



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

Nouri Rima

THEME

Prédiction des propriétés physiques des
alliages ternaires $Al_xGa_{1-x}N$

Soutenu le : 04 /06/2016

Devant le jury composé de :

Nadir Bouarissa	Prof Univ. de M'sila	Président
Miloud Ibrir	MCA Univ. de M'sila	Rapporteur
Moufdi Hadjab	AR U.D.C.M.A ,sétif	Co- Rapporteur
Bahri Deghfel	MCA Univ. de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2016

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

A mes chers parents.

A mes sœurs : Assía et Salwa

*A mes frères : Hícham, Mohamad, Nadír, Bílal
Yahía, Haroun et Salah*

A toute ma famille.

*A toutes mes amies et spécialement :Djaída, Amal
et Reguía*

*A tous ceux qui m'ont aidé de loin ou de près à
Ce travail*

Ríma

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 très heureuse de témoigner de ma profonde estime à mon encadreur Monsieur M. Ibrir, je lui suis très reconnaissante de m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et d'avoir proposer et diriger 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.

J'adresse mes sincères remerciements à Monsieur M.Hadjab pour aide et conseils sur cet œuvre

Je suis très reconnaissante au Monsieur B.Deghfel, d'avoir accepté d'examiner ce travail et de me faire l'honneur de participer au jury.

Je remercie chaleureusement Monsieur ,N.Bouarissa d'avoir accepté de présider le jury et de m'en honorer de sa présence.

Je tiens à exprimer toutes mes respects a mes parent et mes sœurs et mon frère qui m'ont toujours encouragé.

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.

Sommaire

Introduction générale	1
------------------------------------	---

Chapitre I : La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

I.1. Introduction	3
I.2. Equation de Schrödinger	4
I.3. L'approximation de Born-Oppenheimer	5
I.4. l'approximation de Hartree – Fock	7
I.4.1. l'approximation de Hartree	7
I.4.2. l'approximation de Hartree – Fock	7
I.5. La théorie de la fonction de la fonctionnelle de densité (DFT)	9
I.5.1. Aperçu historique	9
I.5.2. Les théorèmes de Hohenberg et kohn	10
I.5.2.a. Premier Théorème	10
I.5.2.b. Second Théorème	11
I.5.3. Les équations de Kohn-Sham	11
I.6. Approximations physiques pour le calcul de V_{xc}	12
I.6.1. L'approximation de la densité locale (LDA)	12
I.6.2. Approximation mBJ	13
Référence.....	16

Chapitre II : la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

II.1. Introduction	17
II.2. la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)	17
II.2.1. la méthode des ondes planes augmentées(APW)	17
II.2.2. Principe de la méthode LAPW	19
II.3. Les rôles des énergies de linéarisation (E_l)	21
II.4. Le développement en orbitales locales	21
II.4.1. La méthode LAPW+LO	22
II.4.2. La méthode APW+lo	22

II.5. Le concept de la méthode FP-LAPW	23
II.6. Le code de calcul Wien2K	24
Référence.....	26

Chapitre III : semi-conducteurs

III.1. Introduction	27
III.2. Définition d'un semi-conducteur	27
III.3. Différents types de Semi-conducteurs	27
III.3.1. Semi-conducteur intrinsèque.....	27
III.3.2. Semi-conducteur extrinsèque	28
III.3.2.a. Type n	28
III.3.2.b. Type p	28
III.4. Propriétés Electroniques	28
III.4.1. Gap direct – Gap indirect	29
III.4.2. Transitions inter bandes	29
III.4.3. Structure de bandes	31
III.5. Propriétés Optiques	31
III.5.1. L'indice de réfraction complexe	31
III.5.2. La réflectivité	34
III.6. semi-conducteurs III-V	34
III.6.1. Définition	34
III.6.2. Structure cristalline des semi-conducteurs III-V	35
III.6.3. Les avantages des semi-conducteurs III-V	35
III.7. Les alliages ternaires	36
III.7.1. Le paramètre de maille des alliages ternaire	36
III.7.2. Gaps d'énergie de l'alliage ternaire	37
Référence.....	38

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1. Introduction.....	40
IV.2. Détails de calcul	40
IV.3. Résultats et discussions	41
IV.3.1. Propriétés structurales	41
IV.3.2. Propriétés électroniques	44
IV.3 .3. Les propriétés optiques	49
IV .3.3.a.Fonction diélectrique	50
IV .3.3.b. l'indice de réfraction	51
IV .3.3.c. La réflectivité	52
IV .3.3.d. Coefficient d'extinction	53
Référence.....	54
Conclusion général	49

A decorative border resembling a scroll, with a thick black outline and a lighter grey shadow. The corners are rounded and feature scroll-like flourishes. The text is centered within this border.

Introduction générale

Introduction Général

La science des matériaux comporte un grand nombre de domaines importants dont celui des polymères, des matériaux composites et des semi-conducteurs. Elle constitue à ce titre un domaine très actif de la recherche et technologie modernes. Dans le domaine des semi-conducteurs, ces dernières années ont été marquées par un effort soutenu dans la croissance et la maîtrise de nouveaux matériaux à fortes potentialités technologiques.

Les semi-conducteurs appartenant à la famille des éléments III-V sont caractérisés par une bande interdite directe (gap énergétique) et ils se cristallisent dans la phase zinc blende. Ces matériaux jouent un rôle de plus en plus important dans la réalisation des dispositifs électroniques et optoélectronique

En général, les composés semi-conducteurs ternaire sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à la richesse de leur propriétés électroniques, structurales et optiques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectronique.

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alliage ternaire possédant des propriétés uniques adaptées pour de nombreuses applications en raison de leur largeur de bande directe accordable de 3,4 à 6,2 eV en changeant la composition.

Le but de ce travail, est d'étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques du composé ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Dans le premier chapitre nous présenterons un aperçu de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), qui est à la base des méthodes modernes de calculs de structures électroniques. Les différentes approximations associées à cette théorie seront exposées à savoir : L'approximation de la densité locale LDA et L'approximation de la fonctionnelle de Tran et Blaha (mBJ).

Dans le deuxième chapitre une étude plus au moins détaillée de la méthode de calcul FP-LAPW est présentée.

Dans le troisième chapitre, nous tenterons d'exposer quelques notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs et nous essayerons de donner quelques généralités sur les propriétés physiques des semi-conducteurs, notamment, les propriétés structurales et optiques des matériaux semi-conducteurs III-V.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Enfin, nous exposerons dans le quatrième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail.

Chapitre I:

*La théorie de la fonctionnelle de la
densité (DFT)*

I.1.Introduction

La physique de la matière condensée et la science des matériaux sont concernées fondamentalement par la compréhension et l'exploitation des propriétés des systèmes d'électrons et de noyaux atomiques interagissant, ceci est bien connu depuis le développement de la mécanique quantique. Avec ceci vient la reconnaissance qu'au moins presque toutes les propriétés des matériaux peuvent être étudiées par des outils de calcul convenable pour résoudre ce problème particulier de la mécanique quantique [1].

Malheureusement, les électrons et les noyaux qui composent les matériaux constituent un système à plusieurs corps fortement interagissant et ceci rend la résolution de l'équation de Schrödinger extrêmement difficile, et comme l'a déclaré Dirac (en 1929) le progrès dépend du développement des techniques approximatives suffisamment précises. Ainsi le développement de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) Pour décrire un matériau. Il faut savoir ses propriétés (électroniques, structurales,.....), et cela implique la connaissance des interactions entre les électrons et ions qui le constituent. Mais dans ce cas, la mécanique classique s'avère être insuffisante et il faut faire appel à la mécanique quantique dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger.

Cependant, la solution de l'équation de Schrödinger n'est possible que pour un nombre fini des cas. Il est possible de résoudre cette équation pour un système fictif des particules sans interaction ou quelques particules en interaction. La matière, cependant contient un nombre gigantesque de particule en interaction et on a besoin donc à des approximations et des différents alternatifs pour décrire le mouvement des électrons et noyaux. L'impossibilité d'obtention des solutions de cette équation a incité les chimistes et les physiciens théoriciens (Kohn, Sham, Fermi, Born Oppenheimer, Hartree.....) à développer un ensemble des méthodes se basant sur des formalismes mathématiques afin d'obtenir les observables de la mécanique quantique: tout progrès dans ces connaissances dépend essentiellement de l'élaboration de techniques d'approximation fiables. Ici on exposera quelque approximation qui fait les piliers de calcul de la structure électronique des matériaux de nos jours.

I.2. Equation de Schrödinger

Tout corps cristallin peut être considéré comme un système unique composé de particules légères (électrons) et lourds (noyaux). L'état stationnaire des particules est décrit par l'équation de Schrödinger [1.2]

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

Où H est l'hamiltonien du cristal qui contient tous les termes d'énergie cinétique et potentielle, aussi bien ceux apportés par les noyaux que ceux apportés par les électrons. E est l'énergie totale du cristal, et Ψ est la fonction d'onde du système, fonction des coordonnées des noyaux et des électrons, et contient toute l'information du système.

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

$\vec{r}_i = 1, \dots, N_e$ représente les coordonnées des électrons, N_e est le nombre d'électrons et $\vec{R}_I = 1, \dots, N_a$ sont les coordonnées des noyaux, N_a est le nombre d'atomes dans le système.

Le problème général peut être posé sous la forme d'une équation du mouvement de toutes les particules présentées dans le cristal; l'hamiltonien exact du cristal résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction de répulsion ou d'attraction suivant la charge des particules (ions, électrons).

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_Z + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{e-Z} + \hat{V}_{Z-Z} \quad (I.3)$$

1) L'énergie cinétique totale des électrons :

$$T_e = \sum_{i=1}^{N_e} T_i = \sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) \quad (I.4)$$

Avec m la masse de l'électron

2) L'énergie cinétique totale des noyaux :

$$T_Z = \sum_{\alpha} T_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_{\alpha}}{2M} \right) \quad (I.5)$$

Avec M_{α} la masse du noyau

3) L'énergie l'interaction électrons- électrons :

$$U_e = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} \quad (\text{I.6})$$

4) L'énergie l'interaction noyaux- noyaux :

$$U_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta (\alpha \neq \beta)} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} U_{\alpha\beta} \quad (\text{I.7})$$

Z_α et Z_β les nombre atomique des noyaux α et β

5) L'énergie l'interaction noyaux- électrons :

$$U_{ez} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} U_{i\alpha} \quad (\text{I.8})$$

L'équation de Schrödinger pourra donc être représentée sous la forme :

$$(T_e + T_z + U_e + U_z + U_{ez}) \Psi (r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) = E \Psi (r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) \quad (\text{I.9})$$

Cette équation contient $3(Z+1) N_\alpha$ variables, et puisque on trouve dans un 1cm^3 d'un solide cristallin près de 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.

I.3. L'approximation de Born-Oppenheimer

Les diverses méthodes de calcul des propriétés physique des matériaux à l'état solide mises au point au cours des dernières décennies reposent sur un certain nombre d'approximations. Suivant Born et Oppenheimer [1,2].

On commence par négliger le mouvement des noyaux par rapport à celui des électrons (un noyau atomique possède une masse 1836 fois supérieure à celle d'un électron) et on prend en compte que celui des électrons dans le réseau rigide périodique des potentiels nucléaires.

L'hypothèse la plus grossière que l'on pourrait faire est celle qu'imposerait que les noyaux atomiques soient immobiles. 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, mais que l'on peut rendre nulle par un choix convenable de l'origine. Compte tenu de ce que $T_z = 0$ et $U_z = 0$ nous pouvons définir une fonction d'onde Ψ_e comme fonction d'onde des électrons, et un nouveau hamiltonien des électrons qui est donnée par :

$$H_e = T_e + U_e + U_{ez} \quad (\text{I.10})$$

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

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

$$\left[\sum_i^{N_e} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{a=1}^{N_a} \frac{Z_a e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_a^0|} \right] \Psi_e(\vec{r}, \vec{R}_a^0) = E_e(R_a^0) \Psi_e(\vec{r}, \vec{R}_a^0) \quad (\text{I.12})$$

Dans cette équation comme dans l'expression Ψ_e le \vec{R}_a^0 figure non plus comme une variable mais plutôt comme un paramètre.

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

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** [1,3].

I.4. l'approximation de Hartree – Fock

I.4.1. l'approximation de Hartree

L'approximation de Hartree ignore l'antisymétrie de la fonction d'onde. On cherche des solutions sous la forme :

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(\vec{r}_i) \quad (\text{I.13})$$

On obtient alors pour l'énergie E_e l'expression suivante [1,4] :

$$E_i \Psi(r_i) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(\vec{r}_i) + \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int |\Psi_j(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{ij}} d\vec{r} \right] \Psi(r_i) + U(\vec{r}_i, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \Psi(r_i) \quad (\text{I.14})$$

r_{ij} : la distance entre l'électron i et l'électron j .

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 [1,5]. Et si on fait intervenir le principe de Pauli on aboutit à l'équation de Hartree- Fock.

I.4.2. l'approximation de Hartree – Fock

Cette approximation consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment dans un champ moyen créé par les autres électrons et noyaux. On ramène donc le problème relatif à un grand nombre d'électrons à un problème à un seul électron. L'hamiltonien peut être écrit comme une somme d'hamiltonien, chacun décrit le comportement d'un seul électron :

$$H = \sum_i H_i \quad (\text{I.15})$$

Avec:

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_i(\vec{r}) + V_N(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \quad (\text{I.16})$$

Tel que

$$V_N(\vec{r}) = -ze^2 \sum_R \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} \quad (\text{I.17})$$

Le potentielle que subit l'électron i dans champ de tous les noyaux k

$$V_H(\vec{r}) = - \int d^3 r' \rho(r') \frac{1}{|\vec{r}-r'|} \quad (\text{I.18})$$

C'est le potentiel de Hartree.

Le potentiel effectif est la somme de ces deux contributions :

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_H(\vec{r}) + V_N(\vec{r}) \quad (\text{I.19})$$

V_H : Le potentiel de Hartree.

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

En introduisant le potentiel effectif dans l'équation de Schrödinger, on trouve [1,6]

$$-\frac{1}{2m} \nabla^2 \Psi_i(\vec{r}) + V_{eff} \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.20})$$

La fonction d'onde du système électronique a la forme d'un produit de fonctions d'ondes des électrons, et l'énergie de ce système égale à la somme des énergies de tous les électrons.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots \dots \dots \vec{r}_N) = \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) \dots \dots \dots \Psi_N(\vec{r}_N) \quad (\text{I.21})$$

$$E = E_1 + E_2 + \dots \dots \dots + E_N \quad (\text{I.22})$$

Il est néanmoins facile de construire le type de solution convenable à partir de la fonction d'onde individuelle. ϕ_α Si les particules sont des bosons, la fonction est antisymétrique et est donnée par:

$$\Psi(1, 2 \dots \dots N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \phi_\alpha \phi_\beta \dots \dots \dots \phi_N \quad (\text{I.23})$$

Où la somme porte sur les permutations possibles (il y en a $N!$). Si les particules sont des fermions, la fonction d'onde est antisymétrique :

$$\Psi(1, 2 \dots \dots N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} (-1)^p \phi_\alpha \phi_\beta \dots \dots \dots \phi_N \quad (\text{I.24})$$

Où le symbole $(-1)^p$ vaut +1, si p est une permutation pair, et (-1) dans le cas contraire.

$$\Psi (X_1, X_2, \dots, X_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Phi_1(X_1) & \dots & \Phi_N(X_1) \\ \Phi_1(X_2) & \dots & \Phi_N(X_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_1(X_N) & \dots & \Phi_N(X_N) \end{vmatrix} \quad (\text{I.25})$$

C'est ce qu'on appelle le déterminant de Slater. Une fonction d'onde construite à partir de fonctions 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 [1,3].

Ces équations de Hartree-Fock sont difficiles à résoudre quand le système étudié comporte un grand nombre d'électrons.

Cette méthode qui est assez lourde, elle n'est pas pour autant exacte. En effet l'état fondamental correspond à un minimum global sur un ensemble de fonctions beaucoup plus étendues que celui couvert par un déterminant de Slater. Ainsi en utilisant la fonction d'essai (I.23) on ne peut espérer qu'à obtenir une borne supérieure de l'énergie de l'état fondamental.

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.5. La théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

I.5.1. Aperçu historique

La théorie de la fonctionnelle a pour objet de décrire un système en considérant la densité $\rho(r)$ comme une variable de base. Ainsi le problème à n électrons est étudié dans l'espace de dimension $3n$ de la fonction d'onde Ψ . Historiquement, les premiers à avoir exprimé l'énergie en fonction de la densité furent, Thomas et Fermi 1927. Dans leur modèle, les interactions électroniques sont traitées classiquement et l'énergie cinétique est calculée en supposant la densité électronique homogène.

Ce modèle amélioré par Dirac [1,8] avec un terme d'échange, ne permet pas de rendre compte la stabilité des molécules vis-à-vis des dissociations. Un peu plus tard, Slater proposa un modèle basé sur l'étude d'un gaz uniforme amélioré avec un potentiel local. Cette méthode appelée méthode de Hartree-Fock-Slater, que nous avons déjà mentionnée.

La DFT a véritablement débuté avec les théorèmes fondamentaux de Hohenberg et Kohn en 1964 qui établissent une relation fonctionnelle entre l'énergie de l'état fondamental et sa

densité [1,7]. Alors que le premier succès de l'application de la DFT pour la recherche sur la structure électronique moléculaire a commencé à apparaître dans les années 90 avec le développement des fonctionnels d'échange et de corrélation, les plus précises et les plus rapides pour le calcul des propriétés électroniques de grands systèmes moléculaires.

Enfin nous signalons le prix Nobel qui a été attribué à Pople, en 1998 dans le cadre de développement de cette méthode [1,7].

❖ **L'objectif principal de la théorie de la fonctionnelle de la densité** : est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique par la densité électronique en tant que quantité de base pour les calculs [9].

I.5.2. 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 30 [9,10].

I.5.2.a. Premier Théorème

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

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

$$E = \langle \varphi | H | \varphi \rangle = F[\rho] + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \rho(\vec{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{I.26})$$

$$F[[\rho] = \langle \varphi | U + T | \varphi \rangle \quad (\text{I.27})$$

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'écrivant comme suit :

$$F[\rho] = \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} drdr' T[\rho] \quad (\text{I.28})$$

$T[\rho]$ 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 [9,11].

I.5.2.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 :

$$E(\rho) = \text{Min}E(\rho) \quad (\text{I.29})$$

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.5.3. 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 :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V_{ion}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.30})$$

$\Psi_i(\vec{r})$: 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 :

$$V_H(\vec{r}) = -e \int d^3r' \rho(r') \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (\text{I.31})$$

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 :

$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\partial E_{XC}}{\partial \rho(\vec{r})} [\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.32})$$

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

$$H\Psi_i(\vec{r}) = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right\} \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.33})$$

Où chaque électron subit l'effet du potentiel effectif créé par tous les noyaux et les autres électrons. Ce potentiel est donné par [9,12] :

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \int \frac{1}{|\vec{r}_i + \vec{r}_j|} \rho(\vec{r}_j) d\vec{r}_j + V_{XC}(\vec{r}) \quad (\text{I.34})$$

I.6. Approximations physiques pour le calcul de V_{xc}

I.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[9].

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

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \varepsilon_{xc} \rho(r) dr \quad (\text{I.35})$$

$\varepsilon_{xc} \rho(r)$ 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 [15].

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 .

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

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

I.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 [12] 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 [5] ou PBE(la version du GGA pour les solides) [13]

La forme de la version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson [14] est comme suit :

$$v_{x;\sigma}^{mBJ}(r) = cv_{x;\sigma}^{BJ}(r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}(r)}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad (\text{I.36})$$

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.

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

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 :

$$b_\sigma = \left[\frac{X_\sigma^3 e^{-X_\sigma}}{(8\pi\rho_\sigma)} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.37})$$

Le potentiel de Becke-Roussel proposé ici est à peu près équivalent au potentiel de Slater utilisé dans Becke et Johnson[12]. 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 [12]. Ce paramètre a été choisi pour

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

La forme proposée pour c est la suivante :

$$c = \alpha + \beta \left(\left(\frac{1}{V_{cell}} \int \frac{|\frac{\rho}{\nabla\rho}(r')|}{\rho(r')} D^3 r' \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.38})$$

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

$$\alpha = -0.012$$

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

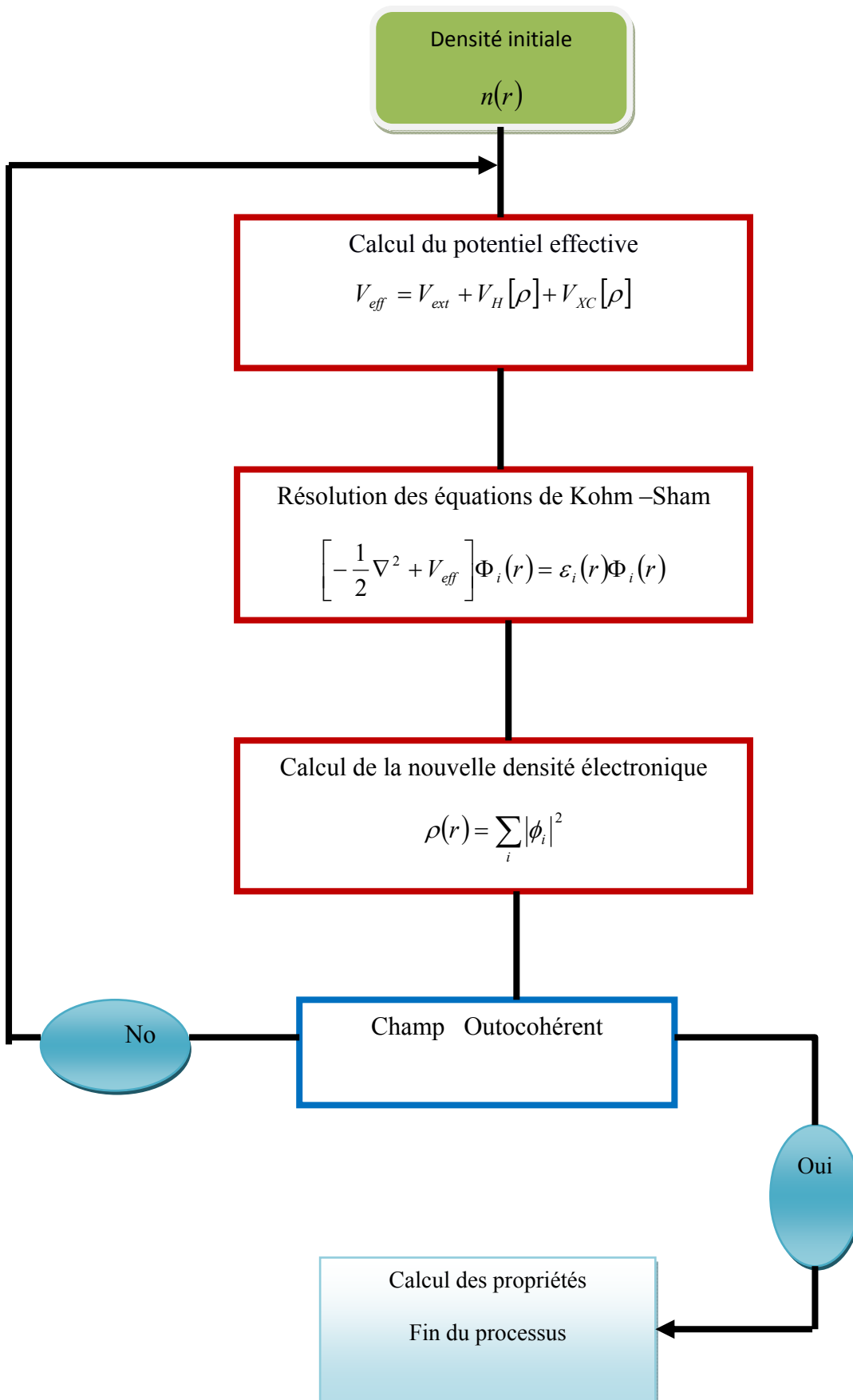


Figure (II-1) : différentes étapes de la résolution des équations de Kohm –Sham

Références

- [1] CT-CREW. Experimentelle. Phys III, Université Wurzburg, 1996.
- [2] Mezrag Fadila, Thèse doctorat, Université Biskra, Alegria, 2012.
- [3] S.M.SZE, Physics of semi-conducteur Derices, John Wily and sons, 1981.
- [4] Messaoudene Ikram, Mémoire de Master, université de M'sila, 2014.
- [5] N.W. Ashcroft, N, D, Mermin, Solid State Physics, Saunders College: Philadelphia, 1976.
- [6] H. Mathieu, Physique des Semi-conducteur et de Composants Electronique, 4Ed, Masson, 1998.
- [7] R, Dingle, D, D, Sell, S. E.Stokwski, Et M.Ilegems, Phs, Rov. B4, 1211(1971).
- [8] Hervé Fanet, « Micro et Nanoélectronique » _ Bases, Composants, circuits, Dunod, Paris, 2006
- [9] KORTI, Mémoire doctorat, Université TLEMCEM, 2012.
- [10] BAHY Ouafa, Mémoire Master, Université de Ouargla, 2014.
- [11] Marius Grundman: Graduate texts in physics. The physique of semi-conductor. An Introduction Including Nanophysics .second edition .springer.
- [12] F. Tran and P. Blaha, phys Rev. let 102.226401 (2009).
- [13] J.P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, phys. Lett. 77,3865(1996).
- [14] A. D .Becke and E. R. Johson, J.Chem. phys. 124.221101(2006).



Chapitre II:
*la méthode des ondes planes
augmentées linéarisées (FP-LAPW)*

II.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 [1], 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.

II.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 [2.3.4]. Rappelons en premier lieu les bases de la méthode APW.

II.2.1 . La méthode des ondes planes augmentées(APW)

Slater expose la méthode APW (Augmented Plane Wave) dans son article[2].Il introduisit 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) concentées 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 à l'intérieur de la sphère MT et ondes planes dans la région interstitielle (Figure II.1).

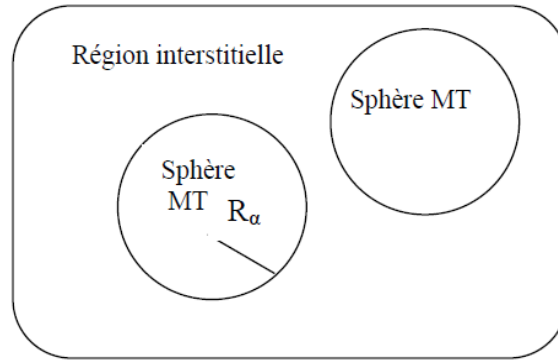


Figure II.1 : Potentiel « Muffin-Tin » (MT).

Ainsi la fonction d'onde est de la forme :

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

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

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (\text{II.2})$$

$V(r)$ représente le potentiel Muffin-Tin et E_l l'énergie de linéarisation. Les fonctions radiales définies par (II-2) sont orthogonales à tout état propre du coeur mais Cette orthogonalité disparaît en limite de sphère [5].

Pour assurer la continuité de la fonction $\phi(r)$ 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 ceci est exprimé par l'expression suivante :

$$A_{lm} = \frac{4\pi^l}{\sqrt{\Omega} U_l(R_\alpha)} \sum_G C_G J_l(|K+G| R_\alpha) Y_{lm}^*(K+G) \quad (\text{II.4})$$

avec K , le vecteur d'onde dans la zone de Brillouin ; G , le vecteur de réseau réciproque et J_l , la fonction de Bessel donnée par :

$$J_l(X) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(X) \quad (\text{II.5})$$

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 variationnels 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_s).

Les fonctions APW_s 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 (II-4). En effet, suivant la valeur du paramètre E_l , la valeur de $U_\alpha(R_\alpha)$ 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 [6] et par Andersen [5]. La modification consiste à représenter la fonction d'onde $\Phi(r)$ à l'intérieur des sphères par une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_l(r)$ et de leurs dérivées par rapport à l'énergie $\dot{U}_l(r)$, donnant ainsi naissance à la méthode FP-LAPW.

II.2.2. Principe de la méthode LAPW

Les fonctions de base de la méthode LAPW sont les ondes planes linéairement augmentées. D'une part, elles représentent les ondes planes dans la zone interstitielle et d'autre part, elles sont des 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 :

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.6})$$

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_1 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_1 .

$$U_l(E,r) = U_l(E_1,r) + (E-E_1) \dot{U}_l(E,r) + 0((E-E_1)^2) \quad (\text{II.7})$$

Où $0((E-E_1)^2)$ 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 $(E-E_1)^2$ et une autre sur les énergies de bandes de l'ordre de $(E-E_1)^4$. Malgré cet ordre d'erreur, les fonctions LAPW forment une bonne base qui permet, avec un seul E_1 , 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 [6] 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 [7] a modifié cette approche en ajoutant des orbitales locales à la base sans augmenter l'énergie de cutoff des ondes planes.

II.3. Les rôles des énergies de linéarisation (E_l)

Les fonctions $U_l(r)$ et $\dot{U}_l(r)$ 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 le 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 El devraient être définis indépendamment les uns des autres. Les bandes d'énergie ont des orbitales différentes. Pour un calcul précis de la structure électronique, El doit être choisi le plus proche possible de l'énergie de la bande, si la bande a le même l .

II.4. Le développement en orbitales locales

Le but de la méthode LAPW est d'obtenir des énergies de bande précises au voisinage des énergies de linéarisation E_l [5]. Dans la plupart des matériaux, il suffit de choisir ces énergies au voisinage du centre des bandes. Ceci n'est pas toujours possible et il existe des matériaux pour lesquels le choix d'une seule valeur de E_l n'est pas suffisant pour calculer toutes les bandes d'énergie : par exemple, les matériaux avec des orbitales 4f [8,9] et les éléments des métaux de transition [2,10]. C'est le problème fondamental de l'état de semi-cœur qui est intermédiaire entre l'état de valence et celui de cœur. Il existe deux moyens pour traiter cette

situation : l'usage des fenêtres d'énergie multiple, ou l'utilisation d'un développement en orbitales locales.

II.4.1. La méthode LAPW+LO

Le développement de la méthode LAPW en orbitales locales consiste à modifier les orbitales de sa base pour éviter l'utilisation de plusieurs fenêtres, en utilisant une troisième catégorie de fonctions de base. L'idée principale est de traiter toutes des bandes avec une seule fenêtre d'énergie. Singh [7] a proposé une combinaison linéaire de deux fonctions radiales correspondant à deux énergies différentes et de la dérivée par rapport à l'énergie de l'une de ces fonctions ce qui donne naissance à la méthode LAPW+LO:

$$\phi_{lm} = \left[A_{lm} U_1(r, E_{1,l}) B_{lm} \dot{U}_1(r, E_{2,l}) + C_{lm} U_1(r, E_2) Y_{lm}(r) \right] \quad r < R_\alpha \quad (\text{II.8})$$

Où les coefficients C_{lm} sont de même nature que les coefficients A_{lm} et B_{lm} définis précédemment. Par ailleurs, cette modification diminue l'erreur commise dans le calcul des bandes de conduction et de valence.

II.4.2. La méthode APW+lo :

Le problème de la méthode APW était la dépendance en énergie de l'ensemble des fonctions de base. Cette dépendance a pu être éliminée dans la méthode LAPW+LO, au prix d'un plus grand ensemble de fonctions de base. Récemment, une approche alternative est proposée par Sjösted et al [11] nommée la méthode APW+lo Dans cette méthode, l'ensemble des fonctions de base sera indépendante en énergie et a toujours la même taille que celui de la méthode APW. Dans ce sens, APW+lo combine les avantages de la méthode APW et ceux de la méthode LAPW+LO

L'ensemble des fonctions de base d'APW+lo contient des deux types de fonctions d'ondes. Les premières sont des ondes planes augmentées APW, avec un ensemble d'énergies E_l fixées

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.9})$$

Le deuxième type de fonctions sont des orbitales locales (lo) différentes de celle de la méthode LAPW+LO, définies par

$$\Phi(r) = \begin{cases} 0 & r > R_\alpha \\ \left(\left[A_{lm} U_l(r, E_l) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_l) \right] \right) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

Dans un calcul, une base mixte LAPW et APW+lo peut être employée pour des atomes différents et même pour des valeurs différentes du nombre l . En général, on décrit les orbitales qui convergent plus lentement avec le nombre des ondes planes (comme les états 3d des métaux de transition), ou bien les atomes ayant une petite taille de sphère avec la base APW+lo et le reste avec une base LAPW [12].

II.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) [13] aucune approximation n'est faite pour la forme du potentiel ni de la densité de charge. Ils sont plutôt développés en des harmoniques du réseau à l'intérieur de chaque sphère atomique, et en des séries de Fourier dans les régions interstitielles. Ce qui est à l'origine du nom Full-Potentiel. Cette méthode assure donc la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT et le développe sous la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} \sum_K V_K e^{iKr} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.11})$$

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

$$\rho(r) = \begin{cases} \sum_K \rho_K e^{iKr} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} \rho_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.12})$$

II .6 .Le code de calcul Wien2K

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode FP-LAPW, implémentée dans le code Wien2K .Le code Wien2K consiste en différents programmes indépendants figure. II.2 , qui sont liés par C .Shell Script :

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

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 dans 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

jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0: Génère le potentiel à partir de la densité.

LAPW1: Calcule les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2: Calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres.

LCORE: Calcule les états du cœur et les densités.

MIXER: Mélange les densités d'entrée et de sortie.

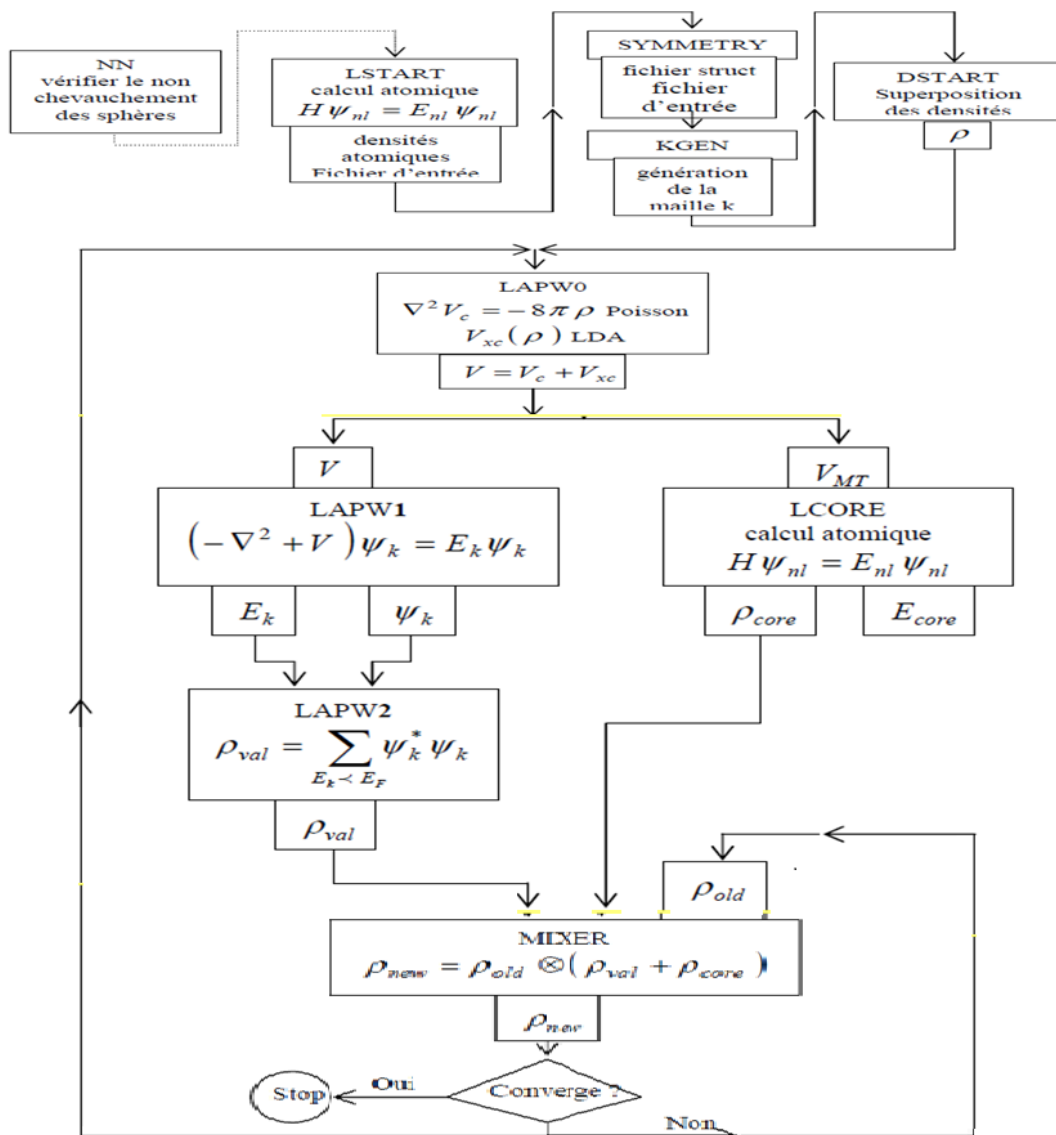


Figure II.2: Le code Wien2k

Références

- [1] O.K. Andersen, *Phys. Rev B* 12, 3060 (1975).
- [2] J.C. Slater, *Phys. Rev.* 51, (1937) 846.
- [3] J.C. Slater, *Advances in Quantum Chemistry* 1, (1964) 35.
- [4] T.L. Loucks, « *The Augmented Plane Wave Method* », Benjamin, New York (1967).
- [5] O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* 12, 3060 (1975).
- [6] T. Takeda and J. Kubler, *J. Phys.F* 5, 661 (1979)
- [7] D. Singh, *Phys. Rev. B* 43, 6388 (1991).
- [8] D. J. Singh, *Phys. Rev. B* 44, 7451 (1991).
- [9] S.Goedecker and K.Maschke, *Phys.Rev.B* 42, 8858 (1990)
- [10] D. J. Singh, K Schwarz and P. Blaha, *Phys. Rev. B* 46, 5849 (1992).
- [11] E. Sjösted, L. Nordström and D. J. Singh, *Solid State Commun.* 114, 15 (2000)
- [12] G.H.K. Madsen, P. Blaha, K.Schwarz, E. Sjösted and L. Nordström, *Phys.Rev.B*.64, 195134 (2001)
- [13] D. R Hamann, *Phys. Rev. Lett.*212, 662 (1979).

A decorative border resembling a scroll, with a thick black outline and a lighter grey shadow. The corners are rounded and feature a scroll-like flourish.

Chapitre III:
Semi-conducteurs

III .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 [1.2].

Dans ce chapitre, nous allons rappeler quelques propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs ternaires.

III.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,
- ✓ L'éclairement,
- ✓ La présence d'impuretés (dopage)

III.3. Différents types de Semi-conducteurs

III.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 10¹³ atomes de l'élément semi-conducteur).

III.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.

III.3.2.a. 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 qui situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semi-conducteur est dit de type n.

III.3.2.b. Type p

Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore aluminium ou galium). 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.

III.4. Propriétés Electroniques

Les matériaux semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétéro structures. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome avec les orbitales, et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type sp^3 : 4 orbitales liantes et 4 orbitales anti-liantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence.

Cette bande est pleinement occupée par des électrons à $T=0K$, pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales anti-liantes donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur E_g (band gap en anglais). Pour les semi-conducteurs à

gap direct [3] le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point Γ .

III.4.1. Gap direct – Gap indirect

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde \vec{k} . Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} : on dit que le semi-conducteur est à gap direct.

Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{k} différentes : on dit que le semi-conducteur est à gap indirect; c'est le cas du silicium et du germanium. Cette distinction entre matériaux semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante, particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons.

En effet, lors de la transition d'un électron de la BV vers la BC ou de la recombinaison électron-trou, il faut conserver l'énergie (relation scalaire) et l'impulsion (relation vectorielle). La transition d'énergie minimale entre ces deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect. Cette différence oriente le choix des matériaux pour les applications optoélectroniques.

III.4.2. 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) [4] :

✓ *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 **III .1**), 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 non négligeable.

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 \vec{k} ; ce processus fait intervenir en plus de l'électron et du photon, un phonon. Si un phonon de vecteur d'onde et de fréquence Ω est créé par ce processus, alors nous avons d'après les lois de conservation :

$$\vec{k}(\text{photon}) = \vec{k}_c + \vec{k} \approx 0$$

Et

$$h\gamma_e - E_p = E_g \quad (\text{émission de phonon d'énergie } E_p = h\Omega) \text{ ou}$$

$$h\gamma_a + E_p = E_g \quad (\text{absorption de phonon})$$

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.

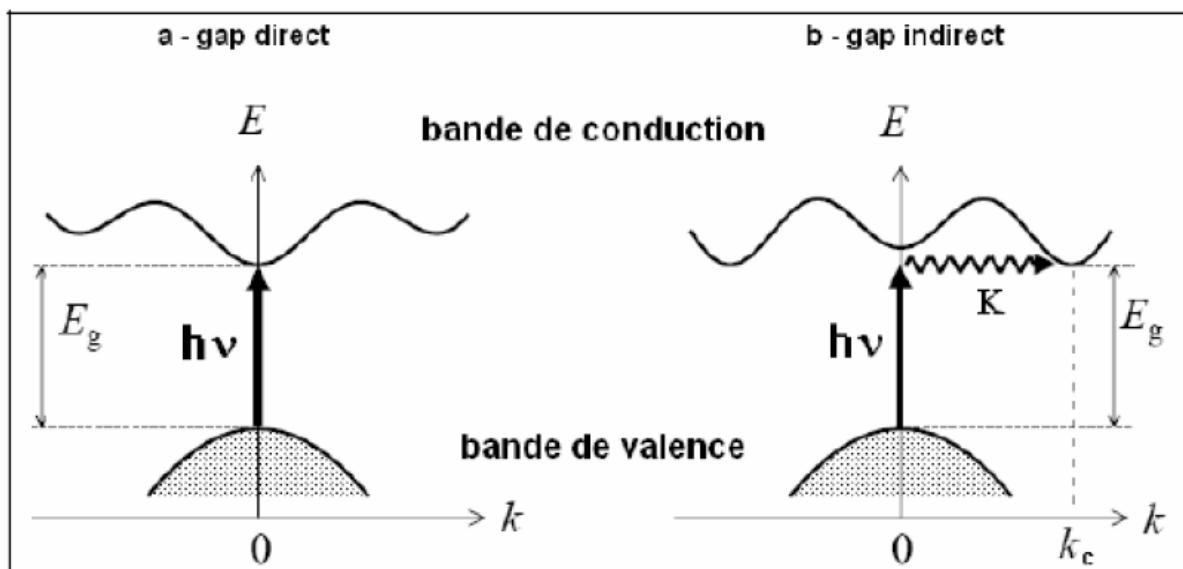


Figure III.1 : Transitions inter bandes a) directe b) indirecte

III.4.3. Structure de bandes

Dans un atome un électron est soumis à un potentiel coulombien crée par le noyau et le nuage électronique qui est constitué par les autres électrons. Il ne peut occuper que des états quantiques bien définis et distincts les uns des autres. Ces états sont caractérisés par des niveaux d'énergie bien définis auxquels sont associées des fonctions d'onde. Chaque système quantique est caractérisé par des fonctions d'ondes ψ qui sont les solutions de l'équation de Schrödinger :

$$\frac{2m}{h}(E - V)\psi = 0 \tag{III.1}$$

Dans le cas de l'atome isolé la solution de l'équation de Schrödinger n'existe que pour des valeurs discrètes d'énergie $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$. Dans un solide cristallin les noyaux sont disposés en réseaux réguliers, les orbitales sont remplacées par des ondes de Bloch et les couches sont remplacées par des bandes d'énergie permises séparées par d'autres bandes interdites. Une bande permise comporte un nombre considérable de niveaux d'énergie comparable au nombre d'atomes dans le cristal.

Plusieurs méthodes, basées sur des hypothèses simplificatrices, sont utilisées pour déterminer la structure des bandes dans les semi-conducteurs. Parmi celles-ci on peut citer :

- ✓ La méthode CLOA, appelée aussi méthode des liaisons fortes, consiste à développer les fonctions d'onde de cristal sous forme d'une combinaison linéaire d'orbitales atomiques.
- ✓ La méthode OPW (Orthogonised Plane waves) consiste à développer les fonctions d'onde du cristal, sur la base des fonctions d'ondes des électrons libres.
- ✓

III.5. Propriétés Optiques

III.5.1. L'indice de réfraction complexe

La réponse des électrons d'un solide peut être décrite macroscopiquement, par la constante diélectrique complexe $\epsilon(\vec{k}, \omega)$, qui relie le vecteur champ électrique \vec{E} à l'induction électrique dans le solide \vec{D} . Cette fonction a des conséquences importantes sur les propriétés physiques des solides.

Les relations reliant la partie réelle et imaginaire de la constante diélectrique sont appelés relations de Kramers-Kronig. Le constant diélectrique complexe est donné par [5,6]:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \tag{III.2}$$

Elle relie le vecteur champ électrique \vec{E} au déplacement dans le solide \vec{D} par la relation.

$$\vec{D}(\vec{K}, \omega) = \varepsilon(\omega) \vec{E}(\vec{K}, \omega) \tag{III.3}$$

Ceci est strictement valable que pour les composés isotropes, c'est le cas des matériaux étudiés dans ce travail car ils cristallisent dans un système cubique.

La partie imaginaire ε_2 traduit l'absorption du matériau tandis que la partie réelle ε_1 est liée à la polarisation du milieu.

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 $\hbar\omega$ [7,8]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \left(\frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \right) \sum_{i,j} \int |\langle i|M|j \rangle|^2 f_i(1-f_j) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d^3k \tag{III.4}$$

où les $\langle i|M|j \rangle$ 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 $|\langle i|M|j \rangle|^2 f_i(1-f_j) = P$ 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:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \tag{III.5}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \quad \text{III.6}$$

Dans ces équations, la dispersion dans l'espace (variation avec k) est négligée, car pour la plupart des phénomènes optiques, la longueur d'onde de la lumière est grande comparée aux dimensions du système. Ces résultats ne sont valables également qu'en absence de champ magnétique. Dans le cas d'un milieu isotrope ou d'un cristal cubique ε se réduit à un scalaire, la réponse du système à une onde plane électromagnétique peut alors être décrite à l'aide d'un indice de réfraction scalaire complexe : $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$

Ces deux grandeurs sont liées par la relation: $\varepsilon = N^2$
avec:

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 \quad \text{III.7}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk \quad \text{III.8}$$

Les grandeurs $n(\omega)$ et $k(\omega)$ sont appelées respectivement l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction. Elles sont définies par les relations suivantes [9,10]:

$$n(\omega) = \left\{ \frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} + \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad \text{III.9}$$

$$k(\omega) = \left\{ \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2} - \frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad \text{III.10}$$

Le coefficient d'absorption α correspond à l'énergie absorbée par unité de temps, de volume et divisée par le flux énergétique. Il est défini par l'équation suivante:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad \text{III-11}$$

α est relié à ε_2 par la relation:

$$\alpha = \frac{\varepsilon_2 \omega}{cn} \tag{III.12}$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide.

III.5.2. La réflectivité

L' indice de réfraction et le coefficient d' extinction sont liés à la réflexion sous incidence normal par la relation :

$$R(w) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \tag{III-13}$$

III.6. semi-conducteurs III-V

III.6.1. Définition

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau III.1 regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.[11]

On peut obtenir un semi-conducteur si la somme des électrons des deux espèces est égale à 8 électrons.[12]

Tableau III.1. Extrait de la classification périodique des éléments.

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

III.6.2. 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 (III-3). 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 III-2).

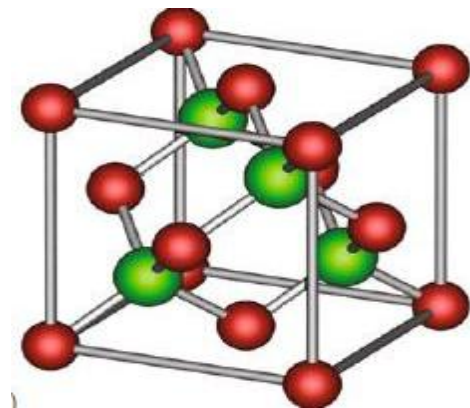
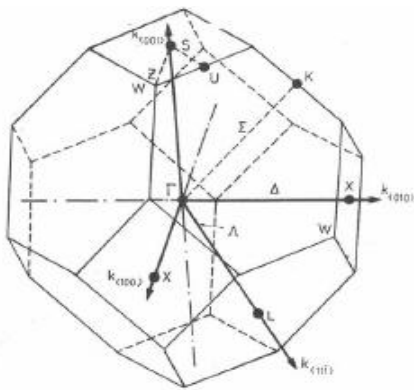


Figure III.2: Première zone de Brillouin de la Blende (ZB).
Structure zinc blende.

Figure III.3: structure Zinc-

III.6.3. Les avantages des semi-conducteurs III-V

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants :

- Leur propriété semi-isolant (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.
- Leur résistance aux radiations.
- Leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHZ à plus de 100 GHZ.

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz [13].

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium [14].

III.7. Les alliages ternaires :

Le cristal ternaire $A_xB_{1-x}C$ est composé des molécules AC avec une fraction molaire x et des molécules BC avec une fraction $(1-x)$. Ainsi, la propriété physique $F(x)$ peut être représentée comme une simple interpolation analytique des propriétés de ses composés binaires AC et BC [15]. La valeur moyenne de la propriété physique F étant :

$$F(x) = xF_{AC} + (1-x)F_{BC} \quad \text{III-14}$$

Avec :

$$F(x) = F(x) + Cx(1-x) \quad \text{III-15}$$

Où : F : étant une propriété physique quelconque.

x : fraction moléculaire (paramètre stœchiométrique).

C : est le paramètre de courbure (bowing).

III.7.1. Le paramètre de maille des alliages ternaire

Les travaux expérimentaux montrent que la constante du réseau du ternaire obéit à la loi de Vegard à l'exception de certains alliages où des très petites déviations ont été observées [16]. La constante du réseau « a » est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires (AC et BC) qui forment l'alliage.

$$a(x) = xa_{AC} + (1-x)a_{BC} \quad \text{III-16}$$

où :

$a(x)$: La constante du réseau de l'alliage.

a_{AC}, a_{BC} : les constantes du réseau des composés binaires AC et BC respectivement.

III.7.2. Gaps d'énergie de l'alliage ternaire

La qualité de la composition de l'alliage dépend des conditions de croissance. En général, le gap énergétique $E_g(x)$ de l'alliage ternaire est donné par :

$$E_g(x) = xE_{AC} + (1-x)E_{BC} + bx(1-x) \quad \text{III-17}$$

Avec :

E_{AC} est le gap du composé AC

E_{BC} est le gap du composé BC

b étant le paramètre de courbure (bowing) qui est souvent prouvé par l'expérience. L'origine du bowing est dû à l'aspect structural et au désordre compositionnel qui sont très dominant dans les fluctuations de l'alliage ternaire.

Référence

- [1] I. Hernández-Calderon, "Optical properties and electronic structure of wide band gap II-VI semi-conductors", in II-VI semi-conductor Materials and their Applications Taylor and Francis New York, 113-170 (2002).
- [2] P. Kireev, La physique de semi-conducteurs, 2e édition, édition Mir. Moscou, (1975).
- [3] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [4] M. Lach-hab, A. Dimitrios Papaconstantopoulos, M.J. Mehl, J. Phys. Chem. Solids 63, 833 (2002).
- [5] J.S. Tell, Phys. Rev. 104 (1956) 1760.
- [6] R.De.L. Kronig, J. Opt. Soc. Am. 12 (1926) 547.
- [7] F. Bassani, G. Pastroi, Parravicini, Electronic States and Optical Transitions in Solids, Pergamon Press, Oxford, (1973).
- [8] C. Ambrosch-Draxl, R. Abt, The Calculation of Optical Properties Within WIEN97, ICTP Lecture Notes 1998, unpublished; S. Sharma, C. Ambrosch-Draxl, M.A. Khan, P. Blaha, S. Auluck, Phys. Rev. B 60 (1999) 8610.
- [9] A. Delin, A. O. Eriksson, R. Ahuja, B. Johansson, M. S. Brooks, T. Gasche, et al. Phys. Rev. B 54 (1996) 1673.
- [10] M. Dressel, G. Gruner, Electrodynamics of Solids: Optical Properties of Electrons in Matter. UK: Cambridge University Press. (2002).
- [11] N.BAGHDADLI, Thèse de Magister ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS III-V A BASE DE GALIUM ‘ ’ . Université Abou-Bakr Belkaid - Tlemcen, (2010).
- [12] K.BENATMANE, Thèse de Magister ‘ ’ Etude de lasers à base de semi-conducteur III-V ‘ ’ , Université El-Hadj Lakhder - Batna.(2011)
- [13] J.Zimmermann, thèse de doctorat d’ état ‘ ’ Etude par la méthode Monté Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régime stationnaires et

non stationnaire. Application à la simulation de composants submicroniques' ' , université de l' île 1, (1980)

[14] : W.T.Anderson ' ' simulation of Semiconductor Device failure Mechanisms' ' , Naval research Laboratory, Washington. D. C, 2. Fraunhofer Institute, Freiburg, Germany (2003)

[15] J. E. Bernard and A. Zunger, Phys. Rev. B36, 3199, (1987).

[16] L. Vegard, Z.Phys. 5, 17 (1921).

A decorative border resembling a scroll, with a thick black outline and a lighter grey shadow. It features rounded corners and small circular motifs at the top and bottom edges, giving it the appearance of a rolled-up document.

Chapitre IV:
Résultats et discussion

IV.1 Introduction

D'une manière classique, un alliage est un matériau à caractère métallique combinant deux ou plusieurs métaux et éventuellement des éléments à caractère non métallique. Maintenant, on définit un alliage comme une combinaison d'atomes, ions ou de molécules pour former un matériau dont les propriétés diffèrent de celle des constituants. Le développement rapide des techniques de la croissance cristalline et l'intérêt pratique des semi-conducteurs ont permis la réalisation de plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires. L'avantage de ces alliages étend le domaine d'application optoélectronique grâce à l'ajustement de plusieurs de leurs paramètres physiques.

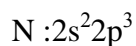
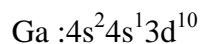
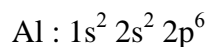
Dans ce chapitre, nous allons analyser et interpréter les résultats obtenus par les calculs des propriétés structurales, électroniques et optiques des alliages ternaires $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Cependant, ces connaissances passent par une bonne compréhension des propriétés fondamentales de ces alliages.

IV.2. Détails de calcul

Dans ce travail, les calculs ont été réalisés en utilisant le code Wien2k [1] qui est une implémentation de la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées FP-LAPW [2] dans la cadre du formalisme de la DFT. Le potentiel d'échange et de corrélation est traité en utilisant l'approximation de la densité locale LDA paramétrée par Perdew et Wang[3] et l'approximation de la fonctionnelle de Tran et Blaha [4] notée (MBJ) est une version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson. Dans la méthode FP-LAPW, la cellule unitaire est divisée en deux régions, la première est constituée de sphères qui ne chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome de rayon RMT, la deuxième est la région interstitielle. Les fonctions d'ondes, les densités électroniques et le potentiel sont développés en combinaison d'harmoniques sphériques multipliées par les fonctions radiales autour des sites atomiques, c'est-à-dire, dans les sphères Muffin-tin avec un rayon de coupure $l_{\max}=10$, et en série de Fourier dans la région interstitielle avec un rayon de coupure $\text{RMT} * k_{\max}=9$ (où RMT est le plus petit rayon de la sphère MT) (k_{\max} est la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes des fonctions propres). Les valeurs des rayons ont été fixées à $\text{RMT}(\text{AlGaN})_{0.25} = (\text{Ga}=2, \text{Al}=1.7, \text{N}=1.5) \text{ a.u.}$, $\text{RMT}(\text{AlGaN})_{0.5} = (\text{Ga}=2, \text{Al}=1.7, \text{N}=1.5) \text{ a.u.}$, $\text{RMT}(\text{AlGaN})_{0.75} = (\text{Ga}=2, \text{Al}=1.7, \text{N}=1.5) \text{ a.u.}$, $\text{RMT}(\text{GaN})=1.74 \text{ a.u.}$, $\text{RMT}(\text{AlN})=1.77 \text{ a.u.}$ L'optimisation structurale consiste à déterminer l'état fondamental.

Le processus d'itération est répété jusqu'à ce que l'erreur l'énergie totale soit et égale à 10^{-5} Ry. L'énergie qui sépare les états de valence et ceux du cœur a été prise -6 Ry.

Les configurations électroniques des éléments sont :



IV.3. Résultats et discussions

IV.3.1. Propriétés structurales

Cette première partie constitue l'étape la plus importante pour développer les calculs qui suivent. Elle consiste à optimiser le paramètre du réseau \mathbf{a} à l'équilibre, le module de compressibilité \mathbf{B} de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pour différentes concentrations allant de 0 à 1. Les calculs ont été réalisés en prenant des super cellules de huit atomes répétées périodiquement. Pour $x = 0.25, 0.50$ et 0.75 , nous avons remplacé un, deux et trois atomes de gallium, respectivement, par Al pour obtenir la concentration voulue. C'est la raison pour laquelle nous avons effectué un calcul auto cohérent de l'énergie totale pour différentes valeurs du paramètre du réseau prises au voisinage du paramètre expérimental. Le tableau IV. 1 résume les positions atomiques de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Tableau IV.1 : Positions atomiques de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

X	Atome	Positions atomiques
0.25	Al	(1/2 1/2 1/2)
	Ga	(1/2 0 0), (0 1/2 0), (0 0 1/2)
	N	(0 0 0), (0 1/2 1/2), (1/2 0 1/2), (1/2 1/2 0)
0.5	Al	(1/2 1/2 1/2), (0 0 1/2)
	Ga	(1/2 0 0), (0 1/2 0)
	N	(0 0 0), (0 1/2 1/2), (1/2 0 1/2), (1/2 1/2 0)
0.75	Al	(1/2 1/2 1/2), (0 0 1/2), (0 1/2 0)
	Ga	(1/2 0 0)
	N	(0 0 0), (0 1/2 1/2), (1/2 0 1/2), (1/2 1/2 0)

Les paramètres d'équilibre sont obtenus en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction du volume par l'équation d'état de Murnaghan [5] donnée par:

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V}{B'_0} \left(\frac{(V_0/V)^{B'_0}}{B'_0} + 1 \right) - \frac{B_0}{B'_0 - 1} \quad \text{IV.1}$$

Où E , V_0 , B_0 et B'_0 sont respectivement : l'énergie totale, le volume à l'équilibre, le module de compressibilité et sa dérivée. Le module de compressibilité est donné par :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad \text{IV.2}$$

Le paramètre du réseau à l'équilibre est donné par le minimum de la courbe $E(V)$.

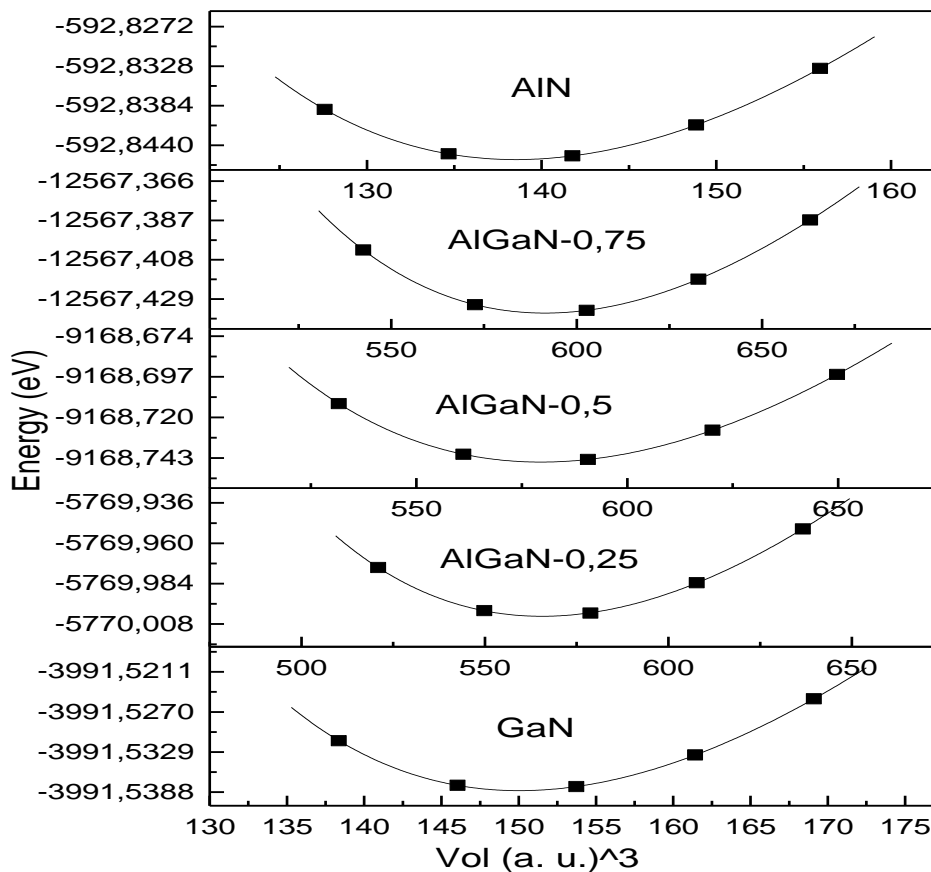


Figure IV.1 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés binaires AlN et GaN et leur alliage $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$, $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ et $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ en utilisant l'approximation LDA.

La courbe donnant la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les différents composés binaires AlN et GaN et leurs alliages $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ et $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ sont présentées dans la figure IV.1. La ligne continue représente le meilleur ajustement des points E_{tot} (V) avec l'équation d'état de Murnaghan (IV.1). Les résultats numériques obtenus pour les paramètres du réseau et les modules de compressibilité calculés par la méthode LDA relatifs aux alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sont reportés dans le tableau IV.2.

Tableau IV.2: Paramètre du réseau (a) et module de compressibilité (B) calculés pour l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ comparés à d'autres données expérimentales et théoriques.

Aliage	X	Paramètre du réseau a (Å)			Module de compressibilité B (GPa)		
		Résultats obtenus	Résultats expérimentaux	Autres calculs	Résultats obtenus	Résultats expérimentaux	Autres calculs
$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	0	4.463	4.50 [6]	4.475, 4.69	203.9433	185[8]	205.30[9]
	0.25	7.050	-	-	207.8882	-	-
	0.5	7.002	-	-	209.6852	-	-
	0.75	6.945	-	-	209.0981	-	-
	1	4.345	4.38 [7]	4.35, 4.33	201.7180	295 [10]	276.6[11]

Pour valider nos résultats, ce tableau contient également des résultats expérimentaux et théoriques obtenus par d'autres méthodes. En confrontant nos résultats optimisés à celles disponibles dans la littérature et aux résultats expérimentaux, nous constatons bien qu'il existe une bonne concordance entre tous les résultats.

La variation du paramètre de réseau **a** et du module de compressibilité **B** en fonction de la concentration de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sont présentés par la figure IV .2 .

Nous constatons que le paramètre de réseau **a** décroît en fonction de l'augmentation de la concentration **x**, par contre, l'augmentation de la concentration engendre une amélioration du module de compressibilité.

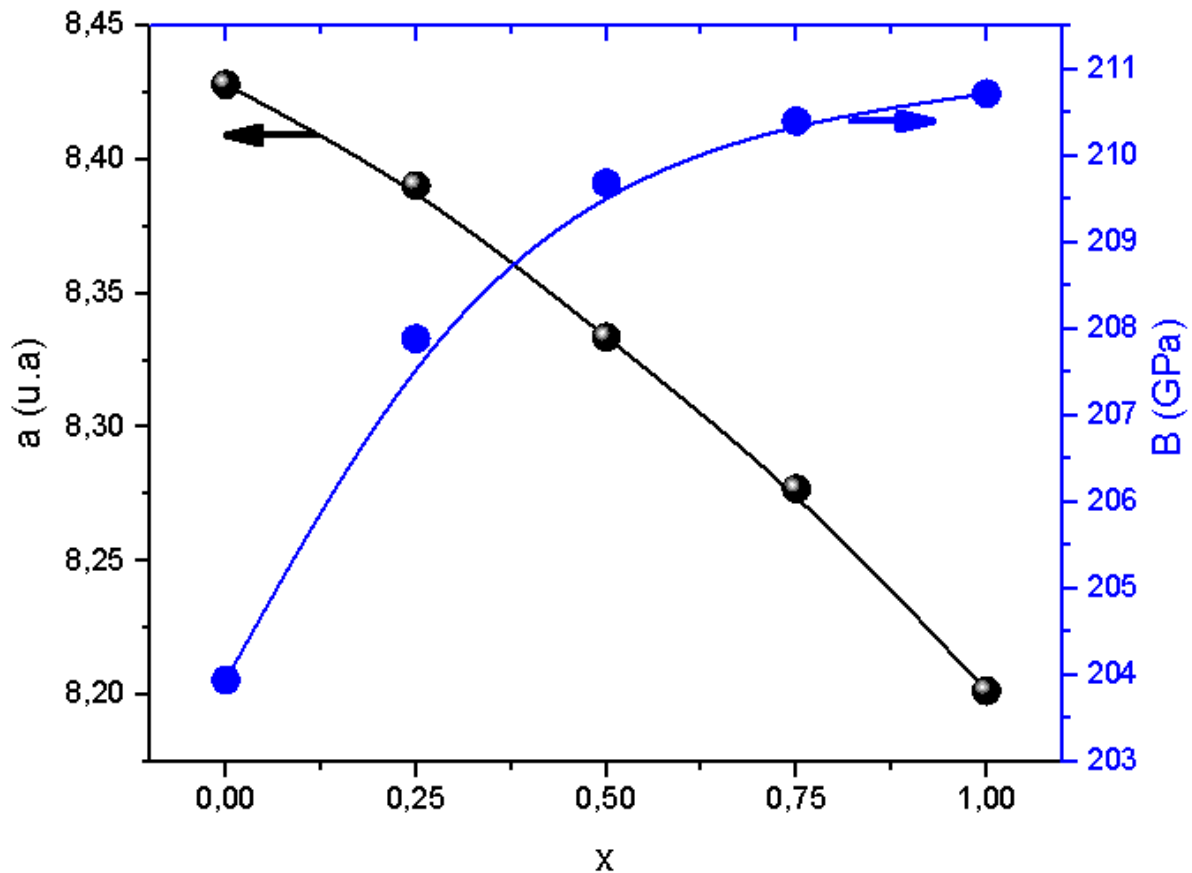


Figure IV .2 : Variation du paramètre de réseau et module de compressibilité en fonction de la concentration de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

IV.3.2. Propriétés électroniques

Les alliages semi-conducteurs fournissent une importance des gaps d'énergie afin d'optimiser et élargir les applications des dispositifs semi-conducteurs. Le gap d'énergie est connu pour être l'un des paramètres les plus importants dans les dispositifs parce qu'il est fortement relié à leur longueur d'onde de fonctionnement dans les applications optoélectroniques. Pour cela la dépendance du gap d'énergie fondamental en fonction de la composition de l'alliage prend une importance particulière. Motivés par cette raison, dans cette partie, nous avons abordé l'étude des propriétés électroniques d'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en considérant les paramètres du réseau optimisés. Les structures de bandes ont été calculées suivant les directions de haute symétrie dans la zone de **Brillouin** d'une maille cubique. Afin d'améliorer les valeurs des gaps, en plus de l'approximation LDA, l'approximation mBJ [6] a été également utilisée. Cette dernière est utilisée pour améliorer les résultats des gaps énergétiques, pour être comparables à l'expérience. Les paramètres du

réseau utilisés dans les calculs sont ceux optimisés par le calcul auto cohérent réalisé précédemment.

Les semi-conducteurs se caractérisent par une bande interdite dite (gap), qui sépare les derniers états occupés de la bande de valence et les états libres de la bande de conduction. Comme l'énergie maximale de la bande de valence se situe au point Γ et l'énergie minimale de la bande de conduction au point Γ , ces composés sont des semi-conducteurs à gap direct. Donc le composé binaire GaN et leur alliage $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$, $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ et $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ possèdent donc un gap direct dans la direction $\Gamma \rightarrow \Gamma$. Mais concernant le binaire AlN, un gap indirect est observé où le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent dans la direction $\Gamma \rightarrow X$.

Les deux figures IV.3. et IV.4. Montrent les structures de bandes des composés binaires AlN, GaN et les alliages $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$, $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ et $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ calculées à l'aide de l'approximation LDA.

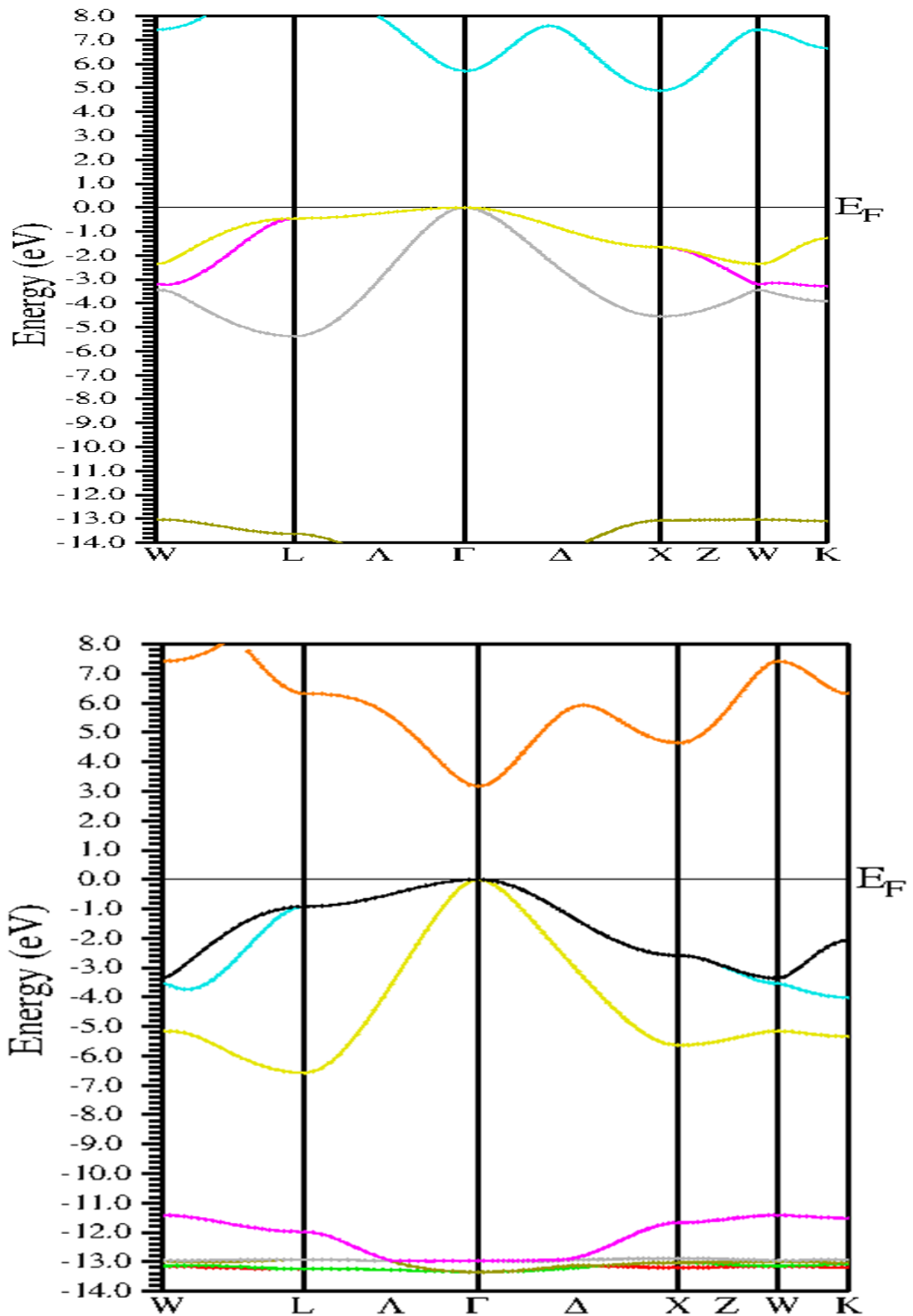


Figure IV.3 : Structures de bandes des deux composés binaires AlN et GaN en utilisant l'approximation LDA.

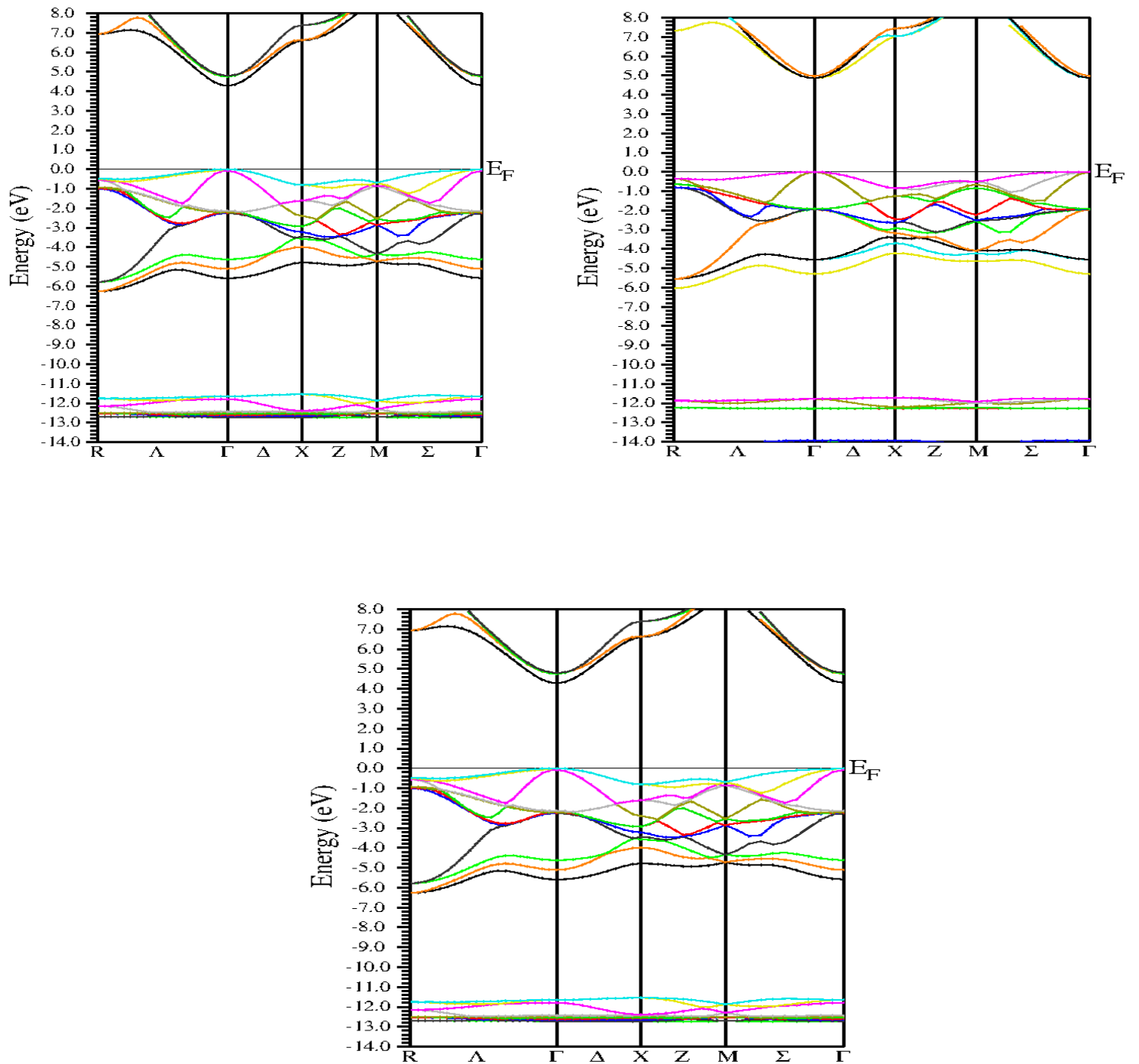


Figure IV.4 : Structures de bandes des alliages $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$, $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ et $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ en utilisant l'approximation LDA.

Le tableau IV.3 rassemble les résultats obtenus avec les résultats expérimentaux et théoriques.

Tableau IV.3: Gap énergétique de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ à différentes concentrations.

Alliage	X	Eg(ev)			
		Résultats obtenus		Résultats expérimentaux	Autres calculs
		mBJ	LDA		
Al _x Ga _{1-x} N	0	3.17	1.94	3.3 [12]	1.58, 3.211
	0.25	3.701	2.457	-	-
	0.5	4.286	3.006	-	-
	0.75	4.868	3.282	-	-
	1	4.885	3.244	5.94 [12]	4.25, 4.503

A partir du tableau IV. 3, On constate que les résultats obtenus par la méthode d'approximation LDA sont sous-estimés par rapport à l'expérience, ce qui est prévisible et attendu, étant donné que les méthodes basées sur le formalisme de la DFT adoptent ce comportement. La théorie de la fonctionnelle de la densité reproduit bien les états d'équilibre, par contre elle décrit mal les états excités. Nos valeurs du gap calculées à l'aide de l'approximation LDA concordent avec celles calculées dans les autres travaux théoriques mentionnés dans les tableaux IV.4, cela est dû au fait que ces calculs ont été effectués par des méthodes DFT. Par contre en utilisant l'approximation mBJ-LDA, les gaps sont nettement améliorés, ils sont plus proches de ceux de l'expérience en comparaison avec la LDA. Donc l'approximation mBJ nous permet de calculer les gaps énergétiques avec une précision similaire à celle des méthodes hybrides telle que la GW (Green Wave), et par conséquent nous permet de résoudre le problème de la défaillance de la DFT relatif aux gaps.

La figure IV.5 montre la variation des gaps énergétiques des alliages ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la concentration en allant de ($x=0$) vers ($x=1$). D'après nos calculs par la méthode d'approximation LDA et mBJ, on remarque que le gap énergétique augmente de façon non linéaire en fonction de la fraction molaire de l'élément Al.

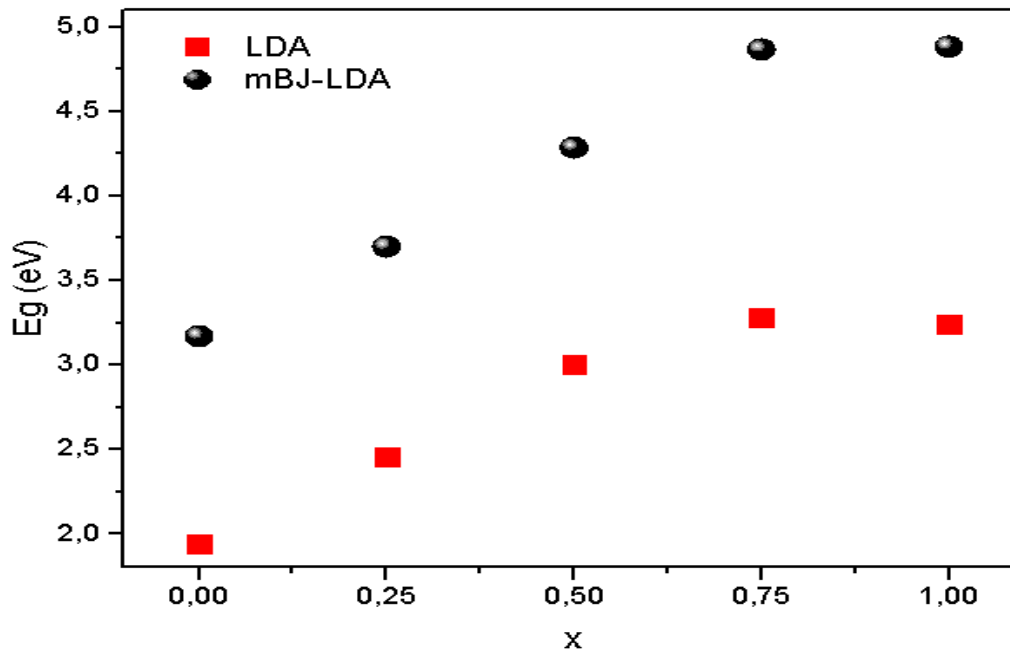


Figure IV.5 : Variation des gaps énergétiques des alliages ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la composition x en utilisant la LDA et mBJ.

IV.3 .3. Les propriétés optiques

Il est d'un grand intérêt de connaître les différentes manières dont la lumière interagit avec la matière dans la physique de l'état solide, tels que l'absorption, la transmission, la réflexion, la diffusion et l'émission.

Le calcul direct des propriétés optiques basé sur les résultats de structure de bande favorise une compréhension plus profonde de la structure électronique. Toutefois, le calcul direct des propriétés optiques exige une grille dense de points k . Dans des structures particulières, la dépendance énergétique de propriétés mentionnées ci-dessus à la structure de bande est très grande. Une information cruciale sur les valeurs propres et les fonctions propres est nécessaire pour calculer la fréquence (énergie) dépendante des propriétés optiques.

IV .3.3.a.Fonction diélectrique

➤ la partie imaginaire ε_2

Les résultats de calcul de la partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ de la fonction diélectrique dans la gamme d'énergie allant de 0 à 35 eV pour ces composés sont illustrés dans la figure (IV .6). L'analyse de ces spectres des cinq composés montre que leur comportement ($\varepsilon_2(\omega)$) est presque similaire. Les premiers points critiques de la fonction diélectrique qui correspondent aux seuils d'absorption fondamentale commencent à environ 2.1, 2.4, 2.6, 3 et 3.9 eV pour GaN, AlGaN-0.25, AlGaN-0.5, AlGaN-0.75 et AlN, 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, alors les valeurs des points critiques correspondent à la transition (Γ_v-X_c) pour AlN et la transition ($\Gamma_v-\Gamma_c$) pour GaN, AlGaN-0.25, AlGaN-0.5 et AlGaN-0.75. Ainsi, nous remarquons, la présence du pic fondamental à côté des pics principaux qui reflètent le maximum d'absorption, et qui se situent à 10.2, 10.17, 5.56, 5.6 et 5.75 eV.

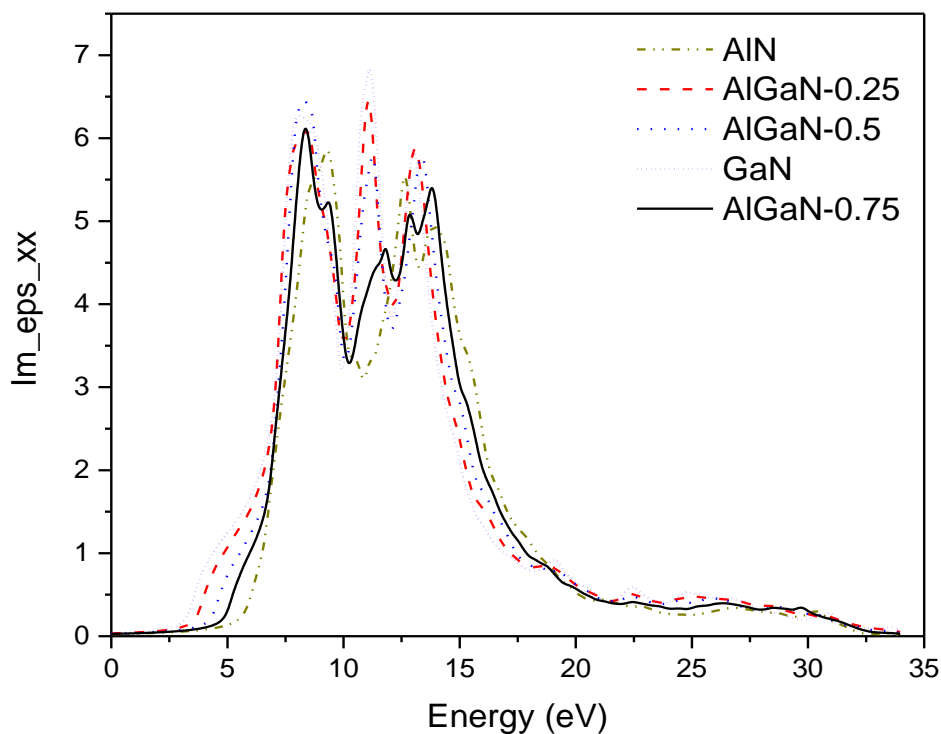


Figure IV .6 : Variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique en fonction de l'énergie pour les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

IV .3.3.b. l'indice de réfraction

Les spectres de l'indice de réfraction des composés ternaire sont illustrés par la figure (IV .7). En analysant ces spectres, on constate que les valeurs de l'indice de réfraction des composés GaN, AlGaN-.25, AlGaN-0.5 ,AlGaN-0.75 et AlN atteignent des valeurs maximales aux énergies 5.47,5.38, 5.52, 5.5 et 5.4 eV, respectivement.

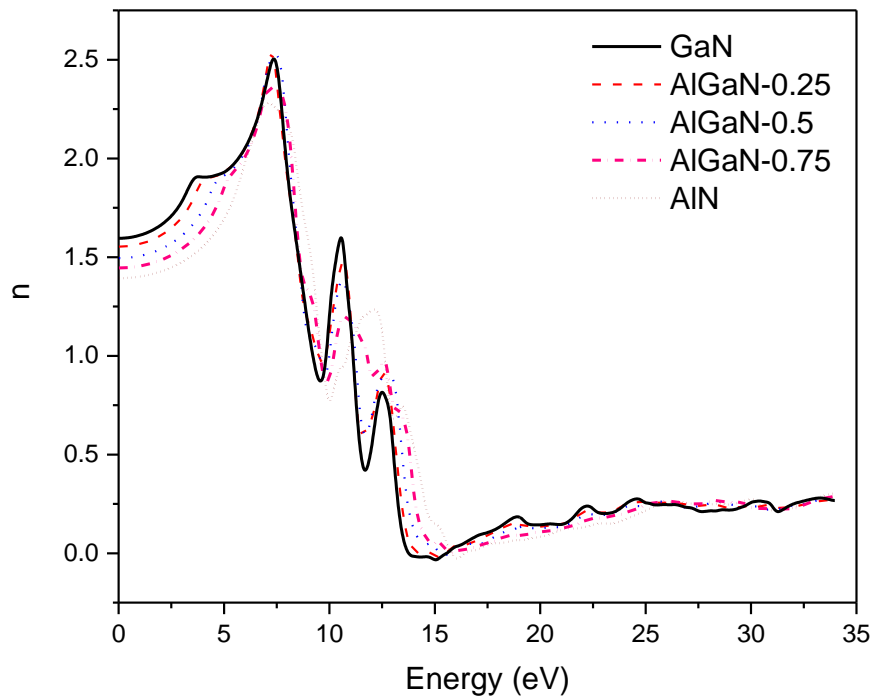


Figure IV .7 : Variation de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie pour les composé $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

IV .3.3.c. La réflectivité

La figure suivantes IV.8 présente le spectre de la réflectivité des composés (GaN,AlGaN-0.25 ,AlGaN-0.5 ,AlGaN-.075 ,AlN) .

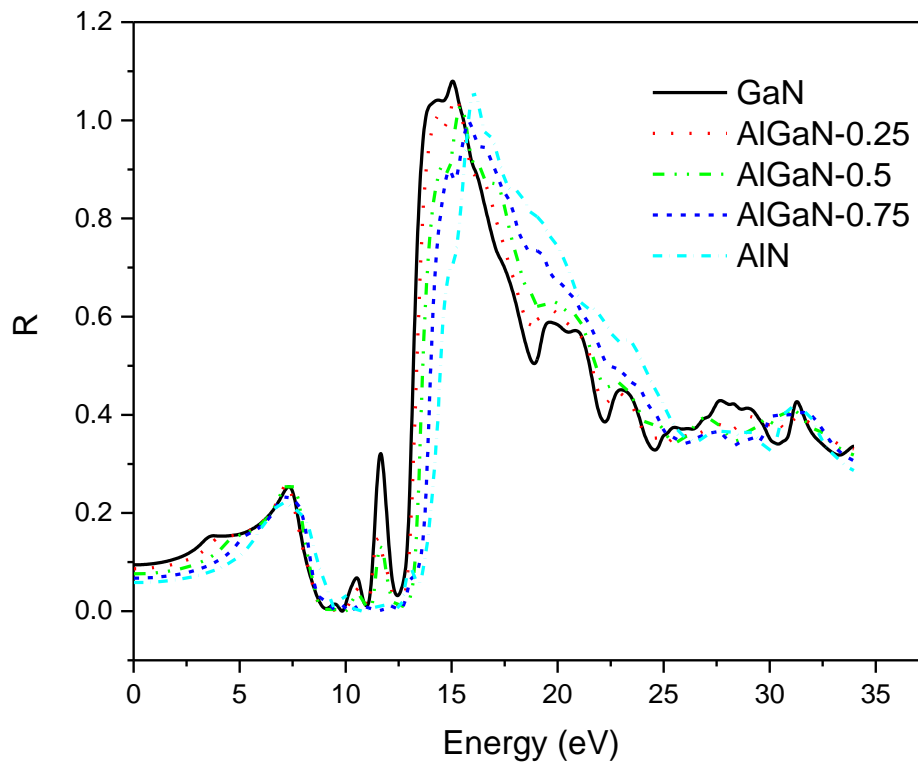


Figure IV .8 : La réflectivité de $Al_xGa_{1-x}N$ pour l'approximation LDA

L'analyse de ces spectres montre que les valeurs de réflectivité des composés GaN, AlGaN-.25, AlGaN-0.5 ,AlGaN-0.75 et AlN atteignent une valeur maximale aux énergies 15,15.13, 15.2, 15.22 et 15.4 eV, respectivement.

IV .3.3.d. Coefficient d'extinction

L'évolution du coefficient d'extinction en fonction de l'énergie des composés étudiés est montrée par la figure IV .9 . Les spectres des composés étudiés sont presque similaires. La valeur maximale du coefficient d'extinction observée sur les spectres correspond aux énergies 13.8, 14.2, 14.8, 16.5 et 17.1 eV pour les composés GaN, AlGaN-0.25, AlGaN-0.5, AlGaN-0.75 et AlN respectivement.

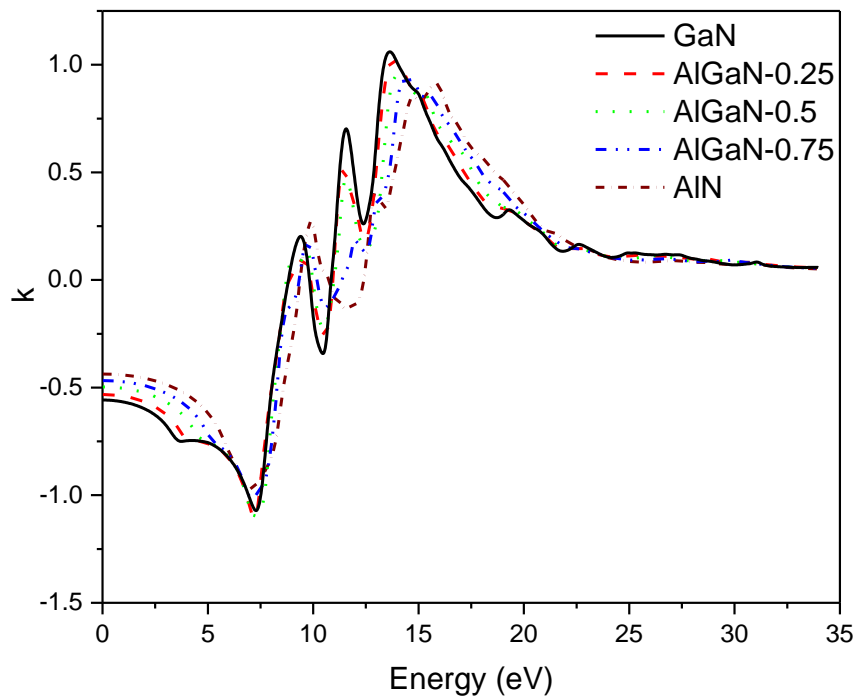


Figure IV .9 : Variation du coefficient d'extinction en fonction de l'énergie pour les composés GaN, AlGaN-0.25 ,AlGaN-0.5,AlGaN-0.75 et AlN .

Références

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Vienna, Austria (2008).
- [2] O.K. Anderson, Phys. Rev B 42 (1975) 3060.
- [3] J.P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phys.Rev.Lett. 77 (1996) 3865.
- [4] F. Tran and P. Blaha, phys Rev. let 102.226401 (2009).
- [5] F.D. Murnaghan, Proc. Natl.Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390.
- [6] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, Appl. Phys. Rev. 89 (2001) 5815.
- [7] A. Trampert, O. Brandt and K. H. Ploog, Semicond. Semimetals 50 (1998) 806.
- [8] 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).
- [9] K.Mohammed Benali, First-Principle Study of Structural, Elastic and Electronic properties 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).
- [10] Q. Xia, H. Xia, and A.L. Ruoff, J. Appl. Phys. 73, 8198 (1993).
- [11] M.B. Kanoun, First-Principles study of Structural, Elastic and Electronic Properties of AlN and GaN Semiconductors under Pressure Effect and Magnetism in AlN:Mn and GaN:Mn systems, Thesis of doctorate, Abou-Baker Belkaid University, Tlemcen, 2004.
- [12] M. Marques, L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro and J. R. Leite, Appl. Phys. Lett. 83 (2003) 890.

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 frame.

Conclusion générale

Conclusion Générale

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales telles que la constante du réseau, l'énergie total d'équilibre, les propriétés électroniques telles que la structure de bandes, les propriétés optique (fonction diélectrique, l'indice de réfraction, la réflectivité, coefficient d'extinction) des composée ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Les calculs ont été effectués par la méthode des planes linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT). Pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé la méthode d'approximation LDA et la méthode l'approximation mBJ-LDA (modified Becke- Johnson).

les propriétés structurales telles que la constante de réseau, le module de compressibilité et l'énergie totale d'équilibre sont obtenus par l'approximation LDA , d'où on note les points suivant :

- Le paramètre du réseau augmente pour l'ensemble de nos composés (AlGaN-0.25 , AlGaN-0.5 , AlGaN-.075 , GaN , AlN) respectivement.
- Nous avons constaté une diminution du module de compressibilité pour l'ensemble de nos composés (AlGaN-0.25 , AlGaN-0.5 , AlGaN-.075 , GaN , AlN) respectivement.

Les propriétés électroniques ont été restreintes à l'analyse des structures de bande. En plus de l'approximation LDA, l'approche mBJ a été utilisée pour obtenir une meilleure précision dans le calcul des gaps afin d'obtenir des valeurs qui puissent concorder avec celles de l'expérience. Les calculs ont montré que le composé binaire (GaN) sont des semi-conducteurs à gap indirect $\Gamma \rightarrow X$. Par contre, les composés (AlGaN-0.25 , AlGaN-0.5 , AlGaN-.075 , GaN) possèdent un gap d'énergie direct au point de haute symétrie Γ . L'utilisation de la méthode mBJ a apporté une nette amélioration du gap comparativement à la LDA.

Concernant les propriétés optiques, nous avons décelé à partir des schémas de bandes les différentes transitions optiques responsables de l'apparition des différentes structures sur la courbe de la partie imaginaire de la constante diélectrique. Nous avons également déterminé d'autres grandeurs optiques telles que la réflectivité. Les résultats obtenus sont prédictifs et servent de bonnes références pour de futurs travaux.

Abstract

The first principle calculations were carried out for the structural, electronic and optical properties of $Al_xGa_{1-x}N$ ternary. The full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method was employed within density functional theory (DFT). The exchange and correlation potential is treated by approximation (LDA). In addition, the modified Becke-Johnson potential was utilized to calculate the electronic properties. The effect of composition on lattice constant, bulk modulus, band gap and refractive index was investigated. Deviations of the lattice constants from Vegard's law and the bulk modulus from linear concentration dependence (LCD) were observed for the three alloys.

Résumé

Des calculs de premier principe ont été effectués sur les propriétés structurales, électroniques et optiques d'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}N$. La méthode des ondes planes augmentées et linéarisées basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) a été utilisée. Le potentiel d'échange et de corrélation est traité par l'approximation de la densité locale (LDA). En outre, l'approximation de Becke-Johnson (mBJ) a été utilisée pour calculer les propriétés électroniques. L'effet de la composition sur la constante du réseau, le module de compressibilité, le gap énergétique et l'indice de réfraction a été étudié. Les déviations des constantes du réseau par rapport à la loi de Végard et des modules de compressibilité par rapport à la loi de dépendance linéaire (LCD) ont été observées pour ce alliage.

ملخص

في هذا العمل قمنا بحساب الخواص البنيوية والالكترونية والضوئية للمركب $Al_xGa_{1-x}N$ وذلك بواسطة طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW والتي تركز على نظرية كثافة الدالة DFT وبغية حساب الخواص البنيوية استخدمنا تقريب الكثافة المحلي LDA لأجل حساب كمون التبادل و الارتباط. أما بالنسبة لحساب الخصائص الالكترونية – وبالإضافة الى التقريب اعلاه – استعملنا التقريب mBJ بعد قيامنا بالدراسة البيانية لتغيرات ثابت الشبكة, معامل الانضغاط الحجمي, الفجوة الطاقية وكذا معامل الانحراف بدلالة مختلف التراكيز x لاحظنا انحراف في منحنيات كل من ثابت الشبكة بالنسبة لقانون Vegard وكذا معامل الانضغاط الحجمي بالنسبة ل

LCD