirigé ce travail.*

Il a été très disponible malgré ses charges, il a toujours pris le temps de répondre très clairement à mes questions. Qu'il trouve ici toute ma gratitude.

*Je remercie très sincèrement Madame **Salima SAIB** Maître de conférences à l'université de M'sila, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury de ce mémoire.*

*Je suis très reconnaissante au Monsieur **Nadir BOUARISSA** d'avoir accepté d'examiner ce travail et de me faire l'honneur de participer au jury.*

Mes remerciements vont également à tous les professeurs du département de physique.

Je ne saurais aussi oublier de citer mes amis et mes collègues, ainsi que tous ceux qui ont participé de loin ou de près pour l'élaboration de ce mémoire.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail

A mon chère père qui ma soutenu jusqu'au bout

A ma chère mère que je lui dois tous

A mes frères mounir, ismaïl, îlyasse, híchame et ameur

A mes sœurs : hanane, sara, saïda

A toute la famille KHAOUNI et à tous mes amies

A tous qui m'ont aidé de prés ou de loïn

Khaouni reguia

Sommaire

Sommaire

Sommaire.....	i
Tables des figures.....	iv
Introduction générale.....	vi

CHAPITRE I : NOTIONS THEORIQUES ET METHODES DE CALCUL

I.1. Introduction.....	02
I.2. La théorie de la fonctionnelle de la densité.....	02
I.2.1. Equation de Schrödinger	02
I.2.2. L'approximation de Born-Oppenheimer	04
I.2.3. L'approximation de Hartree.....	05
I.2.4. L'approximation de Hartree-Fock	06
I.2.5. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	08
I.2.5.1. Les théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	08
I.2.5.2. Les équations de Kohn-Sham.....	09
I.2.6. Approximations physiques pour le calcul de V_{xc}	10
I.2.6.1. L'approximation de la densité locale (LDA).....	10
I.2.6.2. Approximation Mbj.....	11
I.3. La méthode des Ondes Planes Linéarisées Augmentées.....	14
I.3.1. Introduction.....	14
I.3.2. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW).....	14
I.3.2.1. La méthode des ondes planes augmentées (APW).....	14
I.3.2.2. Principe de la méthode LAPW.....	17
I.3.3. Les rôles des énergies de linéarisation (E_l).....	18
I.3.4. Le développement en orbitales locale.....	19
I.3.5. Le concept de la méthode FP-LAPW.....	19
I.3.6. Wien2k.....	19

Sommaire

CHAPITRE II : SEMI-CONDUCTEURS

II.1.Introduction	23
II.2.Définition d'un semi-conducteur.....	23
II.3.Défférents types de Semi-conducteurs.....	24
II.3.1.Semi-conducteur interinséque.....	24
II.3.2.Semi-conducteur extrinséque.....	24
II.4.Les propriétés structurales.....	24
II.4.1.Les semi-conducteurs cristallins.....	24
II.4.2.La constante de réseau.....	25
II.4.3.Les semi-conducteurs non cristallins.....	25
II.5.Les Propriétés électronique	26
II.5.1.Gap direct et gap indirect.....	26
II.5.2.Transitions inter bandes.....	26
II.5.3.Structure de bande.....	27
II.6.Propriétés Optiques.....	28
II.6.1.Absorption fondamentale.....	28
II.7.Semi-conducteurs III-V.....	28
II.7.1.Introduction.....	28
II.7.2.Définition d'un alliage.....	29
II.7.2.1.Les semi-conducteurs binaires.....	29
II.7.2.1.Alliage ternaire.....	30
II.7.3.Structure cristalline des semi-conducteurs III-V.....	31

Chapitre III : RESULTATS ET DISCUSSIONS

III.1.Introduction.....	33
III.2.Détails de calculs.....	33
III.3.Les propriétés physiques.....	35
III.3.1.Les propriétés structurales.....	35
III.3.1.1 Structure du bande.....	38
III.3.2. Les propriété optique.....	44

Sommaire

III.3.2.1.La permittivité.....	44
III.3.2.2.L'indice de réflexion.....	47
Conclusion générale	
Références	

Tables des figures

Table des figures

Figure I.1 : Différentes étapes de la résolution des équations de Kohm –Sham.....	13
Figure I.2 : Potentiel « Muffin-Tin » (MT).....	15
Figure I.3 : Le code Wien2k.....	21
Figure II.1 : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.....	25
Figure II.2 : Transitions inter bandes a) directe b) indirecte.....	27
Figure II.3 : L'absorption fondamentale de la lumière.....	28
Figure II.4 : Première zone de Brillouin de la Structure zinc blende.....	31
Figure II.5 : Structure Zinc-Blende (ZB).....	31
Figure III.1 : La variation de l'énergie totale en fonction des volumes pour la l'allige ternaire $In_xGa_{1-x}N$ de déférente concentration d'indium(0% ,25% ,50%,75% ,100%)	36
Figure III.2 : La variation le paramètre de maille et compressibilité en fonction concentration x de $In_xGa_{1-x}N$	38
Figure III.3 : Structure de bandes de GaN.....	39
Figure III.4 : Structure de bandes de $In_{0,25}Ga_{0,75}N$	40
Figure III.5 : Structure de bandes de $In_{50}Ga_{50}N$	41
Figure III.6 : Structure de bandes de $In_{75}Ga_{25}N$	41
Figure III.7 : Structure de bandes de InN.....	42
Figure III.8 : La variation le gap E_g en fonction concentration en utilisant (mBj-LDA)...	43
Figure III.9 : La variation de la partie imaginaire $\xi_2(\omega)$ en fonction d'énergies totale pour $In_xGa_{1-x}N$	46
Figure III.10 : La variation de la partie imaginaire $\xi_1(\omega)$ en fonction d'énergies totale pour $In_xGa_{1-x}N$	47
Figure III.11 : La variation l'indice de réfraction en fonction de l'énergie totale pour $In_xGa_{1-x}N$	48



Introduction générale

Introduction Générale

Un intérêt particulier est porté aux propriétés optiques des semi-conducteurs mises en valeur dans de nombreuses applications pratiques : électronique, énergie solaire, détecteurs optiques, les traitements de signaux, l'optoélectronique ...etc. Actuellement, la nouvelle technologie cherche sa matière première dans le tableau périodique des éléments, en se basant sur la loi naturelle qui affirme que la combinaison de deux matériaux différents ne présente pas une combinaison de leurs propriétés mais donne plutôt naissance à des caractéristiques nouvelles propres à l'alliage. Ce qui a motivé l'apparition de la science et du génie des matériaux qui sont devenus une branche assez importante que la chimie, la physique et la métallurgie. La science des matériaux a pour objectif de la détermination des relations qui existent entre les structures et les propriétés des matériaux, tandis que le génie des matériaux est axé sur la mise au point et la conception des matériaux ayant des structures et des propriétés déjà connues.

L'outil informatique de base qui sert de guide au génie de matériaux est actuellement la modélisation et la simulation numérique, il s'agit de décrire les matériaux par des modèles théorique qui peuvent expliquer les observations expérimentales, et surtout d'effectuer des simulations ou « des expériences virtuelles » qui peuvent prédire le comportement des matériaux là où l'expérience réelle fait défaut, ou qu'elle soit très coûteuse et difficilement réalisable. Ainsi, l'intérêt de la modélisation et la simulation est d'étudier les diverses possibilités qui se présentent, et d'orienter l'industrie ou le génie des matériaux vers les meilleurs choix avec un coût minimum. Aussi nombreuses qu'elles soient, les méthodes de modélisation et de simulation commencent toutes du même principe, à savoir que la connaissance des propriétés d'un matériau donné est étroitement liée à la détermination de son énergie totale.

Le but de ce travail est d'aboutir à une meilleure compréhension des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ à partir d'une étude théorique en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est implémentée dans le code Wien2k. Le potentiel d'échange et de corrélation sont traités dans le cadre de l'approximation LDA et la mBJ-LDA.

Introduction Générale

Ce travail est subdivisé en trois chapitres :

Le premier chapitre traite le principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité(DFT) et présente la méthode ab-initio (FP-LAPW) qui va nous permettre de faire l'étude des propriétés de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Nous avons également décrit les différentes approximations utilisées dans ce travail, ainsi que le code Wien2k.

Dans le deuxième chapitre nous présenterons une généralité sur les semi-conducteurs et leurs propriétés.

Dans le troisième chapitre est consacré à la présentation des résultats de nos calculs des propriétés structurales et électroniques de l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Finalement, on termine par une conclusion générale qui regroupe tous les principaux résultats de ce travail.



Chapitre I:
Notions Théoriques et
Méthodes de Calcul

Chapitre I Notions Théoriques et Méthodes de Calcul

I.1.Introduction

La physique de la matière condensée et la science des matériaux sont des branches qui s'intéressent à la compréhension et l'exploitation des systèmes des électrons en interaction entre eux et avec les noyaux. Le calcul de l'état fondamental d'un système à N électrons dans un cristal est très difficile, chaque particule interagit avec toutes les autres particules. De plus, l'interaction Coulombienne est de longue portée et écrantée, en raison de fortes corrélations entre les électrons.

L'équation de Schrödinger devient de ce fait mathématiquement insoluble. Plusieurs approximations ont été faites pour palier à cette situation difficile. Une des méthodes utilisées est la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), développée par Hoedberg et Kohn [1]. La DFT est la méthode la plus efficace dans le calcul des structures de bandes pour les solides, nous l'utiliserons par conséquent dans cette étude.

I.2.La théorie de la fonctionnelle de la densité

I.2.1.Equation de Schrödinger

Tout corps cristallin peut être considéré comme un système unique composé de particules légères (électrons) et lourds (noyaux). Désignons les coordonnées des électrons par r_1, r_2, \dots et par R_1, R_2, \dots celles des noyaux. L'état stationnaire est décrit par l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{I.1})$$

Où H est l'hamiltonien du cristal, Ψ sa fonction d'onde propre, E, l'énergie du cristal (sa valeur propre) . La fonction d'onde du cristal dépend de toutes les particules qui le composent :

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots; \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \quad (\text{I.2})$$

\vec{r} Représentant les coordonnées généralisées des électrons et \vec{R} les coordonnées des noyaux.

L'opérateur H est l'hamiltonien exact d'un cristal qui résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction : répulsion ou attraction suivant la charge des particules (ions, électrons). $H_{\text{tot}} = T_e + T_z + U_{e-e} + U_{z-z} + U_{e-z} + V$

Dans laquelle les termes T_e , T_z , U_{e-e} , U_{z-z} et U_{e-z} correspondent respectivement :

1- T_e est l'énergie cinétique des électrons :

$$T_e = \sum_i T_i = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) \tag{I.3}$$

2- T_z est l'énergie cinétique des noyaux :

$$T_z = \sum_\alpha T_\alpha = \sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_\alpha \right) \tag{I.4}$$

3- U_{e-e} est l'énergie d'interaction répulsive entre (électron-électron):

$$U_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} \tag{I-5}$$

4- U_{z-z} est l'énergie d'interaction répulsive entre (noyau- noyau):

$$U_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 |R_\alpha - R_\beta|} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} U_{\alpha\beta} \tag{I-6}$$

5- U_{e-z} est l'énergie d'interaction attractive entre (noyau-électron) :

$$U_{e-z} = -\sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - R_\alpha|} \equiv \sum_{i,\alpha} U_{i,\alpha} \tag{I-7}$$

V est l'énergie de toutes les particules dans un champ appliqué

$$V = V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \quad (\text{I.8})$$

L'hamiltonien d'un cristal soumis à l'action d'un champ V pourra donc être représenté sous la forme :

$$H_{\text{tot}} = T_e + T_z + U_{e-e} + U_{z-z} + U_{e-z} + V \quad (\text{I.9})$$

L'équation (I.9) contient $3(Z+1) N$ variables, et puisque on trouve dans un 1cm^3 d'un solide cristallin près de $5 \cdot 10^{22}$ atomes, il est plus qu'évident que l'on ne saurait obtenir une solution car il s'agit d'un problème à N corps, que n'est résolu qu'en moyennant un certain nombre d'approximations. A l'ordre zéro on fait appel à l'approximation de Born-Oppenheimer ou l'approximation adiabatique. [2. 3]

I.2.2.L'approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer appelée aussi approximation adiabatique tient compte de ce que le caractère du mouvement des particules légères (électrons) et lourdes (noyaux) des atomes fortement différent. Pour des particules aussi rapides que les électrons, c'est la position instantanée des noyaux qui importe. Quant aux noyaux, leur mouvement ne pourrait être affecté par la position instantanée des électrons ; ce n'est que la moyenne des mouvements de l'ensemble des électrons des électrons que peut avoir de l'importance.

L'hypothèse la plus grossière que l'on pourrait faire est celle qu'imposerait que les noyaux atomique soient immobiles. $\vec{R}_\alpha = \vec{R}_\beta$ En adoptant cette hypothèse, on simplifie notablement l'équation de Schrödinger, puisque l'énergie cinétique des noyaux devient nulle, l'énergie d'interaction des noyaux devient constante que l'en peut, par un choix convenable de l'origine. Compte tenu de ce que $T_z = 0$ et $U_{z-z} = 0$ nous pouvons définir une fonction d'onde Ψ_e comme fonction d'onde des électrons, et un nouveau hamiltonien des électrons dit l'hamiltonien électronique qui est donnée par :

$$H_e = T_e + U_{e-e} + U_{e-z} \quad (\text{I.10})$$

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

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{I.11})$$

$$\left[\sum_j \left(\frac{-\hbar}{2m} \Delta_i \right) + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,\alpha} \frac{ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha^0|} \right] \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (I.12)$$

Cette approximation réduit de manière significative le nombre de variables nécessaire pour décrire la fonction Ψ_e . En outre, tous les termes de l'hamiltonien impliquant les noyaux sont éliminés, Cette approximation ne suffit cependant pas à elle seule de résoudre l'équation de Schrödinger, cause de la complexité des interactions électron-électron. C'est Pourquoi elle est très souvent couplée à l'approximation de Hartree – Fock [2. 3].

I.2.3.L'approximation de Hartree

Mise au point par Hartree en 1928, elle consiste à considérer la fonction d'onde totale d'un système poly-électronique comme étant le produit d'un ensemble de fonctions d'ondes mono électroniques, chacune solution de l'équation de Schrödinger d'un électron dans un potentiel moyen effectif V_{eff} (potentiel de Hartree) qui tient compte de l'interaction de ce dernier avec les autres électrons

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)\dots\Psi_N(r_N) \quad (I.13)$$

Les équations de Schrödinger mono-électronique dans l'approche de Hartree s'écrivent :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_i(r) + V_{eff}(r) = E_i \Psi_i(r) \quad (I.14)$$

Le potentiel effectif est la somme de ces deux contributions :

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_H(\vec{r}) + V_N(\vec{r}) \quad (I.15)$$

V_N : Le potentiel d'interaction électron- tous autres noyaux.

$$V_N(\vec{r}) = -ze^2 \sum_R \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} \quad (I.16)$$

V_H : Le potentiel de Hartree.

$$V_H(\vec{r}) = - \int d^3 r' \rho(r') \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (I.17)$$

Il est important de signaler que le terme (I.14) est à un seul centre, en \mathbf{r} , alors que (I.17) est à deux centres, \mathbf{r} et \mathbf{r}' . Nous en verrons la conséquence dans les approches suivantes. Les fonctions propres résultant de la solution de l'équation (I.14) permettent de calculer une nouvelle densité électronique :

$$\rho(r) = \sum_i \psi_i(r)^* \Psi_i(r) \tag{I.18}$$

La relation (densité – potentiel) est obtenue par l'équation de poisson :

$$\Delta V_H(r) = -\rho(r)/\xi_0 \tag{I.19}$$

Ou $V_H(r)$ est le potentiel de Hartree en \mathbf{r} et $\rho(r)$ est la densité électronique. ξ_0 est le constant diélectrique du vide. Ceci sous-tend bien le cycle auto-cohérent, puisque la fonction d'onde et densité électronique (et donc le potentiel) sont interdépendantes. Un grand mérite de cette approche est donc d'avoir proposé une solution auto-cohérente au problème du système électronique [1,4].

I.2.4.L'approximation de Hartree – Fock

Les simplifications résultant de l'approximation de Born-Oppenheimer montrent que la fonction d'onde des électrons doit satisfaire aux équations :

$$H_e \Psi_e = H_e \Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E_e \Psi_e(r_1, r_e, \dots, r_N) \tag{I.20}$$

Ou
$$H_e = \sum_{i,j}^N H_i + \frac{e^2}{r_{ij}} \tag{I.21}$$

Avec
$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2 + V(\vec{r}_i) \tag{I.22}$$

L'énergie potentielle $V(r_i)$ représente l'énergie potentielle de l'électron i dans le champ créée par les noyaux [2].

L'équation de Hartree obtenue est simple à résoudre, mais ne donne pas de très bons résultats. Le défaut principal est que la fonction d'onde de Hartree ne satisfait pas au principe d'exclusion de Pauli [2, 5]. Et si on fait intervenir le principe de Pauli on aboutit à l'équation de Hartree- Fock. [2] Selon le principe de Pauli, la fonction totale du système doit être antisymétrique. Pour le système à deux électrons :

$$\phi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_1(2)\varphi_2(1) \} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) \end{vmatrix} \quad (I.23)$$

Ou voit facilement que :

$$\phi(1,2) = -\phi(2,1) \quad (I.24)$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ Représente le coefficient de normalisation

En généralisant le déterminant (I.23) pour N électrons, on trouve la fonction d'onde antisymétrique pour le système à N électrons :

$$\phi(1,2,3,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) & \dots & \varphi_1(N) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) & \dots & \varphi_2(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(1) & \varphi_N(2) & \dots & \varphi_N(N) \end{vmatrix} \quad (I.25)$$

Satisfaisant au principe de Pauli :

$$\phi(1,2,3,\dots,N) = -\phi(2,1,3,\dots,N) \quad (I.26)$$

C'est ce qu'on appelle le déterminant de Slater. Une fonction d'onde construite à partir de fonction d'onde à une particule est donc un déterminant. Nous savons que cet objet est nul si deux colonnes ou deux lignes sont identiques, cela exprime le fait que deux particules ne peuvent pas être dans le même état quantique, c'est le principe d'exclusion de Pauli [2,6]. Dans le cas d'un grand nombre d'électrons l'équation Hartree – Fock est difficile à résoudre. On montre néanmoins que l'on s'approche graduellement de l'état fondamental en écrivant Ψ comme une somme de déterminant de Slater. Cela rendrait le calcul très ? .lourd du point de vue numérique. C'est pourquoi la méthode de la fonctionnelle de densité (DFT) est souvent utilisée car elle simplifie considérablement et de manière étonnante les calculs.

I.2.5. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Dans la théorie de la fonctionnelle de la densité, les propriétés de l'état fondamental d'un système de particules interagissant entre-elles, sont exprimées en fonction de la densité électronique.

Historiquement, les premières idées de la théorie de la fonctionnelle de la densité furent introduites dans les travaux de Thomas [7] et Fermi [8] en 1927. Notons cependant que la DFT a été réellement établie avec l'apparition des théorèmes fondamentaux exacts d'Hohenberg et Kohn en 1964 [9] qui relient l'énergie de l'état fondamental et sa densité de façon unique.

I.2.5.1. Les théorèmes de Hohenberg et Kohn

La DFT s'est donnée pour but de déterminer, à l'aide de seule connaissance de la densité électronique, les propriétés de l'état fondamental d'un système composé d'un nombre fixé d'électrons en interaction coulombienne avec des noyaux ponctuels.

Elle repose sur un théorème fondamental qui se divise en deux parties, démontré par Hohenberg et Kohn.

Les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn formulés en 1964 ont permis de donner une cohérence aux modèles développés sur la base de la théorie proposée par Thomas et Fermi à la fin des années 1930 [10].

a. Premier Théorème :

« La densité électronique $\rho(\mathbf{r})$ détermine le potentiel externe »

Pour tout système de particules en interaction dans un potentiel externe $V_{ext}(r)$ le potentiel $V_{ext}(r)$ est uniquement déterminé, à une constante additive près, par la densité $\rho_0(r)$ de la particule dans son état fondamental.

Ce théorème signifie qu'il suffit de connaître seulement la densité électronique pour déterminer tous les fonctions d'ondes. 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 ρ_0 , comme suit :

$$E = \langle \varphi | H | \varphi \rangle = F[\rho] + \int V_{ext}(\mathbf{r}) \rho(\vec{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{I. 30})$$

$$F[\rho] = \langle \varphi | U + T | \varphi \rangle \quad (\text{I.31})$$

T et U sont respectivement l'énergie cinétique et l'interaction inter-particules qui ne dépendent pas du potentiel extérieur. Au sein de l'approximation de Hartree, les fonctionnelles de la densité électronique s'écrivent comme suit :

$$F[\rho] = \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' T[\rho] \quad (\text{I.32})$$

$T[\rho]$ Représente l'énergie cinétique plus la différence entre l'énergie d'interaction vraie et celle donnée par le terme d'interaction de Hartree. Les fonctionnelles de la densité électronique $T[\rho]$ et $F[\rho]$ sont valable quel que soit la forme du potentiel extérieur et le nombre d'électrons [10].

b. Second Théorème :

La fonctionnelle de l'énergie totale du tout système à plusieurs particules possède un minimum qui correspond à l'état fondamental. La densité de particules de l'état fondamental vérifie :

$$E(\rho) = \text{Min}E(\rho) \quad (\text{I.33})$$

Hohenberg et kohn ont montré que la densité réel qui correspond 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.2.5.2. Les équations de Kohn-Sham

Ces équations ont pour objectif la détermination des fonctions d'ondes électronique Ψ_i qui minimisent l'énergie totale. Les fonctions d'ondes sont déterminées à partir d'une équation similaire à l'équation de Schrödinger d'une manière auto-cohérente. L'équation est donnée :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V_{ion}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.34})$$

$\Psi_i(\vec{r})$: la fonction d'onde de l'électron i .

$V_{ion}(\vec{r})$: représente le potentiel ionique.

$V_H(\vec{r})$: représente le terme de Hartree donné par :

$$V_H(\vec{r}) = -e \int d^3r' \rho(r') \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (\text{I.35})$$

Le potentiel d'échange-corrélation est obtenu à partir de la dérivée de l'énergie d'échange-corrélation E_{XC} par rapport à la densité :

$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\partial E_{XC}}{\partial \rho(\vec{r})} [\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.36})$$

Donc les équations de Kohn-Sham peuvent s'écrire sous la forme :

$$H\Psi_i(\vec{r}) = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right\} \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (I.37)$$

Ou chaque électron subit l'effet du potentiel effectif créé par tous les noyaux et les autres électrons. Ce potentiel est donné par [10] :

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \int \frac{1}{|\vec{r}_i + \vec{r}_j|} \rho(\vec{r}_j) d\vec{r}_j + V_{xc}(\vec{r}) \quad (I.38)$$

I.2.6. Approximations physiques pour le calcul de V_{xc}

I.2.6.1. L'approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation la plus répandue pour calculer le terme d'échange et corrélation est la Local Density Approximation, ou LDA. Cette approximation fait l'hypothèse que la densité fluctue assez lentement. Elle remplace donc le potentiel d'échange et corrélation en chaque point de l'espace par celui d'un gaz uniforme d'électrons qui interagissent. Le gaz d'électrons est pris de la même densité que la densité au point calculé [11.13].

On peut dès lors définir l'énergie d'échange-corrélation de la manière suivante :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \varepsilon_{xc}(\rho(r)) \rho(r) dr \quad (I.39)$$

$\varepsilon_{xc}(\rho(r))$ est la densité d'énergie d'échange-corrélation par électron.

La LDA est souvent une approximation efficace, même quand la densité fluctue de manière non négligeable. Cependant, elle a certains désavantages, comme une sous-estimation systématique de l'énergie de cohésion des solides et des paramètres de maille.

Depuis 1985 d'énormes efforts ont contribué à l'amélioration des fonctionnelles d'échange-corrélation. Ces travaux ont débouché sur une deuxième génération de fonctionnelles incluant l'inhomogénéité de la densité électronique: ces fonctionnelles prennent donc en compte la densité électronique ainsi que son gradient.

I.2.6.2. Approximation mBJ

Récemment Tran et Blaha ont proposé une approximation alternative pour améliorer le calcul du gap énergétique en modifiant le potentiel de Becke-Johnson.

La fonctionnelle de Tran et Blaha [14] notée (mBJ) est une version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson, cette dernière a prouvé rapidement son efficacité par

rapport aux modes de calculs le plus souvent utilisés tel que LDA [15] ou PBE(la version du GGA pour les solides) [16]

La forme de la version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson [17] est comme suit :

$$v_{x,\sigma}^{mBJ}(r) = cv_{x,\sigma}^{BR}(r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}(r)}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad (\text{I.40})$$

Avec : $\rho_{\sigma} = \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\Psi_{i,\sigma}|^2$ la densité électronique.

$t_{\sigma}(r) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\Psi_{i,\sigma} * \nabla \Psi_{i,\sigma}|^2$ la densité d'énergie cinétique.

$v_{x,\sigma}^{BR}(r) = \frac{1}{b_{\sigma}(r)} \left[1 - e^{X_{\sigma}(r)} - \frac{1}{2} X_{\sigma}(r) e^{-X_{\sigma}(r)} \right]$ le potentiel de Becke-Roussel.

Le potentiel de Becke-Roussel est introduit pour minimiser le potentiel coulombien.

$X_{\sigma}(r)$ est déterminé par une équation non-linéaire impliquant $\rho_{\sigma}, \nabla \rho_{\sigma}, \nabla^2 \rho_{\sigma}$ et t_{σ} .

La fonction b_{σ} est donnée par :

$$b_{\sigma} = \left[\frac{X_{\sigma}^3 e^{-X_{\sigma}}}{(8\pi \rho_{\sigma})} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.41})$$

Le potentiel de Becke-Roussel proposé ici est à peu près équivalent au potentiel de Slater utilisé dans Becke et Johnson[14]. La modification principale se trouve au niveau de l'apparition du paramètre c dans la formule de la fonctionnelle. Notons que si on prend c=1 on retombe sur la fonctionnelle de Becke et Johnson [14]. Ce paramètre a été choisi pour

dépendre linéairement de la racine carrée de la moyenne $\frac{|\bar{\nabla}_{\rho}(r)|}{\rho(r)}$.

La forme proposée pour c est la suivante :

$$c = \alpha + \beta \left(\left(\frac{1}{V_{cell}} \int \frac{|\bar{\nabla}_{\rho}(r')|}{\rho(r')} D^3 r' \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.42})$$

α et β sont deux paramètres libres, V_{cell} est le volume de la cellule unitaire du système.

$$\alpha = -0.012$$

$$\beta = -1.023 \text{ bohr}^{1/2}$$

Le Schéma représenté dans la Figure (I-1) décrivant le processus itératif pour la résolution des équations de Kohm –Sham, commençant par la description de la densité initiale $\rho(r)$ et déterminant par le calcul des propriétés désirées

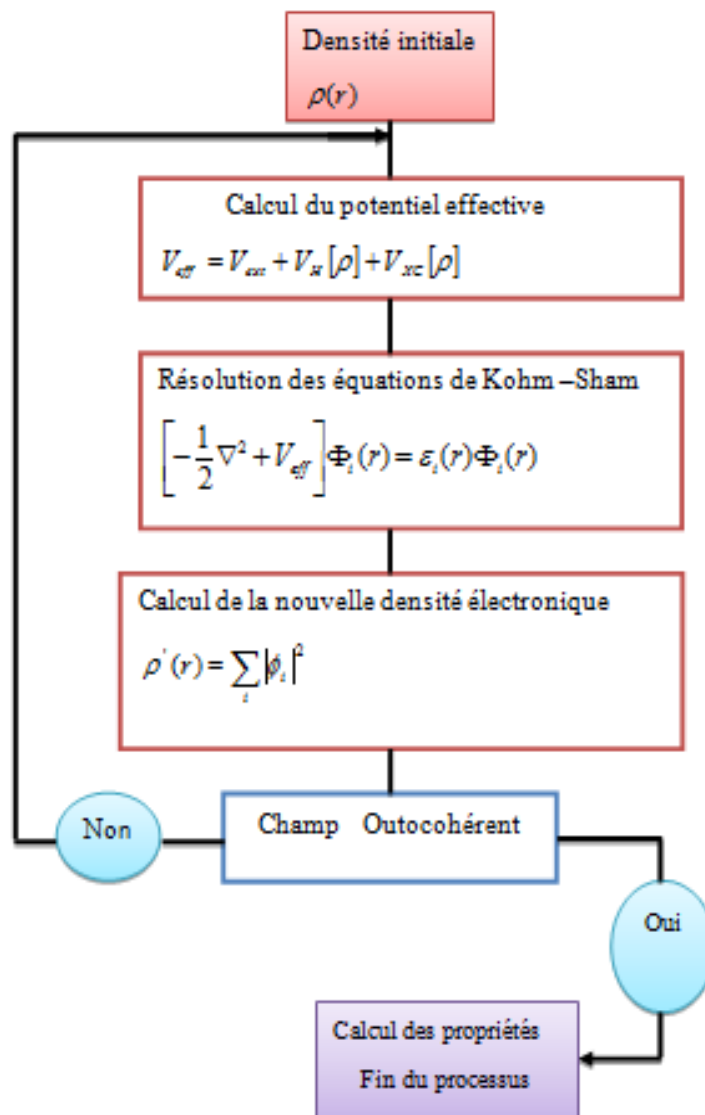


Figure (I-1) : Différentes étapes de la résolution des équations de Kohm –Sham

I.3. La Méthode des Ondes Planes Linéarisées Augmentées

I.3.1. Introduction

Il existe différentes méthodes de calculs de structures électroniques pour la résolution des équations de la DFT. Ces méthodes diffèrent par la forme utilisée du potentiel et par les fonctions d'onde prises comme base. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) est l'une des méthodes les plus précises. Dans cette méthode aucune hypothèse de forme particulière n'est faite au niveau du potentiel.

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW: linearized augmented plane wave), développée par Andersen [18], est fondamentalement une modification de la méthode des ondes planes augmentées (APW) développée par Slater, donc avant d'exposer le principe de LAPW, nous allons revoir les différents aspects de la méthode APW.

I.3.2. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

La méthode LAPW (Linearized Augmented Plane Wave) correspond à une amélioration de la méthode dite des ondes planes augmentées (APW) élaborée par Slater [19, 20, 21]. Rappelons en premier lieu les bases de la méthode APW.

I.3.2.1 La méthode des ondes planes augmentées (APW)

Slater expose la méthode APW (Augmented Plane Wave) dans son article. Il introduisait en 1937 des ondes planes augmentées (APW) comme des fonctions de base pour résoudre les équations à un électron, qui correspondent aujourd'hui aux équations de Kohn-Sham. Dans le schéma de l'APW, la cellule primitive est divisée en deux types de régions :

- ✓ Des sphères (*MT*) concentrées autour de tous les emplacements atomiques constitutifs et de rayons R_α .
- ✓ Une région interstitielle restante.

Au voisinage du noyau atomique, le potentiel et les fonctions d'onde sont de la forme «*Muffin-Tin* » (*MT*) présentant une symétrie sphérique à l'intérieur de la sphère *MT* de rayon R_α . Entre les atomes le potentiel et les fonctions d'onde peuvent être considérés comme étant lisses. En conséquence, les fonctions d'onde du cristal sont développées dans des bases différentes selon la région considérée : solutions radiales de l'équation de Schrödinger l'intérieur de la sphère *MT* et ondes planes dans la région interstitielle (Figure. I.2)

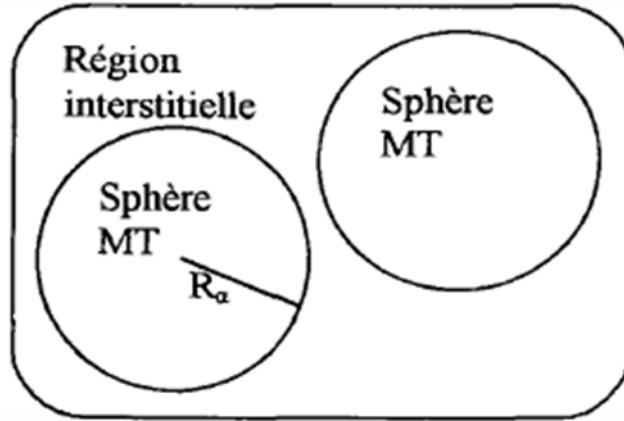


Figure. I.2 : Potentiel « Muffin-Tin » (MT)

Ainsi la fonction d'onde est de la forme :

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+k)r} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (I.44)$$

Où R_α est le rayon de la sphère MT , Ω le volume de la cellule, C_G et A_{lm} les coefficients du développement en harmoniques sphériques Y_{lm} . La fonction $U_l(r)$ est une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale qui s'écrit sous la forme :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} V(r) + l \right\} rU(r) = 0 \quad (I.45)$$

$V(r)$ représente le potentiel *Muffin-Tin* et El l'énergie de linéarisation. Les fonctions radiales définies par (I.45) sont orthogonales à tout état propre du cœur. Cette orthogonalité disparaît en limite de sphère [22] comme le montre l'équation de *Schrödinger* suivante :

$$(E_2 - E_1)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2 rU_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2 rU_2}{dr^2} \quad (I.46)$$

Où U_1 et U_2 sont des solutions radiales pour les énergies E_1 et E_2 . Le recouvrement étant construit en utilisant l'équation (I.46) et en l'intégrant par partie

Slater justifie le choix particulier de ces fonctions en notant que les ondes planes sont des solutions de l'équation de Schrödinger lorsque le potentiel est constant. Quant aux fonctions radiales, elles sont des solutions dans le cas d'un potentiel sphérique, lorsque E_l est une valeur propre. Cette approximation est très bonne pour les matériaux à structure cubique à faces centrées, et de moins en moins satisfaisante avec la diminution de symétrie du matériau. Pour assurer la continuité de la fonction $\varphi(r)$ à la surface de la sphère MT, les coefficients A_{lm} doivent être développés en fonction des coefficients C_G des ondes planes

Existantes dans les régions interstitielles. Ces coefficients sont ainsi exprimés par l'expression suivante

$$A_{lm} = \frac{4\pi^l}{\Omega^{1/2} U_l(R_\alpha)} \sum C_G J_j(k + g | R_\alpha) Y_{lm}^*(k + G) \quad (I.47)$$

L'origine est prise au centre de la sphère, et les coefficients A_{lm} sont déterminés à partir de ceux des ondes planes C_G . Les paramètres d'énergie E_l sont appelés les coefficients variationnelle de la méthode APW. Les fonctions individuelles, étiquetées par G deviennent ainsi compatibles avec les fonctions radiales dans les sphères, et on obtient alors des ondes planes augmentées (APW). Les fonctions APW sont des solutions de l'équation de *Schrödinger* dans les sphères, mais seulement pour l'énergie E_l . En conséquence, l'énergie E_l doit être égale à celle de la bande d'indice G . Ceci signifie que les bandes d'énergie (pour un point k) ne peuvent pas être obtenues par une simple diagonalisation, et qu'il est nécessaire de traiter le déterminant séculaire comme une fonction de l'énergie.

La méthode APW, ainsi construite, présente quelques difficultés liées à la fonction $U_l(R_\alpha)$ qui apparaît au dénominateur de l'équation (I.47). En effet, suivant la valeur du paramètre E_l , la valeur de $U_l(R_\alpha)$ peut devenir nulle à la surface de la sphère MT, entraînant une séparation des fonctions radiales par rapport aux fonctions d'onde plane. Afin de surmonter ce problème plusieurs modifications à la méthode APW ont été apportées, notamment celles proposées par *Koelling* [23] et par *Andersen* [24]. La modification consiste à représenter la fonction d'onde à l'intérieur des sphères par une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_l(r)$ et de leurs dérivées par rapport à l'énergie U_l donnant ainsi naissance à la méthode FP-LAPW.

I.3.2.2.Principe de la méthode LAPW

Fonctions radiales à l'intérieur des sphères. Elles sont des combinaisons linéaires des Fonctions radiales $U_l(r) Y_{lm}(r)$ et de leurs dérivées $\dot{U}_l(r) Y_{lm}(r)$ par rapport à l'énergie.

Dans le cas non relativiste, ces fonctions radiales $U_l(r)$ et $\dot{U}_l(r)$ assurent, à la surface de la sphère MT, la continuité avec les ondes planes de l'extérieur. Les fonctions d'onde ainsi augmentées deviennent les fonctions de base (LAPW) de la méthode FP-LAPW

$$\phi(r) \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{I-48})$$

Où les coefficients B_{lm} correspondent à la fonction \dot{U}_l et sont de même nature que les coefficients A_{lm} . Les fonctions LAPW sont des ondes planes uniquement dans les zones interstitielles comme dans la méthode APW. A l'intérieur des sphères, les fonctions LAPW sont mieux adaptées que les fonctions APW. En effet, si E_l diffère un peu de l'énergie de bande E , une combinaison linéaire reproduira mieux la fonction radiale que les fonctions APW constituées d'une seule fonction radiale. Par conséquent, la fonction U_l peut être développée en fonction de sa dérivée \dot{U}_l et de l'énergie E_l .

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l) \dot{U}_l(E, r) + 0((E - E_l)^2) \quad (\text{I.49})$$

Où : $0((E - E_l)^2)$ représente l'erreur quadratique énergétique.

La méthode LAPW assure ainsi la continuité de la fonction d'onde à la surface de la sphère MT. Mais, avec cette procédure, les calculs perdent en précision, par rapport à la méthode APW qui reproduit, elle, les fonctions d'onde très correctement, tandis que la méthode FP LAPW entraîne une erreur sur les fonctions d'onde de l'ordre de $(E-E_l)^2$ et une autre sur les énergies de bandes de l'ordre de $(E-E_l)^4$. Malgré cet ordre d'erreur, les fonctions LAPW forment une bonne base qui permet, avec un seul E_l , d'obtenir toutes les bandes de valence dans une grande région d'énergie.

Lorsque cela n'est pas possible, on peut généralement diviser en deux parties la fenêtre énergétique, ce qui est une grande simplification par rapport à la méthode APW. En général, si U_l est égale à zéro à la surface de la sphère, sa dérivée \dot{U}_l sera différente de zéro. Par conséquent, le problème de la continuité à la surface de la sphère MT ne se posera pas dans la méthode LAPW. Takeda et Kubler [25] ont proposé une généralisation de la méthode LAPW dans laquelle N fonctions radiales et leurs $(N-1)$ dérivées sont utilisées. Chaque fonction radiale possédant son propre paramètre E_{li} de sorte que l'erreur liée à la linéarisation soit évitée. On retrouve la méthode LAPW standard pour $N=2$ et E_{l1} proche de E_{l2} , tandis que pour $N>2$ les erreurs peuvent être diminuées. Malheureusement, l'utilisation de dérivées d'ordre élevé pour assurer la convergence nécessite un temps de calcul beaucoup plus grand que dans la méthode FP-LAPW standard. Singh [26] a modifié cette approche en ajoutant des orbitales locales à la base sans augmenter l'énergie de cutoff des ondes planes.

I.3.3. Les rôles des énergies de linéarisation (E_l)

Les fonctions U_l et \dot{U}_l sont orthogonales à n'importe quel état de cœur strictement limité à la sphère MT. Mais cette condition n'est satisfaite que dans le cas où il n'y a pas d'états de cœur avec le même l , et par conséquent, on prend le risque de confondre les états de semi cœur avec les états de valence. Ce problème n'est pas traité par la méthode APW, alors que la non orthogonalité de quelques états de cœur dans la méthode FP-LAPW exige un choix délicat de E_l . Dans ce cas, on ne peut pas effectuer le calcul sans modifier E_l .

La solution idéale dans de tels cas est d'utiliser un développement en orbitales locales. Cependant, cette option n'est pas disponible dans tous les programmes, et dans ce cas, on doit choisir un rayon de la sphère le plus grand possible. Finalement, il faut remarquer que les divers E_l devraient être définis indépendamment les uns des autres. Les bandes d'énergie ont des orbitales différentes. Pour un calcul précis de la structure électronique, E_l doit être choisi le plus proche possible de l'énergie de la bande si la bande a le même l

I.3.4. Le développement en orbitales locale

Dans cette technique, on traite tous les états énergétiques avec une seule fenêtre d'énergie. Tekeda [27], Perta [28], Smrka [29], Shaughnessy [30], et Singh [31] proposent une combinaison linéaire de deux fonctions radiales, les dérivés de ces fonctions par rapport à

l'énergie sont égaux, mais les énergies de linéarisation correspondantes sont différentes. La fonction propre a la forme suivante :

$$\phi_{lm} = [A_{lm}U_l(r, E_{1,l}) + B_{lm}U_l(r, E_{1,l}) + C_{lm}U_l(r, E_{2,l})]Y_{lm}(r) \quad (\text{I.50})$$

Où C_{lm} : sont ses coefficients possédant la même nature de coefficients A_{lm} et B_{lm} .

I.3.5. Le concept de la méthode FP-LAPW

Dans la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves : FP-LAPW) [32] aucune approximation n'est faite pour la forme du potentiel ni de la densité de charge. Ils sont plutôt développés en harmoniques du réseau à l'intérieur de chaque sphère atomique, et en séries de Fourier dans les régions interstitielles. Ce qui est à l'origine du nom « Full-Potential Cette méthode assure donc la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT et le développe sous la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r)Y_{lm}(r) & \text{à l'intérieure de la sphère} \\ \sum_k V_k e^{ikr} & \text{à l'extérieure de la sphère} \end{cases} \quad (\text{I.51})$$

De la même manière, la densité de charge est développée sous la forme :

$$\rho(r) = \begin{cases} \sum_k \rho_k e^{ikr} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} \rho_{lm}(r)Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{I.52})$$

I.3.6 .Wien2k

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode FP-LAPW, implémentée dans le code Wien2k [33]. Les principaux programmes nécessaires pour faire le calcul auto-cohérent sont :

NN : C'est un programme qui donne les distances entre les plus proches voisins, qu'aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.

LSTART : un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bandes, comme des états du cœur avec ou sans orbitales locales.

SYMMETRY : Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM Pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.

KGEM : Il génère une maille k la zone de Brillouin.

DSTART : Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans **LSTART**.

Alors un cycle auto-cohérent est initialisé et répété et jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0 : Génère le potentiel partir de la densité.

LAPW1 : Calcul les bandes de valence, les valeurs propres.

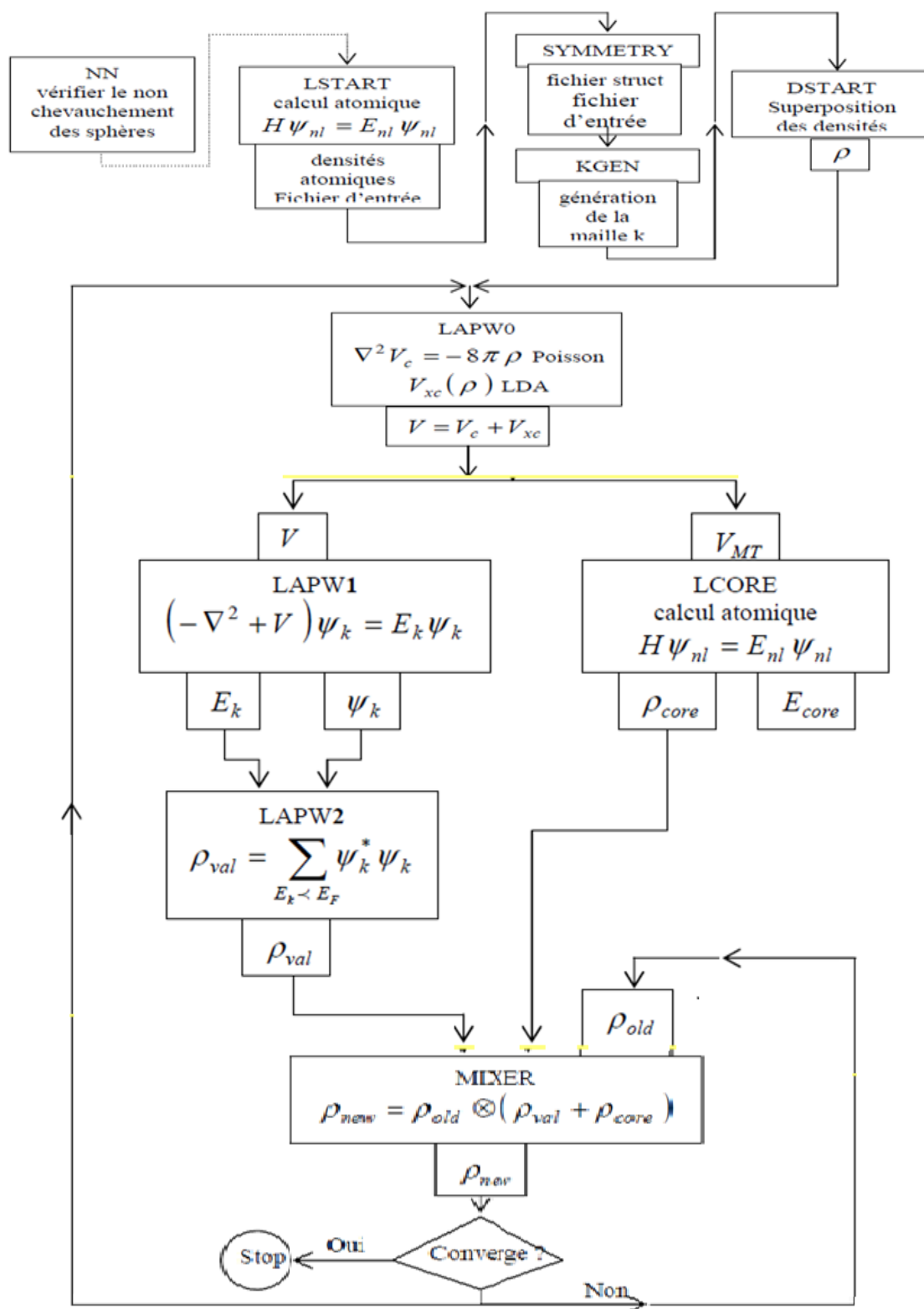
LAPW2 : Calcul la densité de valence.

LCORE : Calcul les états du cœur et les densités.

MIXER : Mélange la densité d'entrée et de sortie.

Le rôle des différents programmes est montré sur la figure I.3.

Figure (I. 3) : Le code Wien2k





Chapitre II:
Semi-conducteurs

Chapitre II Semi-conducteurs**II.1.Introduction**

Les matériaux sont présentés dans de multiples domaines et prennent une place de plus en plus importante dans les systèmes que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour.

On différencie trois types de matériaux : les isolants, les conducteurs et les semi-conducteurs. Ces derniers sont intermédiaires entre les métaux et les isolants : à $T = 0 \text{ K}$ un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semi-conducteurs varie entre $10^3 \Omega \text{ cm}$ et $10^9 \Omega \text{ cm}$, alors que celle des métaux est de l'ordre de $10^6 \Omega \text{ cm}$ et celle des isolants peut atteindre $10^{22} \Omega \text{ cm}$.

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19ème siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Dans un semi-conducteur il existe deux types de conceptions : la conduction par électrons et la conduction par trou [34].

II.2.Définition d'un semi-conducteur

Un semi-conducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductivité électrique sont intermédiaires entre celles des isolants et des conducteurs, elles varient sur plusieurs ordres de grandeur, sous l'effet de :

- La température,
- La présence d'impuretés (dopage)[35].

II.3. Différents types de Semi-conducteurs

II.3.1. Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour 10^{13} atomes de l'élément semi-conducteur).

II.3.2. Semi-conducteur extrinsèque

Un semi-conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semi-conducteur intrinsèque (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semi-conducteur). Selon la nature des impuretés il existe deux types des semi-conducteurs : type n et type p.

- ✓ **Type n** : Considérons par exemple les semi-conducteurs tétravalents tels que *Si* ou *Ge*. Ils cristallisent dans une structure où chaque atome est relié à quatre atomes voisins par des liaisons covalentes. Introduisons un atome ayant cinq électrons de valence (phosphore, arsenic, antimoine...). Il prend la place d'un atome du cristal. Parmi les électrons de l'impureté, quatre participeront aux liaisons avec les voisins et le cinquième restera célibataire. L'atome d'impureté est associé à un niveau d'énergie appelé niveau donneur située juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semi-conducteur est dit de type n.

- ✓ **Type p** : Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore, aluminium ou gallium). Celui-ci ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semi-conducteur est dit de type p [36].

II.4. Propriétés structurales

II.4.1. Semi-conducteurs cristallins

Les caractéristiques physiques fondamentales des semi-conducteurs se manifestent lors que le matériau se trouve à l'état solide particulier, dite état cristallin. L'état cristallin se distingue des autres états solides par le fait que, les atomes s'organisent suivant un ordre

défini .Cet état est engendré par la répétition périodique d'atomes ou de groupement d'atomes (de même nature ou de nature différente) appelé motif du cristal ou maille suivant les trois directions de l'espace et qui permet, par translation, de générer la structure cristalline. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes [37].

II.4.2.La constante de réseau

C'est une grandeur utilisée pour d'écrire la maille d'un cristal, la maille cristalline est définie par trois paramètres a , b , c et par trois angles α , β , λ qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (II.1). Suivant les valeurs relatives de ces six grandeurs on définit les différentes structures cristallines [38].

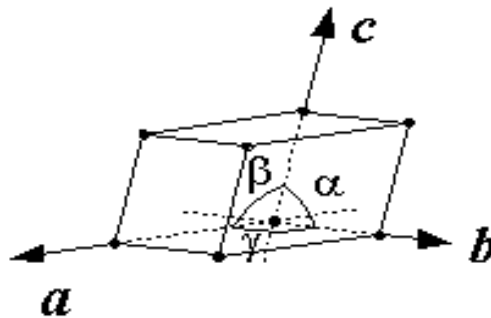


Figure (II.1) : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

C'est pour cela, la détermination de la constante du réseau est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal.

On voit clairement que, la connaissance de cette constante du réseau permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique. Néanmoins ces paramètres de réseau ne sont pas constants, ils peuvent varier en fonction de la température et de la pression.

II.4.3.Les semi-conducteurs non cristallins

Des propriétés semi-conductrices existent même dans des structures non cristallines en cours d'étude, certains matériaux sont promis à un avenir industriel tels que :

- Silicium amorphe,
- Polymères semi-conducteurs,

- Verres semi-conducteurs,
- Semi-conducteurs organiques.

La détermination de toute structure cristalline est principalement basée sur l'utilisation des techniques optiques telles que, la diffraction des rayons x des photons, des neutrons et des électrons. Cette diffraction dépend elle-même de la structure cristalline et de la longueur d'onde de la radiation [39].

II.5. Propriétés Electroniques

II.5.1. Gap direct et gap indirect

- ✓ **Gap direct** : un semi-conducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde K .
- ✓ **Gap indirect** : un semi-conducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde K . la distinction entre les semi-conducteurs à gap direct et indirect est très importante notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [40].

II.5.2. Transitions inter bandes

Au sein d'un semi-conducteur on différencie les transitions radiatives de celles qui sont non radiatives. Les transitions radiatives dites inter-bande sont à leur tour classifiées selon la configuration des bandes du semi-conducteur en transitions directes et indirectes (avec intervention d'un phonon).

- ✓ **les transitions directes ou verticales**

Dans le processus d'absorption directe, un photon est absorbé par le cristal avec création d'un électron et d'un trou. Comme le minimum de la bande de conduction est à la même valeur de \vec{K} que le maximum de la bande de valence (figure II.2), la transition optique a lieu sans changement significatif de, car le photon absorbé a un très petit vecteur d'onde.

✓ **les transitions indirectes**

Dans le processus d'absorption indirecte la largeur minimale de la bande interdite fait intervenir des électrons et des trous séparés par un vecteur d'onde. Dans ce cas une transition directe correspondant à la largeur minimale de la bande interdite ne peut satisfaire à la condition de conservation du vecteur d'onde, ce processus fait intervenir en plus de l'électron et du photon, un phonon. Si un phonon de vecteur d'onde \vec{K} et de fréquence Ω est créé par ce processus, alors nous avons d'après les lois de conservation :

$$\vec{K}(\text{photon}) = K_c + \vec{K} \approx 0 \quad (\text{II.1})$$

L'énergie du phonon est, en général, bien inférieure à E_g (0,01 à 0,03 eV). Dans ce processus d'absorption, un photon est absorbé avec création de trois particules un électron, un trou et un phonon; ce type de processus est moins probable que celui de l'absorption directe. [41]

Dans la Figure (II.2) représenté la Transitions inter bandes a) directe b) indirecte

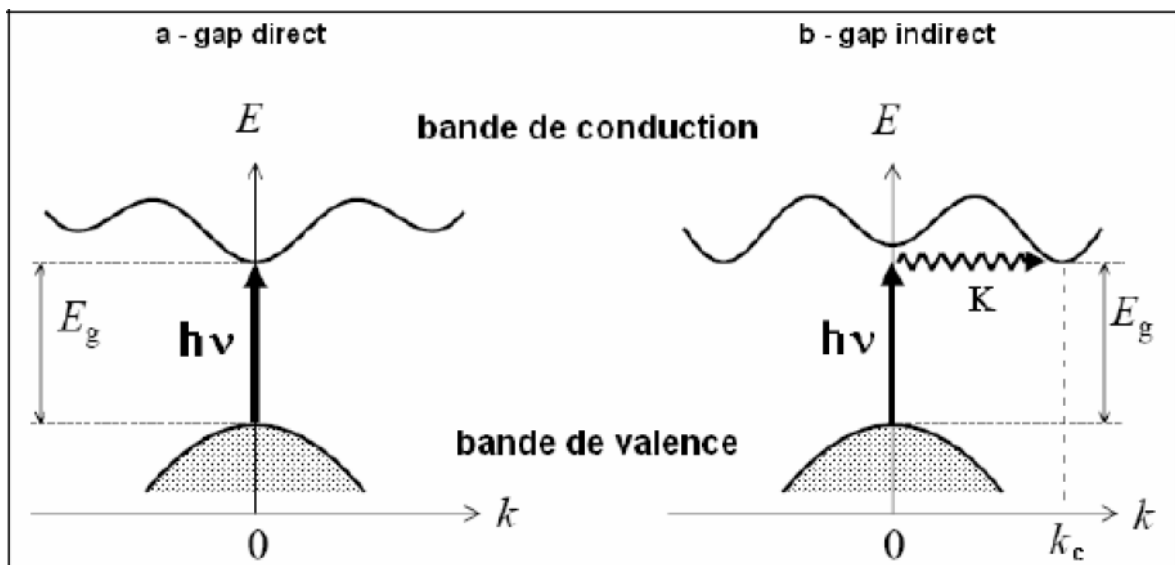


Figure (II.2): Transitions inter bandes a) directe b) indirecte [42].

II.4.3 Structure de bande :

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leurs vecteurs d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour

simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles ne décomposent en bandes de conduction la plus haute, la bande de valence la plus basse, et la bande interdite qui les sépare qui détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur [40].

II.6. Propriétés Optiques

Les propriétés Optiques des semi-conducteurs se manifestent sous forme d'interaction du rayonnement avec les électrons.

II.6.1. Absorption fondamentale

Un photon d'énergie $h\nu$ peut induire le saut d'un électron d'un état occupé de la valence d'énergie E_1 vers un état libre de la bande de la conduction d'énergie E_2 appelé aussi état excité ($h\nu = E_2 - E_1$), c'est l'absorption fondamentale elle est présentée sur la (Figure II.3).

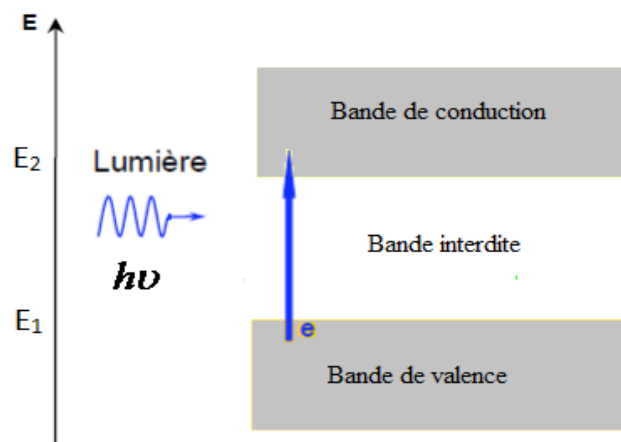


Figure (II.3): L'absorption fondamentale de la lumière [43].

II.7. Semi-conducteurs III-V

II.7.1. Introduction

Les semi-conducteurs III-V sont des composés formés par les éléments des groupes III et V du tableau périodique, dont les propriétés sont généralement similaires à celles des semi-conducteurs du groupe II-VI et IV. En raison du transfert de charge électronique de l'atome du groupe III à celui du groupe V.

L'interaction de Coulomb entre les ions augmente en même temps que la largeur du gap Fondamental. Ainsi, la plupart des semi-conducteurs III-V se caractérisent par une bande interdite (gap énergétique) supérieure à 1eV. Les semi-conducteurs III-V à large bande interdite sont adaptés pour des applications telles que les diodes lasers opérant dans la région visible du spectre, ceux à petite bande interdite sont utilisés dans la fabrication de détecteurs infrarouges [45].

II.7.2. Définition d'un alliage

Le terme alliage désigne un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux, ce terme était réservé durant une bonne période aux métaux, cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux. Le développement rapide des techniques de la croissance cristalline a permis la réalisation de plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires [40].

II.7.2.1. Les semi-conducteurs binaires

Les semi-conducteurs binaires sont composés de deux atomes dont la somme d'électrons de valence des deux atomes égale à huit.

Les semi-conducteurs binaires les plus courants sont les semi-conducteurs composés d'éléments des colonnes III-V et II-VI du tableau périodique.

III	IV	V
$10.81 \text{ } ^5B$	$12.01 \text{ } ^6C$	$14.01 \text{ } ^7N$
$26.98 \text{ } ^{13}Al$	$28.09 \text{ } ^{14}Si$	$30.97 \text{ } ^{15}P$
$69.74 \text{ } ^{31}Ga$	$72.59 \text{ } ^{32}Ge$	$74.92 \text{ } ^{33}As$
$114.82 \text{ } ^{49}In$	$118.69 \text{ } ^{50}Sn$	$121.51 \text{ } ^{51}Sb$

Tableau (II.1) : Les éléments III-V.

II.7.2.3. Alliage ternaire

Si deux éléments binaires AB et AC sont associés, le composé ainsi formé est un alliage Ternaire qui peut être soit :

- Un alliage ternaire anionique AB_xC_{1-x}
- Un alliage ternaire cationique $A_xB_{1-x}C$

Un alliage ternaire est caractérisé par le coefficient stœchiométrique x [40].

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter cette alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [41].

La valeur moyenne $f(x)$ de la propriété physique de l'alliage ternaire, peut être liée linéairement à la concentration stœchiométrique x par la relation suivante :

$$\overline{f(x)}_{A_xB_{1-x}C} = xf_{BC} + (1-x)f_{AC} \quad (\text{II.7})$$

Certaines propriétés suivent une interpolation linéaire, comme le paramètre du réseau donné par la loi de Vegard [44].

$$a_{A_xB_{1-x}C}(x) = \overline{a(x)} = xa_{BC} + (1-x)a_{AC} \quad (\text{II.8})$$

a_{BC} est la constante du réseau du composé BC

a_{AC} est la constante du réseau du composé AC

x est la concentration molaire.

D'autre part, le gap énergétique suit une dépendance quadratique qui est donnée pour la plupart des alliages ternaires par la forme suivante [46,47] :

$$E_{A_xB_{1-x}C}(x) = xE_{BC} + (1-x)E_{AC} + Cx(1-x) \quad (\text{II.9})$$

Avec :

E_{BC} est le gap énergétique du composé BC.

E_{AC} est le gap énergétique du composé AC.

C est appelé « paramètre de courbure » ou « Bowing » prouvé expérimentalement. Ce paramètre est une contribution du désordre du réseau générale dans l'alliage ternaire par suite de la distribution des atomes des composés BC et AC dans les sites des deux sous réseaux [48].

II.7.3. Structure cristalline des semi-conducteurs III-V

Les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines. La plupart des matériaux semi-conducteurs binaire III-V et quelques matériaux II-VI se cristallisent dans la structure Zinc-Blende (ZB) Figure (II.5). Cette structure est constituée de deux sous réseaux cubique faces centrée (cc).

La première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre tronqué Figure(II.4).

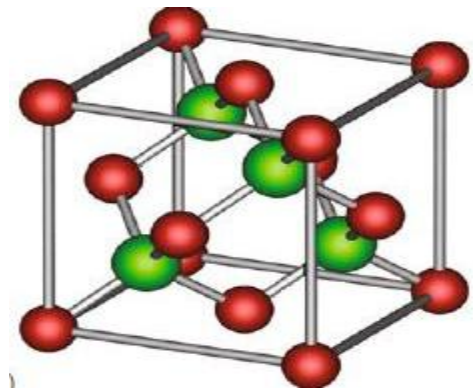
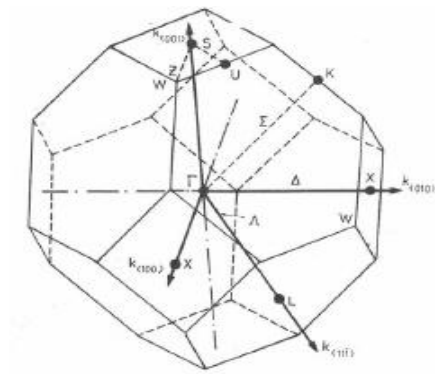


Figure (II.4): Première zone de Brillouin de la Structure zinc blende

Figure(II.5) : Structure Zinc-Blende (ZB)



Chapitre III:
Résultats et discussion

Chapitre III Résultats et discussion

III.1.Introduction

Dans ce travail, on va présenter un calcul des propriétés physiques des composés ternaires semi-conducteur de type $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en utilisant une super-cellule de 8 atomes de différents valeurs de concentration ($x= 0, 0.25, 0.5, 0.75$ et 1) dans la phase Zinc blende, en utilisant des méthodes *ab-initio* basées sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) via la méthode des Ondes Planes Augmentées Linéarisées (FP-LAPW) implémentée dans le code de calcul Wien2K. Pour déterminer les propriétés structurales (paramètres de maille (a), module de compression (B)), En exploitant l'approximation de la Densité Locale (LDA). Alors que pour calculer les propriétés électroniques (les valeurs des énergies de gap (E_g), les structures de bandes et optiques (fonction diélectrique (ϵ), indice de réfraction (n)) on va appliquer une version modifié de potentiel proposé par Becke et Johnson (mBJ-LDA) à notre alliage ternaire InGaN et ses composés binaires InN et GaN. Enfin nos résultats seront comparés avec les valeurs performées expérimentalement et calculées théoriquement.

III.2.Détails de calculs

La première étape, dans notre calcul, consiste de préciser le groupe spatial de la phase de zinc blende 216(F-43m).

La deuxième étape consiste de préciser les valeurs des paramètres inputs :

1 : les positions des atomes pour la phase de Zinc Blende sont Ga et In à $(0, 0, 0)$ et N à $(0.25, 0.25, 0.25)$.

2 : Les valeurs des rayons de Muffin tin (RMT est le rayon moyen des sphères MT) pour l'alliage ternaires $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dans phases Zinc Blende, représenté de façon à bon choix pour éviter le chevauchement des sphères Muffin tin. Ces valeurs sont indiquées dans le tableau (III.1) Suivant :

Matériau	R_{MT}
InN	1.92
$In_{0,25}Ga_{0,75}N$	1.78
$In_{0,5}Ga_{0,5}N$	1.83
$In_{0,75}Ga_{0,25}N$	1.88
GaN	1.83

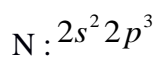
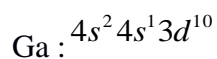
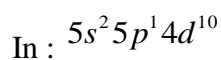
Tableau(III.1) : Valeurs des rayons Muffin tin.

3 : Le paramètre de coupure $R_{MT} \times K_{MAX}$ (K_{MAX} est le module maximum pour le vecteur des ondes planes) : Nous avons choisi $R_{MT} \times K_{MAX} = 9$ Ry.

4 : Le nombre de points k considéré dans la zone de Brillouin : Nous avons choisi $k = 2000$ points pour les binaires et $k = 1000$ pour les alliages ternaires

5 : $G_{max} = 14$ est la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes.

La configuration électronique utilisé pour les éléments est:



III.3. Les propriétés physique

III.3.1. Les propriétés structurales

Pour déterminer les propriétés structurales à l'équilibre statique tel que le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée par rapport à la pression B' nous

avons calculé l'énergie totale E_{tot} pour différentes valeurs du volume de maille primitive, puis on a ajusté les points $E_{tot}(V)$ calculés par une équation d'état de **Murnaghan** [49] donnée par :

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

Où E_0 et V_0 sont l'énergie et le volume à l'équilibre de la maille élémentaire.

B et B' sont respectivement le module compressibilité à l'équilibre et sa dérivée par rapport à la pression.

La constante du réseau a correspondant à l'état fondamental est déduite à partir du minimum de la courbe E_{totale} .

Le module de compression B est déterminé par :

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

La figure (III.1) montre la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour l'alliage $In_xGa_{1-x}N$ de différentes concentrations d'indium (0%, 25%, 50%, 75%, 100%), dans la structure Zinc blende.

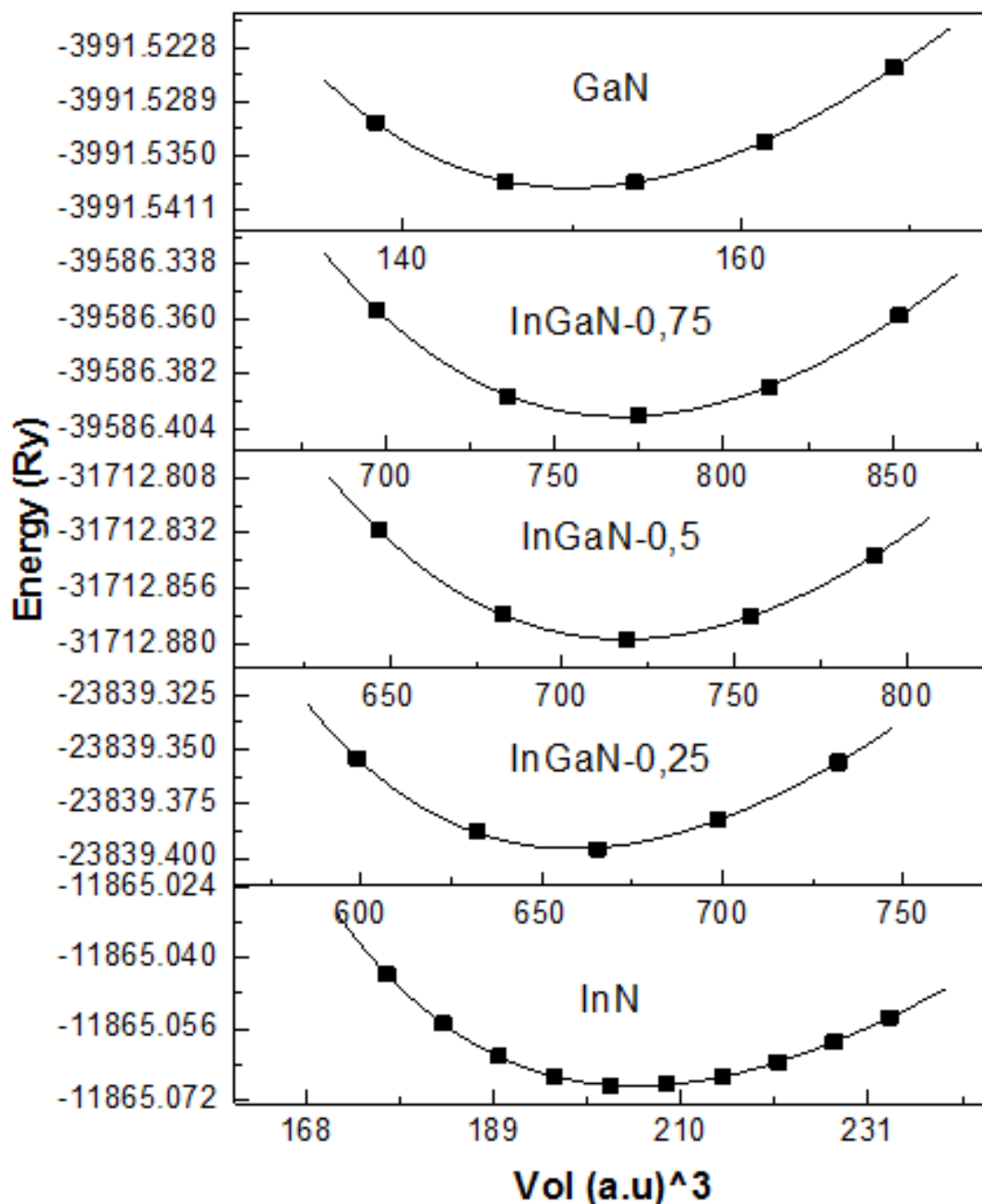


Figure (III.1) : Variation de l'énergie totale en fonction des volumes pour l'alliage ternaire $In_xGa_{1-x}N$ de différentes concentrations d'indium (0% ,25% ,50%,75%,100%).

En comparant nos résultats des paramètres de maille calculés par l'approximation (LDA) avec les valeurs expérimentales, on constate une sous-estimation légère pour le composé InN. Par contre pour le composé GaN, il est sur estimation. Contrairement au paramètre de réseau, le module de compressibilité par rapport à celui de l'expérimental est sous-estimé pour les deux composés binaires. On conclut que les valeurs des paramètres structuraux

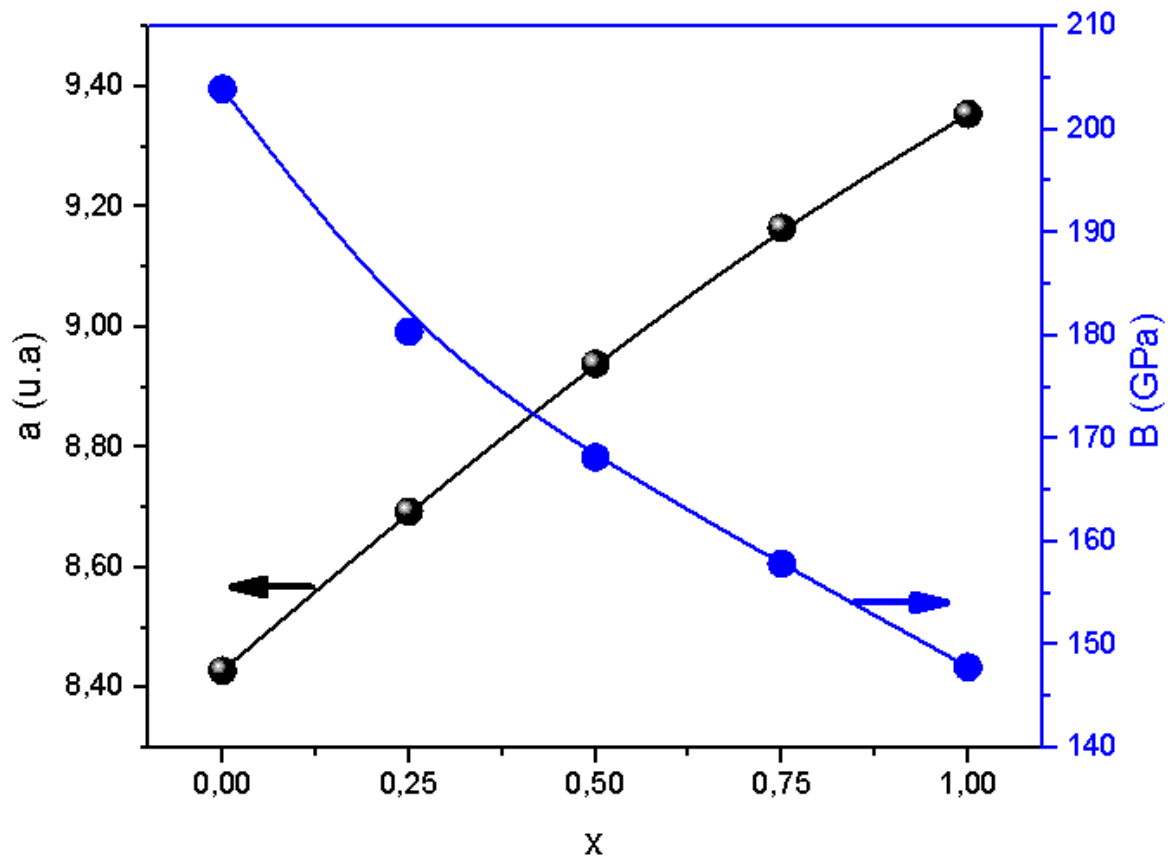
obtenus par l'approximation (LDA) sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales et avec les autres travaux théoriques.

Le paramètre du réseau a et le module de compressibilité B des composés binaires sont représentés sur le tableau suivant :

Matériaux	Paramètre	Nos valeurs	Valeur théo.	Valeur exp.
InN	a (Å)	4.9514	4.9334 ^[50] 4.94788 ^[51]	4.98 ^[53]
	B (GPa)	147.8261	153.67 ^[50] 148.3512 ^[51]	137 ^[54]
GaN	a (Å)	4.4630	4.4637 ^[52] 4.46183 ^[51]	4.5 ^[53]
	B (GPa)	203.9433	205.30 ^[52] 203.66850 ^[51]	185 ^[53]

Tableau(III.2) : Le paramètre du réseau a et le module de compressibilité B

Le module de compressibilité est une propriété qui définit la résistance au changement de volume lorsqu'il est comprimé. L'évolution du module de compressibilité et le paramètre de maille en fonction de la concentration x de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, est illustré dans la figure (III.2) on remarque que le module de compressibilité diminue considérablement quand la concentration s'augmente par contre le paramètre de maille augmente avec l'augmentation de concentration x .



Figure(III.2) : La variation le paramètre de maille et compressibilité en fonction concentration x de $In_xGa_{1-x}N$

III.3.1.1. Structure de bandes d'énergie

Les bandes d'énergie donnent les énergies possible d'un électron en fonction du vecteur d'onde, ces bandes sont représentées dans l'espace réciproque, et simplifier, seules les directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin. Pour les semi-conducteurs le spectre est caractérisé par la présence de bandes de valence et de bandes de conduction sont séparées par une bande interdite ou gap. [50]

Les structures de bandes obtenues pour chaque composé par l'utilisation de l'approximations mBJ-LDA sont presque la même allure, sont illustrées dans les figures(III.3),(III.4),(III.5),(III.6),(III.7), sont illustrées la structure de bandes d'énergie (InN , $In_{0,25}Ga_{0,75}N$, $In_{0,5}Ga_{0,5}N$, $In_{0,75}Ga_{0,25}N$ et GaN), on remarque, pour nos alliages, que la valeur maximale de la bande de valence est au point Γ et que la

valeur minimale de la bande de conduction est au point Γ , c'est-à-dire que est à gap direct (Γ - Γ),

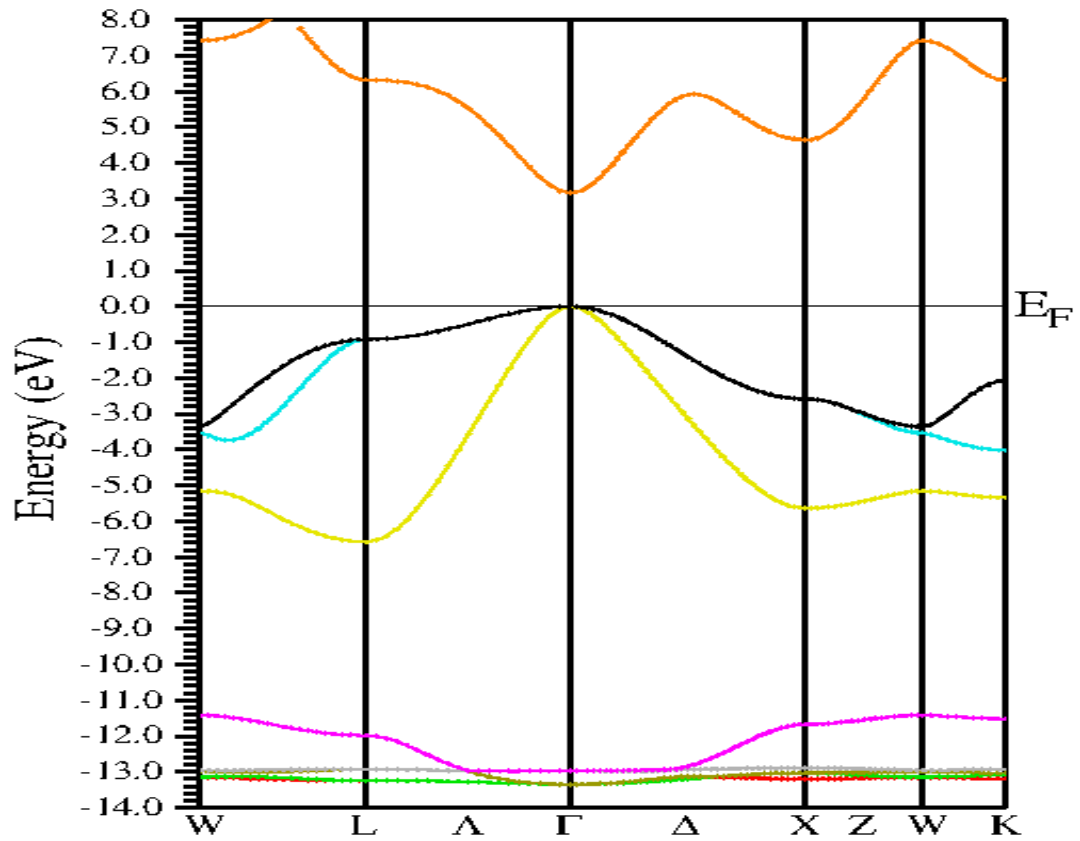


Figure (III.3) : Structure de bandes de GaN.

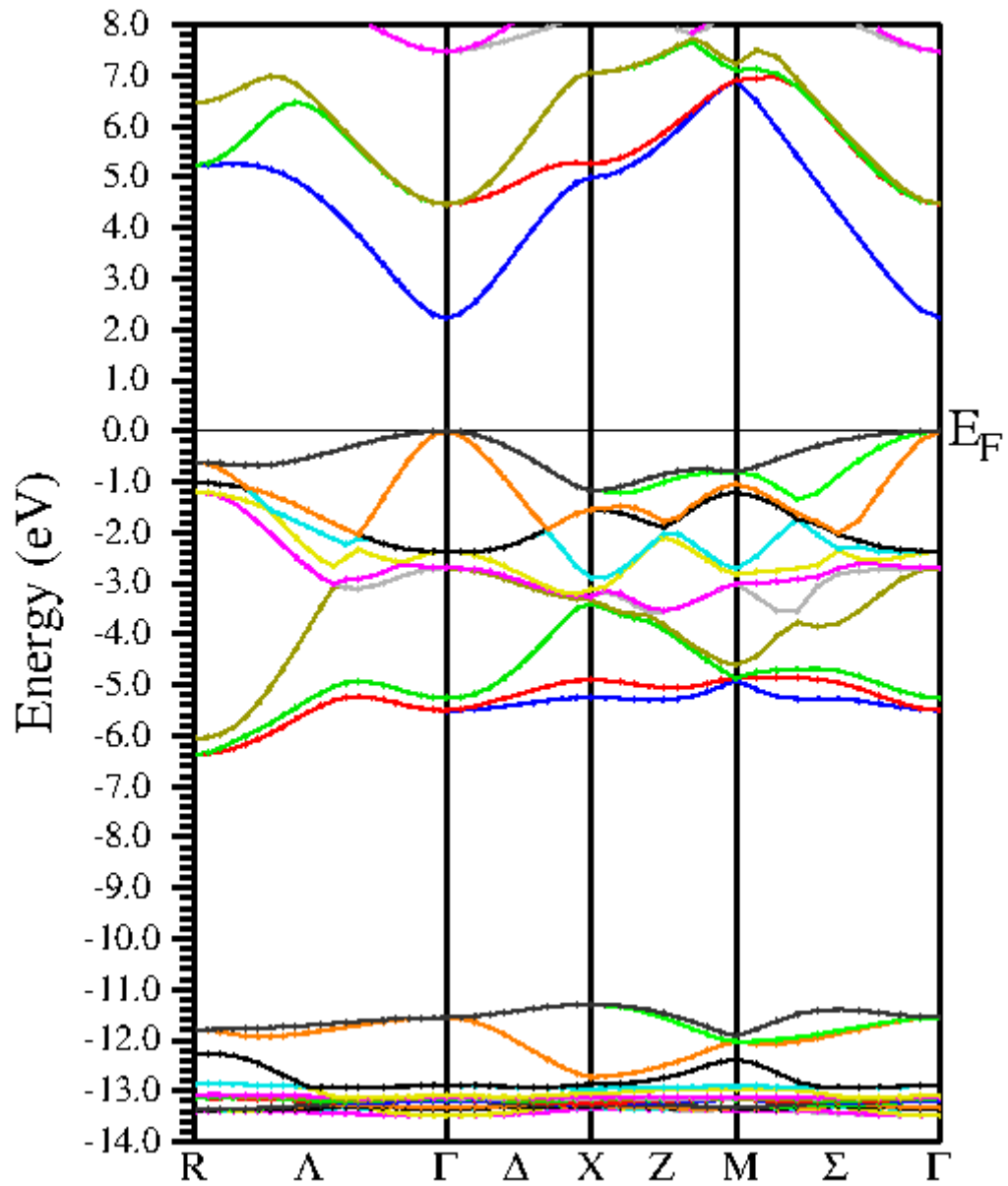


Figure (III.4) : Structure de bandes de $In_{0.25}Ga_{0.75}N$

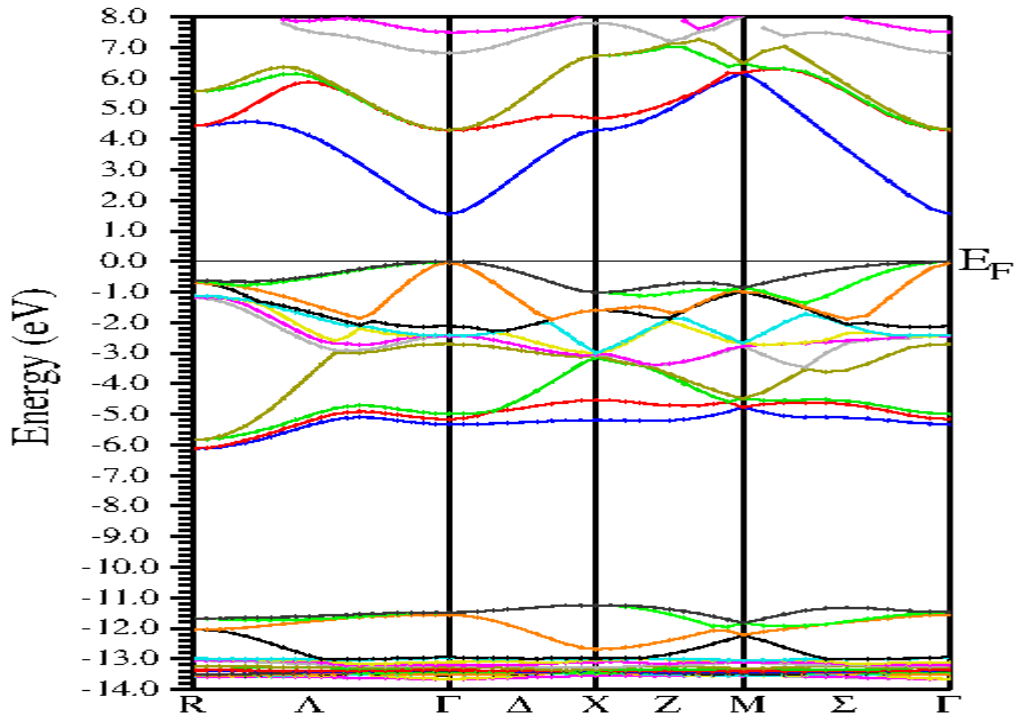


Figure (III.5) : Structure de bandes de $In_{0.5}Ga_{0.5}N$

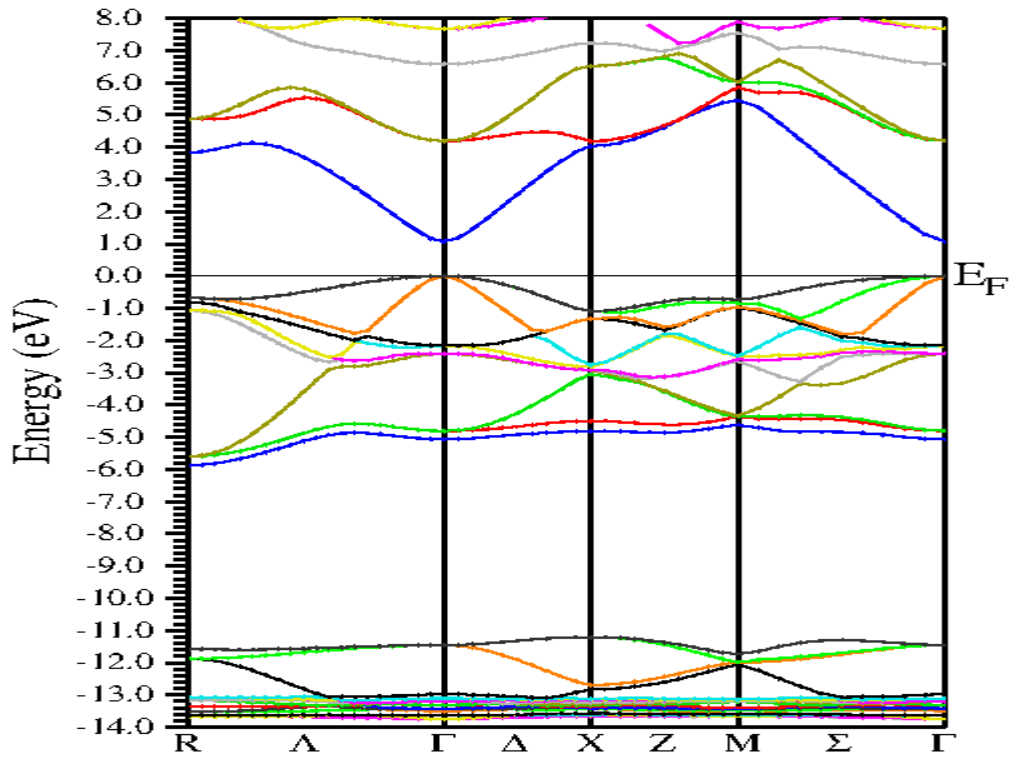


Figure (III.6): structure de bande $In_{0.75}Ga_{0.25}N$

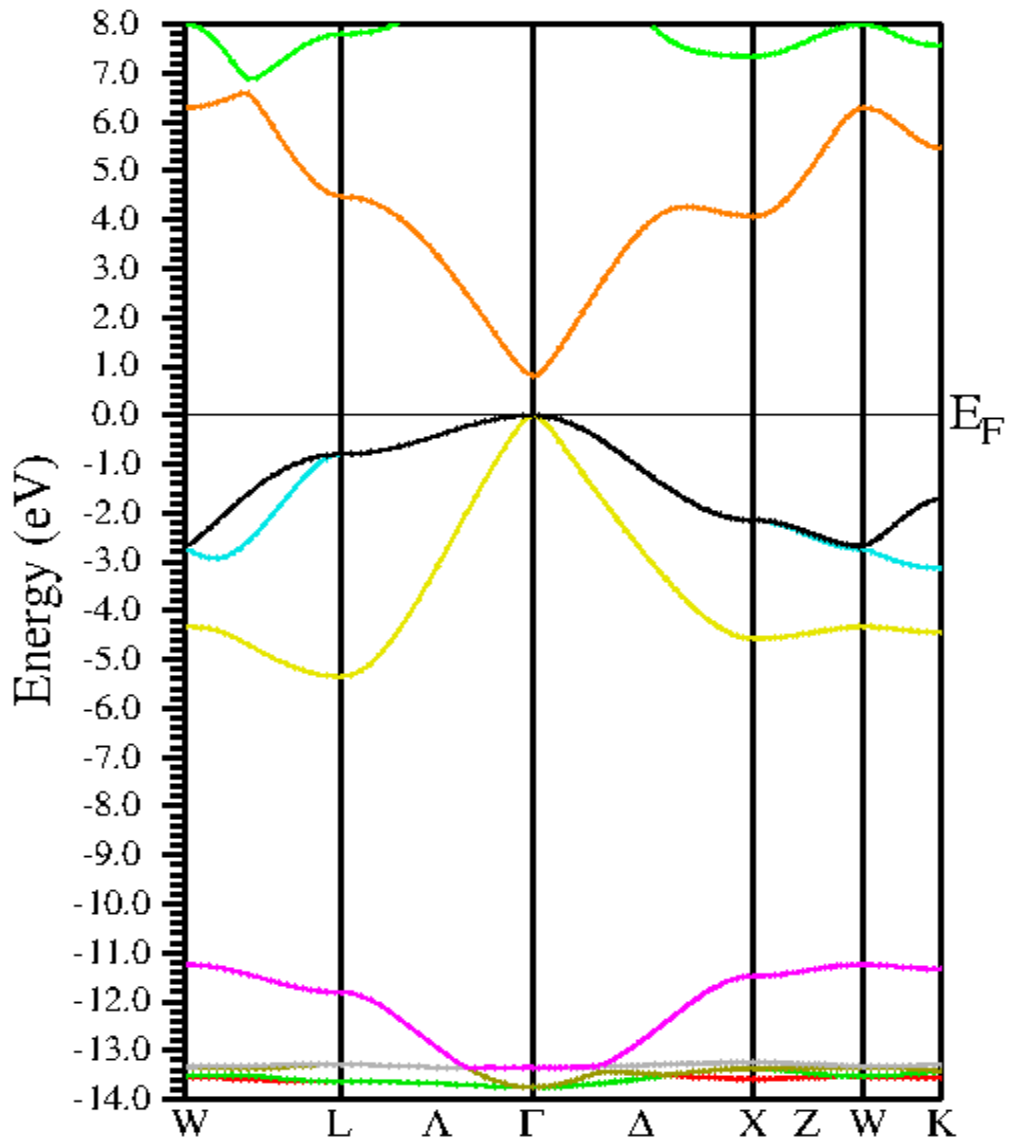


Figure (III.7) : Structure de bandes InN

Dans le but d'avoir une comparaison avec d'autres travaux pour les binaires, les différents gaps énergétiques sont calculés et comparés avec d'autres résultats théorique et expérimentales, et ils sont regroupés dans le Tableau (III.3). Nos résultats sont en très bon accord avec les calculs expérimentaux.

	Nos résultats	Autre calculs	Expérimentale
	E (Γ - Γ)	E (Γ - Γ)	E (Γ - Γ)
InN	0.802	0 ^[55]	0.6 ^[56]
GaN	3.17	1.93073 ^[55] 1.922 ^[56]	3.299 ^[53]

Tableau (III.3) : Le gap énergétiques E (Γ - Γ) dans les binaire (InN, GaN).

La variation de gap de l'énergie de la bande interdite(Γ - Γ) calculée en fonction de la composition x en utilisant mBJ-LDA des alliages ternaires $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ est représentée sur la figure (III.8). Lorsque la composition x varie en allant de x=0 à x=1 on note que le gap énergétique varie d'une façon proportion inverse avec la concentration.

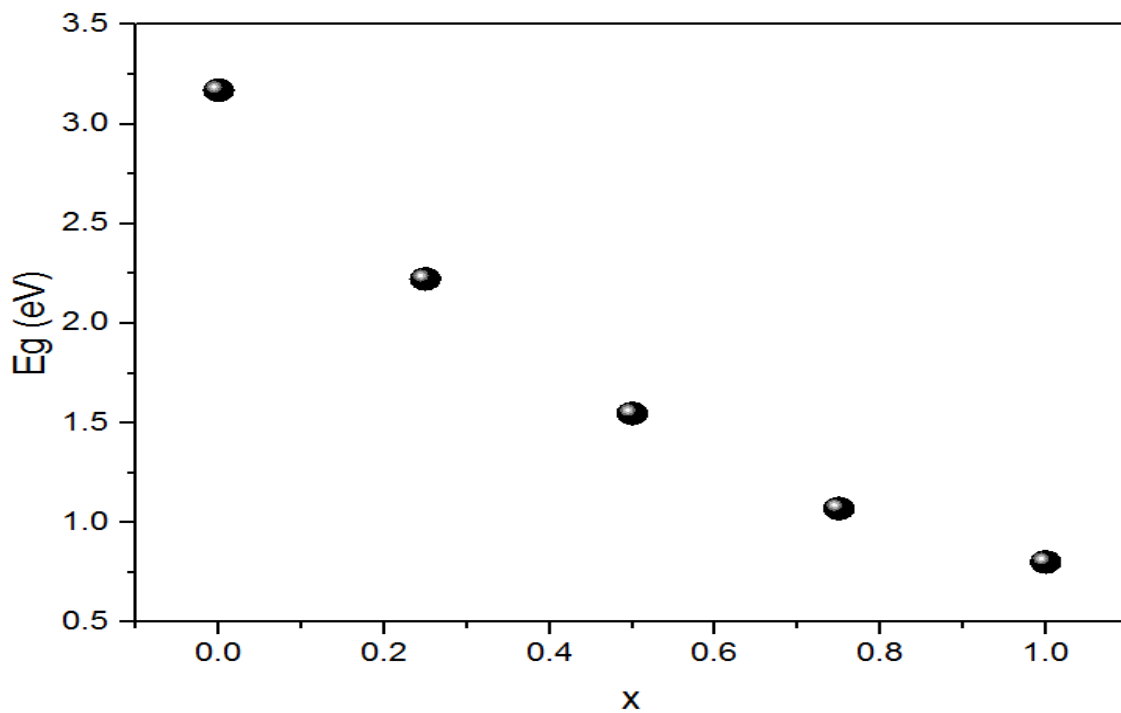


Figure (III.8) : La variation le gap E_g en fonction concentration en utilisant (mBj-LDA)

III.3.2. Les propriétés optiques

Dans cette partie, nous verrons que notre connaissance du comportement des électrons va jusqu'à nous expliquer la réflexion de la lumière par certains solides, alors que quelques-uns l'absorbent et que d'autres sont transparents. Elle nous apporte aussi l'explication pour certains solides de pouvoir sous certaines conditions, émettre de la lumière [57].

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [58].

III.3.2.1. Permittivité

La constante diélectrique appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle a des conséquences importantes sur les propriétés physiques du solide. Elle intervient dans de nombreux domaines, notamment, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétique, en particulier en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière.

Les relations reliant la partie réelle et imaginaire de la constante diélectrique sont appelés relations de Kramers-Kronig. La constante diélectrique complexe est donnée par :

$$\xi(\omega) = \xi_1(\omega) + i\xi_2(\omega) \quad (\text{III.3})$$

La partie imaginaire ϵ_2 pour une fréquence ω est proportionnelle à la somme de toutes les transitions entre états occupés et états vides séparés en énergie par [59].

$$\xi_2(\omega) = \frac{4e^2\pi^2}{m^2\omega^2} \sum_{i,j} \int \left| \langle i | M | j \rangle \right|^2 f_i (1 - f_j) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d^3k \quad (\text{III.4})$$

Où les $i M j$ représentent les composantes de la matrice du moment dipolaire, i et j sont les états initial et final respectivement, f_i est la fonction de distribution de Fermi du $i^{\text{ème}}$ état et E_i est l'énergie de l'électron du $i^{\text{ème}}$ état. Le produit $\left| \langle i | M | j \rangle \right|^2 f_i (1 - f_j) = P_{VC}$ est l'élément de matrice représentant la probabilité de transition entre les états i de la bande de valence et les états j de la bande de conduction. La conservation de l'énergie au cours des transitions est représentée par la fonction de Dirac: $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$.

Les parties réelle et imaginaire ne sont pas indépendantes, elles sont liées entre elles par les

relations de Kramers-Kronig:

$$\xi_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \xi_2(\omega) \omega'}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{III.5})$$

$$\xi_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\xi_1(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{III.6})$$

P : la valeur de l'intégrale principale

Cette fonction diélectrique n'est pas accessible par l'expérience. Toutefois, elle peut être déterminée par des mesures du coefficient de réflexion $R(\omega)$, de l'indice de réfraction $n(\omega)$ et du coefficient d'extinction $k(\omega)$ appelé aussi coefficient d'absorption [59]

Les résultats de calcul, par l'approximation mBJ-LDA, de la partie imaginaire $\xi_2(\omega)$ de la fonction diélectrique dans la gamme d'énergie allant de 0 à 30 eV pour $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sont illustrés dans la figure (III-9). L'analyse de ces spectres montre que le comportement de $\xi_2(\omega)$ est presque similaire pour tous les composés. Alors que les premiers points critiques de la fonction diélectrique qui correspond aux seuils d'absorption fondamentale (Γ - Γ) commencent à environ 3.17, 2.22, 1.55, 1.071 et 0.80 eV pour $x=0$; 0.25, 0.5, 0.75 et 1, respectivement. L'origine de ces points est due à la transition optique entre la plus haute bande de valence et la plus basse bande de conduction. Ainsi, on remarque à côté du pic fondamental les pics principaux qui reflètent le maximum d'absorption, sont représentées dans le tableau (III.5).

Paramètre	InN	$\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{N}$	$\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$	$\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{N}$	GaN
$\xi_2(\omega)$	6.5	6.2	5.6	6	6.7
Energie (ev)	8.9	7.5	5.3	9	12.5

Tableau (III.5) : Valeurs maximales $\xi_2(\omega)$ en fonction d'énergie totale d'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

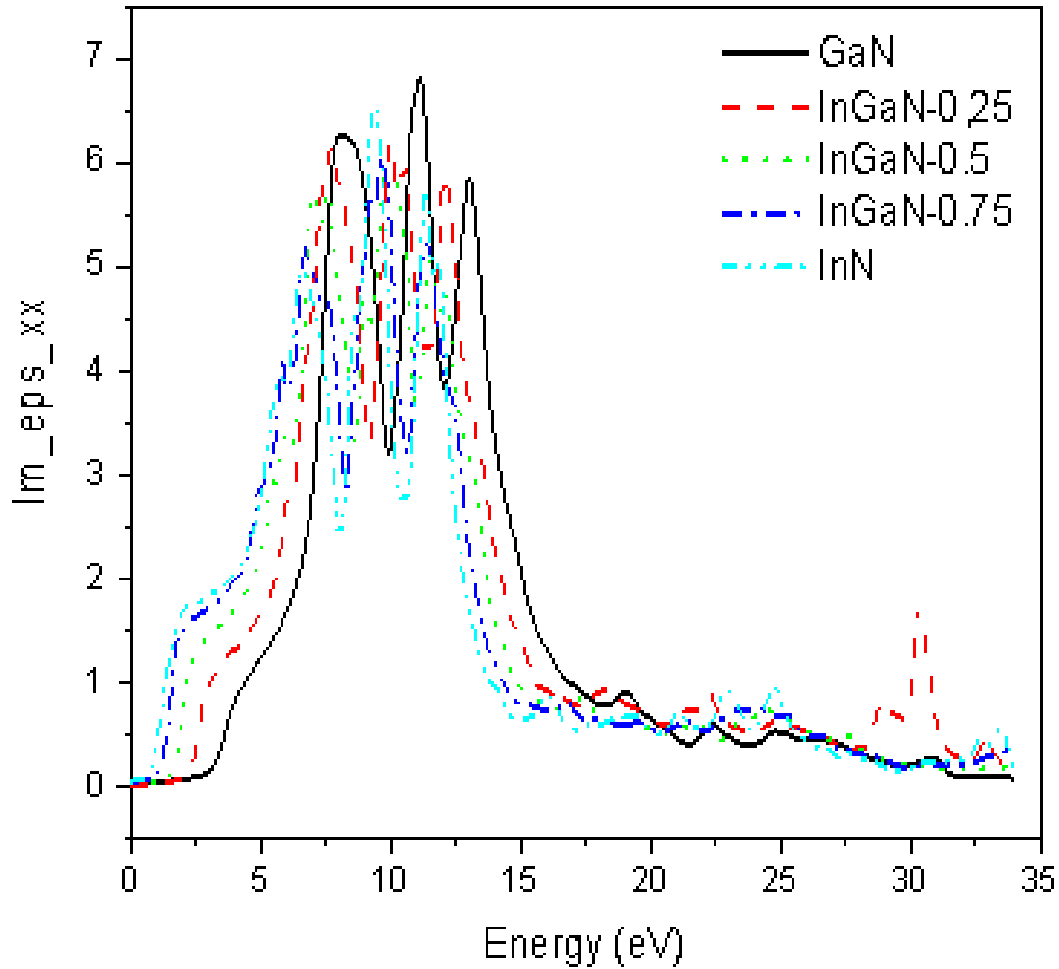


Figure (III.9) : La variation de la partie imaginaire $\xi_2(\omega)$ en fonction d'énergies totale pour $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

La figure (III-10) montre les résultats calculés, par l'approximation mBJ-LDA, de la partie réelle (dispersive) ε_1 de la fonction diélectrique de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Le passage à zéro des spectres de ε_1 signifie l'inexistence de la diffusion.

Nous avons remarqué que pour tous ces composés la fonction ε_1 s'annule aux valeurs d'énergie suivantes 9.4 (InN), 12.11 (In_{0.25}Ga_{0.75}N), 10.56 (In_{0.5}Ga_{0.5}N), 9.93 (In_{0.75}Ga_{0.25}N) et 11.30 (GaN) où la dispersion à ces valeurs énergétiques est nulle et par conséquent l'absorption est maximale.

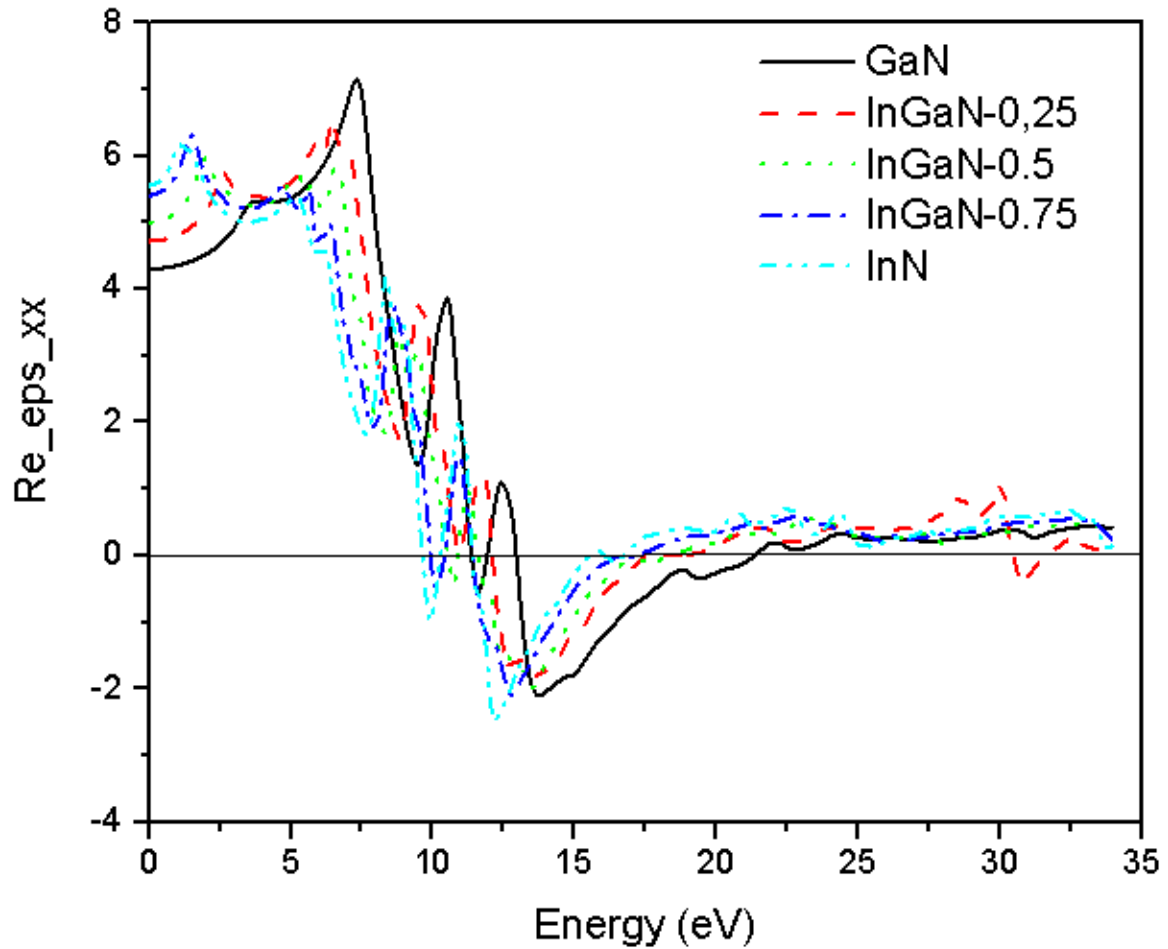


Figure (III.10) : La variation de la partie imaginaire $\xi_1(\omega)$ en fonction d'énergies totale pour $In_xGa_{1-x}N$

III.3.2.2. Indice de réfraction

L'optimisation des composants optoélectroniques nécessite une connaissance précise de l'indice de réfraction des matériaux semi-conducteurs. L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau possède à ralentir et à dévier la lumière [59]. Il est défini par l'équation suivante:

$$n(\omega) = \left[\frac{\xi_1(\omega)}{2} + \frac{\sqrt{\xi_1^2(\omega) + \xi_2^2(\omega)}}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III.7})$$

La variation de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie pour $In_xGa_{1-x}N$ est représentée respectivement sur les figures suivant :

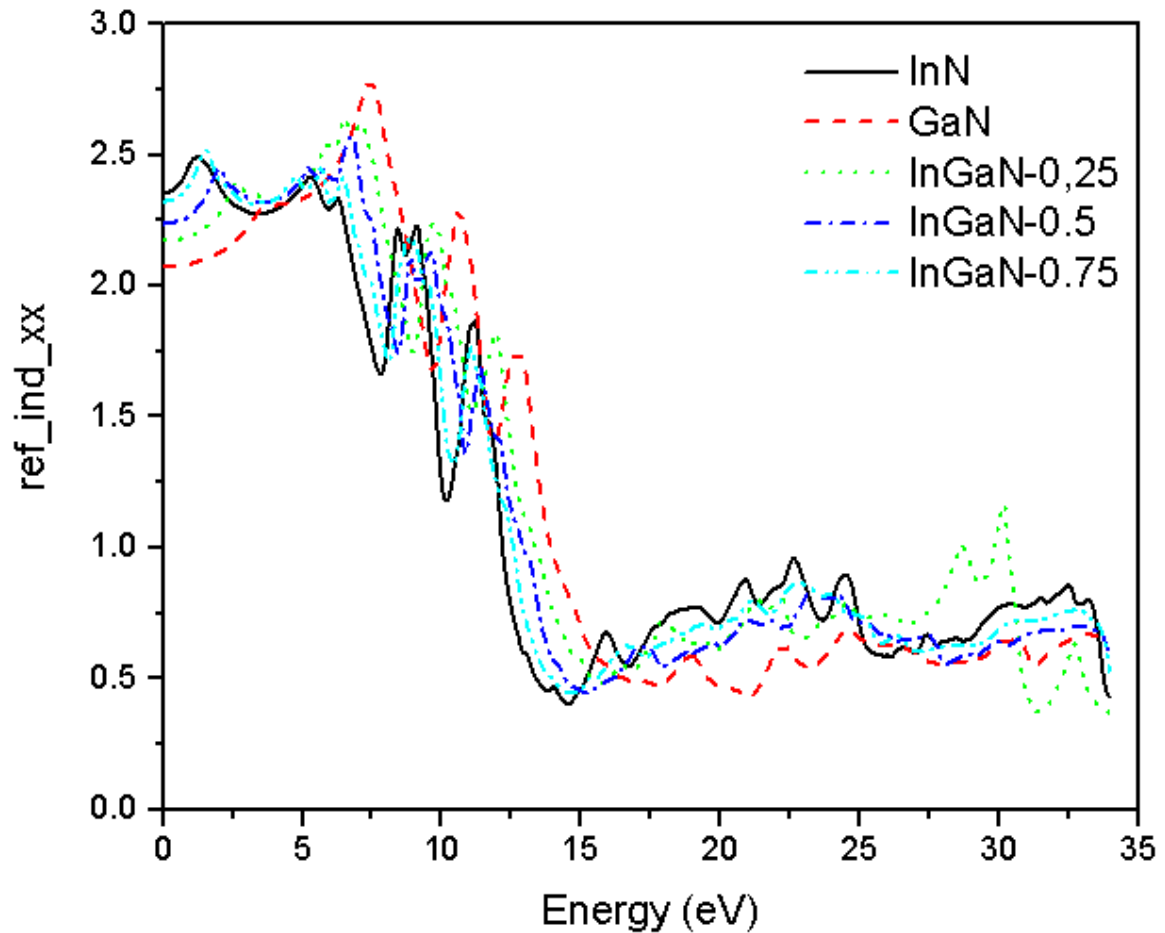


Figure (III.11) : La variation l'indice de réfraction en fonction de l'énergie totale pour $In_xGa_{1-x}N$

D'après les résultats calculés de la partie réelle de la fonction diélectrique, nous avons déterminé la constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)$ qui est une quantité plus importante et donnée par la limite inférieure de l'énergie de $\epsilon(\omega)$. Les valeurs de la constante diélectrique statique $\epsilon(0)$ et de l'indice de réfraction statique $n(0)$ obtenues pour $In_xGa_{1-x}N$ sont regroupés dans le tableau (III.6). La comparaison avec les données théoriques disponibles dans la littérature a été également faite. On remarque que les valeurs calculées de $\epsilon_1(0)$ sont en bon accord avec d'autres travaux théoriques.

Matériau	Nos calculs $\epsilon_1(0)$	Autres calculs $\epsilon_1(0)$	Nos calculs $n(0)$
InN	5.40	5.1 [60]	2.48
GaN	4.30	4.5 [60]	2.07
In _{0.5} Ga _{0.5} N	4.72		2.17
In _{0.25} Ga _{0.75} N	5.00		2.23
In _{0.75} Ga _{0.25} N	5.39		2.32

Tableau (III.6): Constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)$ et l'indice de réfraction statique $n(0)$ calculés pour les alliages In_xGa_{1-x}N.

A decorative frame resembling a scroll, with a vertical strip on the left side and rounded corners. The text is centered within the main rectangular area of the scroll.

Conclusion générale

Conclusion générale

Pour tous nos calculs, nous avons choisi de travailler dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec un potentiel total (FP-LAPW). Les effets d'échange-corrélation quant à eux étant traités dans le cadre de l'approximation de la densité locale (LDA).

L'objectif de notre étude c'est la description détaillée des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (le paramètre de réseau, le module de compressibilité, la structure de bande, la fonction diélectrique, l'indice de réfractionetc.

- ❖ Les propriétés structurales : les résultats obtenus sont proches des résultats expérimentaux
- ❖ Les propriétés électroniques : les résultats obtenus de notre étude assurent que l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ semi-conducteur est varié avec $E_g = 0.802\text{eV}$ à $E_g = 3.17\text{eV}$.
Où il existe des transitions directes ($\Gamma-\Gamma$).
- ❖ Les propriétés optiques : à partir de cette étude des propriétés optiques l'alliage ternaire montre une grande importance. L'alliage qui possède une grande transparence et une grande conductivité, à travers des spectres optiques. Ce qui ouvre ses utilisations dans de nombreux domaines. Par exemple, on trouve une signification dans les utilisations suivantes, dans la fabrication de diodes photovoltaïques, des couches minces, des cellules solaires, des détecteurs.

Références

Références

- [1] P. Hohenberg, W. Kohn: Phys. Rev. B 864, (1964) 136.
- [2] N.Kesri, V.Gamourar « la physique des semi –conducteurs».
- [3] K.Djamila, mémoire master .Univ de M'sila .2015
- [4] D.Amina mémoire master .Univ de M'sila .2012
- [5] E.Z. Fermi, Phys. 48,73 (1928).
- [6] L.H. Thomas, Proc. Camb. Phil. Sos. 23, 542 (1927).
- [7] P. Hohenberg, W. Kohn: Phys. Rev. B 136. 864 (1969).
- [8] D.Souad, mémoire master .Univ de M'sila ,2013
- [9] W.Kohn, L.J .Sham, Phys .A1133, 140(1965).
- [10] D.R.Hamman, M.Schiuter, C. Chiang , Phys.Lett .1494, 43(1981).
- [11] M.B. Kanoun. These de doctorat (2004).
- [12] R.Gaspar . Actra Phys.Hung.3. 85 (1954).
- [13] K.Schwartz. Phys, Rev, B5.24664 (1972).
- [14] Marius Grundman:Graduate texts in physics. The physique of semi-conductor.An Introduction Including Nanophysics .second edition .springer.
- [15] F. Tran and P. Blaha, phys Rev. let 102.226401 (2009).
- [16] J.P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, phys. Lett. 77,3865(1996).
- [17] A. D .Becke and E. R. Johson, J.Chem. phys. 124.221101(2006).
- [18] O.K. Andersen, Phys. Rev B 12, 3060 (1975).
- [19] J.C.Slater, Phys. Rev. 51, (1937) 846.
- [20] J.C. Slater, Advances in Quantum Chemistry 1, (1964) 35.
- [21] T.L. Loucks, « The Augmented Plane Wave Method », Benjamin, New York (1967).

Références

- [22] J.C. Slater, *Advances in Quantum Chemistry* 1, (1964) 35.
- [23] D.D. Koelling and G.O. Arbman, *J. Phys. F* 5,(1975) 2041.
- [24] O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* 12, (1975) 3060.
- [25] T. Takeda and J. Kubler, *J. Phys.F* 5, 661 (1979).
- [26] D. Singh, *Phys. Rev. B* 43, 6388 (1991).
- [27] T. Takeda and J.Kubler,*J.Phys.F*5, 661(1979).
- [28] J. Pertru and L.Smrcka,*Czech.J.Phys* .B35,62(1985).
- [29] L.Smrcka, *Czech.J.Phys* .B34,694(1984).
- [30] G.R.Evans,M.I.Drby,*J.Phys.F*14,1671(1987).
- [31] D.J.Singh, *Phys.Rev* .B43, 6388(1991).
- [32] D. R Hamann, *Phys. Rev. Lett.*212, 662 (1979).
- [33] P.Blanha,K.Schwarz,G.K.H.Madsen,D.Kvasnicka and J.Luitz,WIN2K.
- [34] A. Aouina, Mémoire de magister, « Rôle du rayonnement dans l'élaboration et l'étude de nano agrégats semi-conducteurs de ZnS », Université Constantine.
- [35] E. Mooser, « introduction à la physique du solide, 1 Ed.Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [36] Badr-Eddine Nabil BRAHMI Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc
- [37] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électronique », 4 Ed. Masson (1998).
- [38] E. Mooser, « Introduction à la Physique du solide », 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [39] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod Université (1983).
- [40] K.Hacni, These, Etude des propriétés structurales et électroniques des alliages quaternaires $Zn_{1-x}Be_xS_ySe_{1-y}$ par la méthode FP-LAPW(2012)
- [41] J.E.Berande, A.Zunger, *Phys.Rev.*B36, 3199(1987).
- [42] M Labidi, These doctorat Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires

Références

- [43] F. Mezrage, these, « etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des
- [44] L. Vegard, Z, phys. 5 (1921)17.
- [45] CT-CREW.Expermentalle . PhysIII Wuzburg,1996.
- [46] S. Adachi,J,Appl. Phys.61(1987)4869.
- [47] I.Vurgaftman,J.R.Meyer,l.R.-Mohan,J.Appl.Phys.89(2001)5850.
- [48] J.Lee,T.S.Kwon,K.Nahm, C ,K.Kim,J.Phys .Condens .Matter2 (1990)3253.
- [49] F.D.Murnaghan,Proc.Nat.Acad.Sci.USA 30,244(1944).
- [50] D.R. Hamman, M. Schluter, C.Chiang, Phys. Rev. Lett.1494,43 (1981).
- [51] M.Abu-Jafara, A.I. Al-Sharifb,A.Qteish, FP-LAPW and pseudopotential calculations of the structural phase transformations of GaN under high-pressure solid stat. Comm.116,389(2000).
- [52] K.Mohammed Benali, First-Principle Study of Structural, Elastic and Electronic propertes of AlN and GaN Semiconductors under Pressure Effect and Magnetism in AlN:Mn and GaN:Mn systems . Université A Bou- Bakr B elkaid –Tlemcen,2(2005).
- [53] I. Vurgaftman,J.R.Meyer and L.R.Ram-Mohan, Band parameters for III-V Compound semiconductors and their alloys J.Appl.Phys.,Vol.89,No.11,(2001).
- [54] J.H.Edgrad, « Properties of Group-III Nitrides Electronic Materials Information Service(EMIS)Data reviews Series, Institution of Electrical Engineers Engineers(IEE) »,London (1994).
- [55] N.Bouteldja ,etude ab-inition des proprietes electroniques de GaN/InN/AlN.
- [56] B.Daoudli,M.Sehil,A.Boukraa,Abid, « FP-LAPW calculations of ground state properties for AlN,GaN and InN Compounds J.Nanoelectronics and Materials». (2008).
- [57] B. Chalmers, Structure et Propriétés des Solides, Ed Masson, Paris, New York, (1987) 65.
- [58] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [59]S.Chahra, «Etude des propriétés structurales, électroniques, optiqueset thermodynamiques des composés PbS, PbSe, PbTe et leurs alliages $Pb_{(1-x)}Ca_xS$, $Pb_{(1x)}Ca_xSe$ et $Pb_{(1-x)}Ca_xTe$ ».
- [60]M.Zain, Z.Bensaad, B.Labdell,H.Bennacer «First-principles study of Structural, Electronic and Optical properties of III-arsenide Binary GaAs and InAs and III-Nitrides Binary GaN and InN: Improved Density-fubctional-theory study» .

ملخص

تم في هذا العمل استخدام طريقة لحساب ab-initio لدراسة الخواص البنيوية الالكترونية والضوئية لسبائك $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. لهذه استعملنا الأمواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW التي تدخل في إطار نظرية الكثافة الدالية. من أجل دراسة الخصائص البنيوية قمنا باستعمال كمون التبادل والارتباط ضمن تقريب LDA. في من استعملنا تقريب mBJ-LDA والذي هو عبارة عن نسخة معدلة لدالة Beeke et Johson من طرف Tram et Bloba لحساب الخصائص الأخرى. كما تم دراسة تأثير التركيز x على ثابت الشبكة, على الانضغاطة, على الفجوة الطاقية وعلى دالة العزل .

Résumé

Dans ce travail, des calculs ab-initio ont été réalisés sur les propriétés structurales, électronique et optiques. Des alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dans la phase zinc blende. on utilise la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). pour le potentiel d'échange-corrélation a été traité par l'approximation LDA. les propriétés structurales. cependant, l'approximation mBJ est une version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson par Tan. Blaha a été appliquée pour les calculs des autres propriétés. L'effet de la composition sur le paramètre cristallin, module de compressibilité, gap énergétique, fonction diélectrique a été étudié.

Abstract

In this work, the ab-initio calculations have been used to investigate the structural, electronic and optical properties of zinc blend alloys $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. We used the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method within density functional theory (DFT). the exchange and correlation potential is treated by LDA approximation for the structural properties. Moreover the mBJ-LDA approximation, is a new functional recently created by Tran and Blaha, is also applied to obtain the other properties. Our investigation on the effect of the composition on lattice constant, bulk modulus, band gap, optical and electric