

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université A.MIRA-BEJAIA



Faculté de Technologie
Département de Génie Electrique

Projet de Fin d'étude

En vue de l'obtention du diplôme Master en électronique
Option : instrumentation

Thème

Etude des propriétés structurales et optiques de Binaires (GaAs, InAs, GaN et InN)

Présenté par :

- ❖ M^{elle} AIT MOUHOUB Fawzia
- ❖ M^{elle} BOUDAUD Yasmina

Encadré par :

- ❖ M^{me} ACHOUR Lyakout
- ❖ Mr HADJAB Moufdi

Promotion 2017-2018

Remerciements

Nous remercions Dieu tout puissant de nous avoir accordé de la force et la volonté ainsi que les moyens afin de pouvoir accomplir ce travail.

La réalisation de ce mémoire est indissociable de son contexte familial et scientifique. Nombreux sont ceux qui nous ont soutenus, aidés et supportés.

On remercie notre encadreur "M^{elle} ACHOUR Lyakout" pour les efforts qu'elle a fait pour nous encourager.

On Remercie particulièrement "Mr HADJAB Moufdi" pour son accueil et son aide.

Aux membres du jury qui nous ont honorés en acceptant le jugement de ce travail.

Nous exprimons toute notre gratitude à nos enseignants, pour leurs efforts pendant ces dernières années d'étude.

Un grand merci à notre chère copine "M^{elle} CHEURFA Samira".

Ainsi nous tenons à remercier nos amis (e) de la promotion Instrumentation l'année 2018.

Dédicaces

Je rends grâce à dieu de m'avoir donné la force de finir mes études.

Remerciement à mes parents qui représentent un symbole d'amour, de tendresse et de sacrifices sans oublier mes sœurs Cerine, Diana et son mari, à mes chers frères et mon fiancé et toute sa famille.

Et je remercie toute ma famille : mes grand-mères, mes oncles, mes tantes (Lila, Samira, Fahima, Lamia), cousins et cousines et ma binôme Yasmina et sa famille. Ainsi que mes amis et en particulier : Bahia, Hamida, Sonia, Nadja, Sara, Nawal, Aldja, Celia.

Vous m'avez encouragée à persévérer et à lutter pour réussir, je ne trouverai jamais les mots pour vous exprimer mon affection, ma reconnaissance et mon attachement.

Merci à vous

Fawzia

Dédicaces

Je rends grâce à dieu de m'avoir donné la force de finir mes études.

Remerciement à mes chers parents qui représentent un symbole d'amour, de tendresse et de sacrifices sans oublier mes sœurs : Ferial, Lamia, Kahina, Samira, Nassima et leurs maris, à mon frère Azzedine.

Et je remercie toute ma famille : mes oncles, mes tantes, cousins et cousines, nièces et neveux et ma binôme Fouzia et sa famille. Ainsi que mes amis et en particulier Yasmina, Mounia, Sabrina, Ouardia et Karima.

A toutes personnes qui ont une place spéciale dans mon cœur.

Vous m'avez encouragée à persévérer et à lutter pour réussir, je ne trouverai jamais les mots pour vous exprimer mon affection, ma reconnaissance et mon attachement.

Merci à vous

Yasmina

Figure I. 1: Bande d'énergie d'un semi-conducteur [2].	4
Figure I. 2: axes et angles [4]	5
Figure I. 3: les quatorze réseaux de Bravais [5]	6
Figure I. 4: Dopage au phosphore(ph) (type n) [7].	7
Figure I. 5: Dopage au bore (type p) [7].	8
Figure I. 6: de la distribution de fermi et le diagramme de bande [8].	9
Figure I. 7 : Réseau cristallin dans la structure Zinc-blende [9].	10
Figure I. 8: Première zone de Brillouin	11
Figure I. 9: Structure de bande d'énergie du : A) gap indirect et B) gap direct [9].	12
Figure II. 1: Cycle auto cohérent de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [17].	20
Figure II. 2: Schéma de la division de la maille unité en sphères atomiques (région des sphères muffin-tin) et en région interstitielle (région I) pour le cas de deux atomes.	23
Figure II. 3: Organigramme de Wien2k [25]	27
Figure III. 1: structure cristalline de GaAs, InAs, GaN et InN.	30
Figure III. 2 Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les quatre composés..	32
Figure III. 3: structure de bande des composés GaAs et InAs obtenus par l'approximation TB-mBJ.	34
Figure III. 4: structure de bande des composés GaN et InN obtenus par l'approximation TB-mBJ.	35
Figure III. 5: la variation spectrale de la partie imaginaire de la fonction diélectrique pour GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mBJ	38
Figure III. 6: la variation spectrale de la partie réelle de la fonction diélectrique pour GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mBJ.	38
Figure III. 7: la variation spectrale du coefficient d'absorption pour les composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mBJ	40
Figure III. 8: la variation de l'indice de réfraction n en fonction de l'énergie pour les composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN.	41
Figure III. 9: la variation spectrale de la réflectivité pour GaAs, InAs, GaN et InN calculées par TB- mBJ.	42
Figure III. 10: la variation spectrale de la conductivité pour les composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mB	43

Tableau I. 1: Classification périodique de quelques éléments. 9

Tableau I. 2: Deux types d'énergie de gap de quelques semi-conducteur III-V à base de gallium et d'indium [12]. 12

Tableau III. 1: Le paramètre de maille a , l'erreur relative Δa , le module de compressibilité B et sa première dérivé B' pour les quatre composés binaires comparés à d'autre résultats. 33

Tableau III. 2: L'énergie de gap (E_g) pour le GaAs, GaN, InAs et InN calculé par les 36

Tableau III. 3: Fonction diélectrique statique $\epsilon_1(0)$, la réflectivité statique $R(0)$ et l'indice de réfraction statique $n(0)$ pour les composés GaAs, InAs, GaN, InN calculées par la TB-mBJ. 43

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction générale..... 1

Chapitre I : généralités sur les semi-conducteurs

I.1. Introduction 3

I.2. Les Semi-Conducteurs 3

 I.2.1 Définition..... 3

 I.2.2 Notion de bande d'énergie..... 3

 I.2.3 Les cristaux..... 4

 I.2.4 Réseaux de Bravais..... 4

 I.2.4.1 Les types de réseaux..... 5

 I.2.5 Types des semi-conducteur 6

 I.2.5.1 Semi-conducteur intrinsèque..... 6

 I.2.5.2 Semi-conducteur extrinsèque 7

 I.2.6 Niveau de Fermi 8

I.3. Semi-conducteur III-V 9

 I.3.1 Définition..... 9

 I.3.2 Propriété structurale des semi-conducteurs III-V 10

 I.3.2.1 Structure zinc blende 10

 I.3.3 Propriété électronique des semi-conducteur III-V..... 11

 I.3.3.1 Gap direct et gap indirect 11

 I.3.4 Propriété optique des semi-conducteurs III-V..... 12

 I.3.4.1 Absorption optique d'un semi-conducteur 12

 I.3.4.2 La réflexion 13

 I.3.4.3 Transmission 13

 I.3.5 Les avantages des semi-conducteurs III-V 14

I.4. Conclusion..... 14

Chapitre II : Méthodes de calculs

II.1.	Introduction	16
II.2.	L'équation de Schrödinger	16
II.2.1.	La théorie de la densité fonctionnelle (DFT)	17
II.2.2.	Théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	17
II.2.3.	Les équations de kohn et Sham.....	18
II.3.	Le terme d'échange-corrélation.....	20
II.3.1.	L'approximation de la densité locale (LDA)	21
II.3.2.	L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	21
II.3.3.	L'approximation EV- GGA (Engel-Vosko)	22
II.3.4.	Approximation du potentiel Becke-Johnson modifié par Tran et Blaha (TB-mBJ) 22	
II.4.	Méthode de calcul de la structure électroniques	23
II.4.1.	La méthode des ondes planes augmentées (APW)	23
II.4.2.	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec le potentiel complet (FP-LAPW)	24
II.5.	Présentation du logiciel wien2k :	26
II.6.	Conclusion.....	27

Chapitre III : Résultats et discussions

III.1.	Introduction	30
III.2.	Définition d'un alliage	30
III.3.	Le détail du calcul	30
III.3.1.	Propriétés structurales	31
III.3.2.	Propriétés électroniques	34
III.3.2.1.	Structure de bande	34
III.3.1.1.	Propriétés optiques.....	37
III.3.2.2.	Coefficient d'absorption :	39
III.3.2.3.	Indice de réfraction	40
III.3.2.4.	La réflectivité.....	41
III.3.2.5.	La conductivité	42
III.4.	Conclusion.....	44
	Conclusion générale	45

Références bibliographiques

Introduction générale

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 de la 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 sont au cœur de notre vie moderne. Presque dans tout ce que nous faisons, que ce soit dans notre travail, nos voyages, nos communications, les semi-conducteurs interviennent partout. Bien que cette domination a ses racines dans l'évolution datant de plusieurs années, les progrès n'ont pas été diminués par la réalisation, et les exigences pour l'amélioration des performances qui continue à repousser les limites de fabrications, et a ouvert la voie à de nouveaux concepts de dispositifs à base de matériaux semi-conducteurs.

Les matériaux à composés semi-conducteurs III-V et leurs propriétés optiques et électroniques avantageuses ont été une force motrice dans la recherche fondamentale sur ce type de matériaux depuis des décennies. Ces derniers ont d'excellentes propriétés de transport et d'optiques, et ils comprennent ainsi de large gamme de choix de paramètre de maille adapté qui permet au développement de nouveaux dispositifs ou les améliorer en tenant compte de l'ingénierie de la largeur de bande interdite. Les éléments du groupe de semi-conducteurs III-V peuvent être mixés à d'autre atomes pour adapter la largeur de bande interdite afin d'aboutir à des propriétés électroniques et optiques souhaitables à la réalisation de dispositifs désirés. Progrès et études sur les semi-conducteurs III-V à base de nitrure ont conduit à une augmentation exponentielle de l'activité orientée vers les applications optoélectroniques. En plus de nouvelles possibilités dans les applications de dispositifs fournis par cette nouvelle classe de matériaux, de nombreuses propriétés physiques intéressantes distinctement différentes ont été découvertes.

Dans ce mémoire notre objectif est basé sur une contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN par la méthode FP-LAPW implémentée dans le code de calcul Wien2k. pour cela nous avons procédé comme suit :

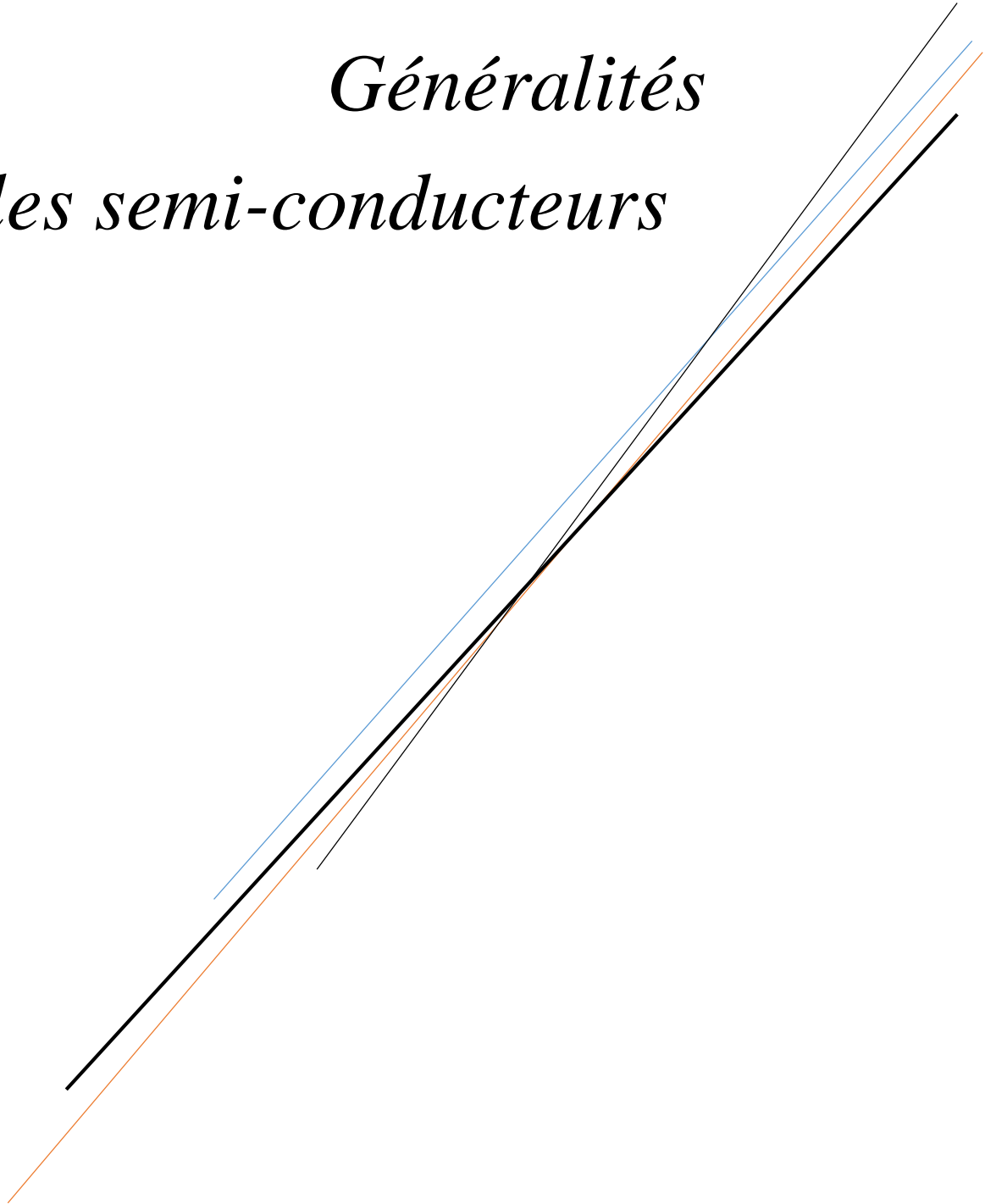
Dans le premier chapitre, on présente des rappels et des généralités sur les semi-conducteurs, leurs propriétés structurales, optiques et électroniques. Des notions théoriques importantes pour la compréhension de la physique fondamentale appliquée aux matériaux semi-conducteurs ont été détaillé.

Le deuxième chapitre est consacré aux calculs des propriétés physiques des matériaux étudiés, ainsi que des rappels sur la méthode théorique de base utilisée pour prédire les propriétés structurales, électroniques et optiques en se basant sur plusieurs approximations et approches théoriques.

On conclut notre travail par la partie pratique dans laquelle nous présenterons les résultats de nos calculs relatifs aux différentes propriétés pour les quatre composés binaires, qui seront comparés aux autre résultats théoriques et expérimentales.

Chapitre I :

Généralités sur les semi-conducteurs



I.1. Introduction

Les semi-conducteurs désignent les matériaux capables de relayer du courant électrique en ayant des propriétés physiques intermédiaire entre le métal et l'isolant. Ce sont des éléments essentiels de l'électronique et de l'informatique modernes puisqu'ils permettent de contrôler à la fois la direction du courant et son intensité.

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteur III-V constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulière qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Leur grande mobilité électronique permet d'obtenir des dispositifs à haute rapidité de commutation en électronique. Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteur III-V interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.

L'objet de ce premier chapitre est une présentation aussi simple que possible sur les semi-conducteurs et aussi de leurs propriété structurales et optique des alliages III-V.

I.2. Les Semi-Conducteurs

I.2.1 Définition

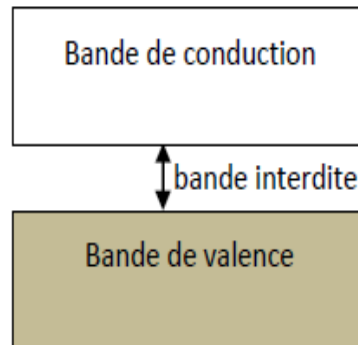
On appelle un semi-conducteur un matériau électriquement intermédiaire entre isolant et conducteur sa conductivité intermédiaire comprise entre 10^3 et 10^{-6} S/cm. Les éléments les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le silicium, le germanium et le Carbone [1].

I.2.2 Notion de bande d'énergie

Dans un corps solide, deux bande sont particulièrement importantes pour la compréhension des phénomènes de conduction : la bande de conduction et la bande de valence.

Dans la bande de valence se situe les électrons liés avec le réseau cristallin. La bande de conduction représente les niveaux d'états des électrons libres. Une fois qu'un électron acquière une énergie suffisante, il peut transiter vers la bande de conduction. Les bandes sont séparées par une zone énergétique interdite : c'est la plage des énergies que les électrons ne peuvent pas avoir. Cette zone s'appelle gap énergétique. C'est un paramètre propre du matériau. Une fois qu'un électron acquiert une énergie suffisante (égale au moins à la largeur

de gap), il peut transiter vers la bande de conduction. Parmi les mécanismes par lesquels les électrons peuvent recevoir de l'énergie, on cite l'échauffement : plus la température d'un corps est élevée, plus l'énergie des électrons est grande, plus ils ont de chance de franchir le gap.



Semi-conducteur

Figure I. 1: Bande d'énergie d'un semi-conducteur [2].

I.2.3 Les cristaux

Il existe deux types d'états solides, l'état dans lequel l'arrangement des atomes est aléatoire et celui dans lequel les atomes sont arrangés régulièrement aux nœuds d'un réseau.

- Le premier état est amorphe, les matériaux qui se solidifient dans cet état sont généralement appelés verres.

- Le deuxième état qui nous intéresse plus particulièrement ici, c'est l'état cristallin. Un cristal est le résultat d'une répétition ordonnée d'un constituant élémentaire appelé groupement formulaire (GF) peut être un atome, une molécule ou encore un ion atomique. La position du motif dans le réseau périodique forme le nœud de réseau [3].

I.2.4 Réseaux de Bravais

La recombinaison de sept systèmes cristallins et des quatre types de maille élémentaire conduit à quatorze types de réseaux appelés réseaux de Bravais.

La convention adoptée pour décrire les réseaux cristallins consiste à choisir les distances a , b et c selon les axes x , y et z . Les angles α , β et γ étant définis dans le plan perpendiculaire à l'axe auquel on les fait correspondre.

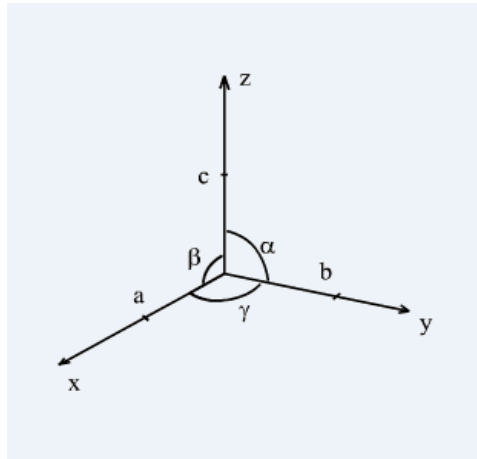
















Figure I. 2: axes et angles [4]

I.2.4.1 Les types de réseaux

On distingue 4 types principaux réseaux :

- Les réseaux primitifs(p) ou les atomes sont positionnées aux angles de maille.
- Les réseaux centrées(I) ou les atomes sont positionnées aux angles et au centre de la maille.
- Les réseaux à face centrées (F) ou les atomes sont positionnés aux angles et sur le centre de chacune des faces de la maille.
- Les réseaux à base centrées(A, B ou C) ou les atomes sont positionnés aux angles et au centre de deux faces se "faisant face" .

Système	Mode de réseau				Éléments de symétrie
	Primitif P	centré I	Bases centrées C	Faces centrées F	
Cubique $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$					$3C_4, 4C_3, 6C_2$ $i, 9\sigma$
Rhomboédrique $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$					$1C_3, 3C_2, i$ 3σ
Hexagonal $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$					$1C_6, 6C_2, i$ 7σ
Quadratique $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$					$1C_4, 4C_2, i$ 5σ
Orthorhombique $a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$					$3C_2, i$ 3σ
Monoclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$					$1C_2, i$ 1σ
Triclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$					i

Les 14 réseaux de Bravais

Figure I. 3: les quatorze réseaux de Bravais [5]

I.2.5 Types des semi-conducteur

On distingue deux types de semi-conducteurs :

I.2.5.1 Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsque le cristal ne possède aucune impureté qui est susceptible de modifier la densité des porteurs. Pour une température différente de 0k, les électrons peuvent passer de la bande de valence à la bande de conduction, où leur concentration est notée n. Ces électrons laissent derrière eux des trous (dans la bande de valence), avec une concentration notée p. La concentration intrinsèque n_i dans ce cas est égale aux concentration n et p. Elle est définie par [6] :

$$n = p = n_i(T)AT^{\frac{3}{2}} * \exp\left(\frac{-E_g}{2KT}\right) \tag{I.1}$$

Où A est une constante spécifique du matériau.

T : la température.

E_g : la valeur de gap du matériau.

K : la constante de Boltzmann.

I.2.5.2 Semi-conducteur extrinsèque

Les semi-conducteurs extrinsèques sont des semi-conducteurs qui ont été « dopés », c'est-à-dire que l'on a introduit des impuretés qui ont une bande de valence différente de celle des atomes dans les semi-conducteurs à l'état pur. On distingue les impuretés de type donneurs, qui peuvent fournir des électrons supplémentaires à la bande de conduction, et les impuretés de type accepteur qui peuvent capter des électrons de la bande de valence ou en d'autre terme fournir des trous à la bande de valence.

L'introduction d'impuretés peut considérablement modifier la conductibilité électrique d'un semi-conducteur. Il existe deux types de semi-conducteurs extrinsèques :

- **Semi-conducteur dopé n**

Dans ce cas, le cristal est dopé avec des atomes possédant un électron de valence supplémentaire. Cet électron pourra se déplacer librement dans le réseau parce qu'il n'est pas lié à un atome en particulier. Les atomes d'impureté sont appelés donneurs. On y a introduit généralement du phosphore, de l'Arsenic ou encore de l'Antimoine. Prenons par exemple le cas du silicium dans lequel on introduit de l'Arsenic(As) (As possède 5 électrons sur la couche extérieure).

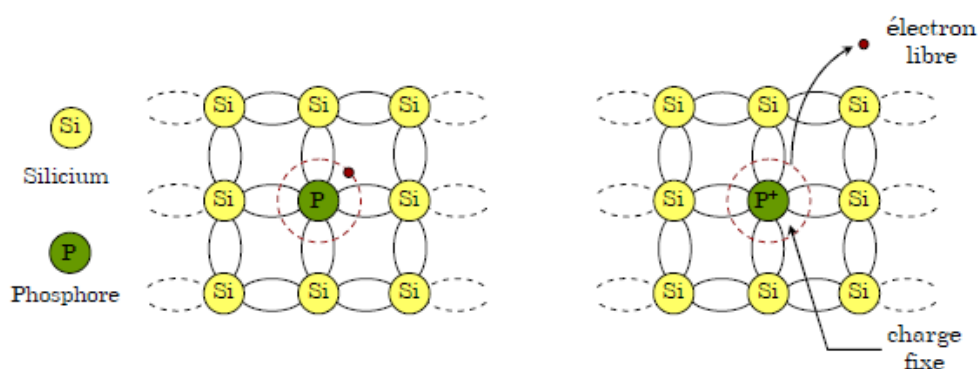


Figure I. 4: Dopage au phosphore(ph) (type n) [7].

A la température ambiante pratiquement tous les donneurs sont ionisés et si la concentration en atomes donneurs est N_d la densité de porteurs libres du semi-conducteur sera : $n = n_0 + N_d$

Où n_0 est la densité d'électrons générés par le processus de rupture de liaison de covalence qui engendre des paires électrons-trous .

- **Semi-conducteur dopé p**

Dans ce type de dopage, le cristal est dopé avec des atomes possédant un électron de valence moins, il y aura donc un trou parmi les électrons de valence. Ce trou peut être vu comme une charge positive mobile. On y introduit généralement du Bore, de l'Aluminium, du Gallium ou encore de l'Indium. La figure I.3 ci-dessous, illustre le dopage du silicium par le Bore.

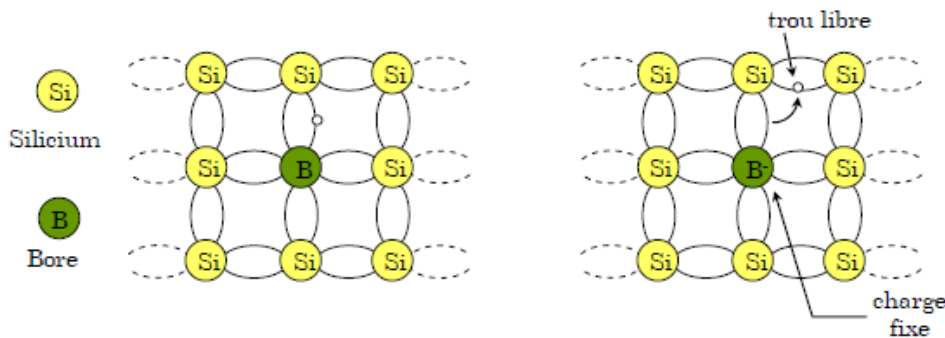


Figure I. 5: Dopage au bore (type p) [7].

De la même façon que le semi-conducteur dopé n, la concentration en trous du semi-conducteur sera : $P = P_0 + N_a$

I.2.6 Niveau de Fermi

La largeur de la bande interdite (gap) représente l'énergie qu'il faut fournir à un électron pour qu'il passe de la bande de valence à la bande de conduction. La distribution des électrons sur les différents niveaux énergétiques est donnée par la fonction de Fermi, qui dans les conditions d'équilibre thermique s'écrit :

$$f = \frac{1}{1 + \exp((E - E_F)/KT)} \quad (I.2)$$

K : constante de Boltzmann.

T : température absolue.

E_F : "niveau de Fermi" correspond au niveau d'énergie où l'on a la même probabilité de trouver un état vide ou occupé.

- Dans le cas d'un semi-conducteur intrinsèque parfait, E_F se situe au milieu de la bande interdite .
- Dans les semi-conducteurs extrinsèques de type n (les porteurs majoritaires sont des charges négatives). L'ajout des électrons supplémentaires provoque un déplacement du niveau de Fermi vers la bande de conduction.

- Dans les semi-conducteurs extrinsèque de type p (les porteurs majoritaires sont des charges positive). L'ajout des trous supplémentaires provoque un déplacement du niveau de Fermi vers la bande de valence.

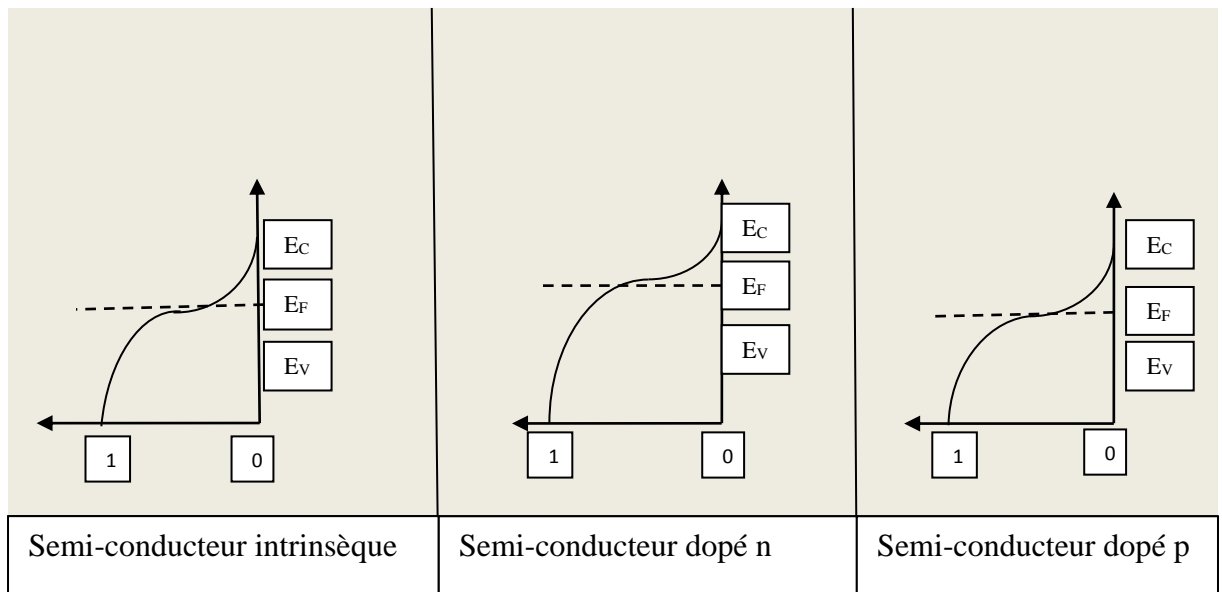


Figure I. 6: de la distribution de fermi et le diagramme de bande [8].

I.3. Semi-conducteur III-V

I.3.1 Définition

Les matériaux semi-conducteur III-V sont des corps formés à partir d'un élément de la troisième colonne et d'un élément de la cinquième colonne de la classification périodique de Mendeleïev. On peut obtenir ce dernier si la somme des électrons des deux éléments égale à 8 électrons. L'intérêt pratique des semi-conducteur III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages de l'un des éléments par un autre élément.

Le tableau suivant représente un extrait de la classification périodique :

III	IV	V
10,81 ⁵ B	28,09 ¹⁴ Si	14,01 ⁷ N
26,98 ¹³ Al	28,09 ¹⁴ Si	30,97 ¹⁵ P
69,79 ³¹ Ga	72,59 ³² Ge	74,92 ³³ As
114,83 ⁴⁹ In	118,69 ⁵⁰ Sn	121,75 ⁵¹ Sb

Tableau I. 1: Classification périodique de quelques éléments.

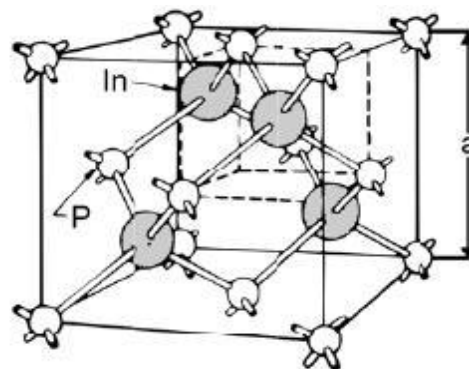
Les semi-conducteurs composés sont constitués de plusieurs éléments tels que les binaires ternaires et quaternaires. Dans ce travail on s'intéresse aux composants binaires qui peuvent être constitués de deux éléments de la colonne III et V (GaAs, InAs, GaN et InN).

I.3.2 Propriété structurale des semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs sont exclusivement des solides cristallins. Leurs propriétés électroniques, optiques, mécaniques, thermiques sont donc liées à la géométrie particulière qui représente l'arrangement des atomes au sein du matériau : le réseau cristallin.

I.3.2.1 Structure zinc blende

La plupart des matériaux III-V cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée dans la Figure I.7. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc), l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale principale. Chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un autre atome de l'autre espèce. Le réseau est alors entièrement défini par une seule grandeur a qui est la constante du réseau, appelée aussi paramètre de maille.



Zinc Blende
(GaAs, InP, etc.)

Figure I. 7 : Réseau cristallin dans la structure Zinc-blende [9].

A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est un système de coordonnées (énergie, vecteur d'onde k). Le réseau réciproque du réseau de Bravais correspondant à la structure zinc blende qui est un réseau cubique centré sa première zone de

Brillouin qui définit comme la maille primitive dans l'espace réciproque est donnée par la figure I.8.

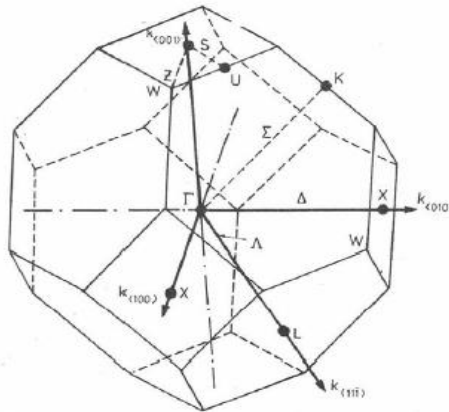


Figure I. 8: Première zone de Brillouin

I.3.3 Propriété électronique des semi-conducteur III-V

Les matériaux de semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. D'un point de vue atomique, les liaisons tétraédriques sont issues de l'hybridation sp^3 des fonctions d'onde des électrons, et donc chaque cellule dispose de six orbitales p (trois liantes et trois anti liantes) et deux orbitales s (une liante et une anti liante). Le remplissage des états s'opère de la manière suivante : deux électrons occupent les états liants s et les six autres électrons remplissent les états liants p , tandis que les niveaux anti liants restent vides à basse température [11].

I.3.3.1 Gap direct et gap indirect

Les structures de bande d'énergie représentées dans la figure I.9 font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteur :

- Les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles.
- Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le maximum de la bande de valence n'est pas en face du minimum de la bande de conduction (ils correspondent à des vecteurs d'onde k différents). Leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité.

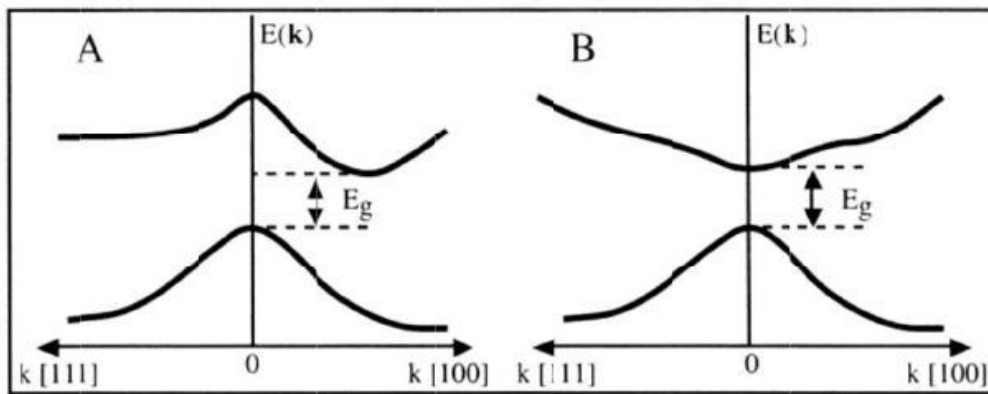


Figure I. 9: Structure de bande d'énergie du : A) gap indirect et B) gap direct [9].

Le tableau (I.2) résume les deux types d'énergie de gap de quelques semi-conducteur III-V à base de gallium :

Semi –conducteur	Type d'énergie de gap
GaP	Indirect
GaAs	Direct
GaN	Direct
InN	Direct
InAs	Direct

Tableau I. 2: Deux types d'énergie de gap de quelques semi-conducteur III-V à base de gallium et d'indium

[12].

I.3.4 Propriété optique des semi-conducteurs III-V

Les propriétés optiques des semi-conducteurs font intervenir non seulement à la répartition des états d'énergie (niveau discrets ou bandes) permis pour les électrons, mais également aux divers processus par lesquels les électrons peuvent changer de niveaux d'énergie.

Lorsque la lumière passe d'un milieu à un autre, on constate trois phénomènes :

I.3.4.1 Absorption optique d'un semi-conducteur

Un atome qui reçoit un photon de longueur d'onde adéquate, peut l'absorber. Un semi-conducteur est transparent lorsque les photons ont une énergie insuffisante pour exciter des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction et devient opaque lorsque les photons ont une énergie qui dépasse ce seuil. Pour que la transition y ait lieu dans ce cas, il

faut qu'il y ait conservation de l'énergie E et du vecteur d'onde k (quantité de mouvement). Le seuil d'absorption optique dépend alors de la structure de bande du matériau considéré.

Dans la transition directe, le seuil d'absorption optique donne accès directement au gap du semi-conducteur par la relation $E_g = h\nu$ c'est le cas des alliages III-V.

Dans le cas de transition indirecte ; le processus faisant intervenir des électrons et des trous séparés par un vecteur d'onde Δk n'est pas négligeable, l'absorption des photons d'énergie supérieur au gap génère des paires électron-trou lorsqu'on éclaire un échantillon de semi-conducteur.

L'apparition de ces porteurs excédentaires provoque l'augmentation de la conductivité du matériau (photoconductivité) lorsque l'éclairement s'interrompt, les concentrations de porteurs retournent vers leur valeur à l'équilibre avec une constante de temps caractéristique qui le temps de vie des porteurs photon créés.

I.3.4.2 La réflexion

En passant d'un matériau (ou d'un milieu non solide) transparent à un autre, une partie de la lumière est réfléchiée et on détermine la réflectivité :

$$R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2 \quad (\text{I.3})$$

n_1 : l'indice de réfraction du premier milieu.

n_2 : l'indice de réfraction du deuxième milieu.

I.3.4.3 Transmission

Lorsque la lumière change de milieu de propagation, elle peut subir un changement de direction dans le nouveau milieu, c'est la transmission.

$$T = \frac{4n}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{I.4})$$

n : l'indice de réfraction de milieu.

Ces grandeurs sont liées à l'indice de réfraction n et au coefficient d'absorption α .

Où k est le coefficient d'extinction, relié au coefficient d'absorption α par l'expression [13] :

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (\text{I.5})$$

λ : est la longueur d'onde.

I.3.5 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 [14].

I.4. Conclusion

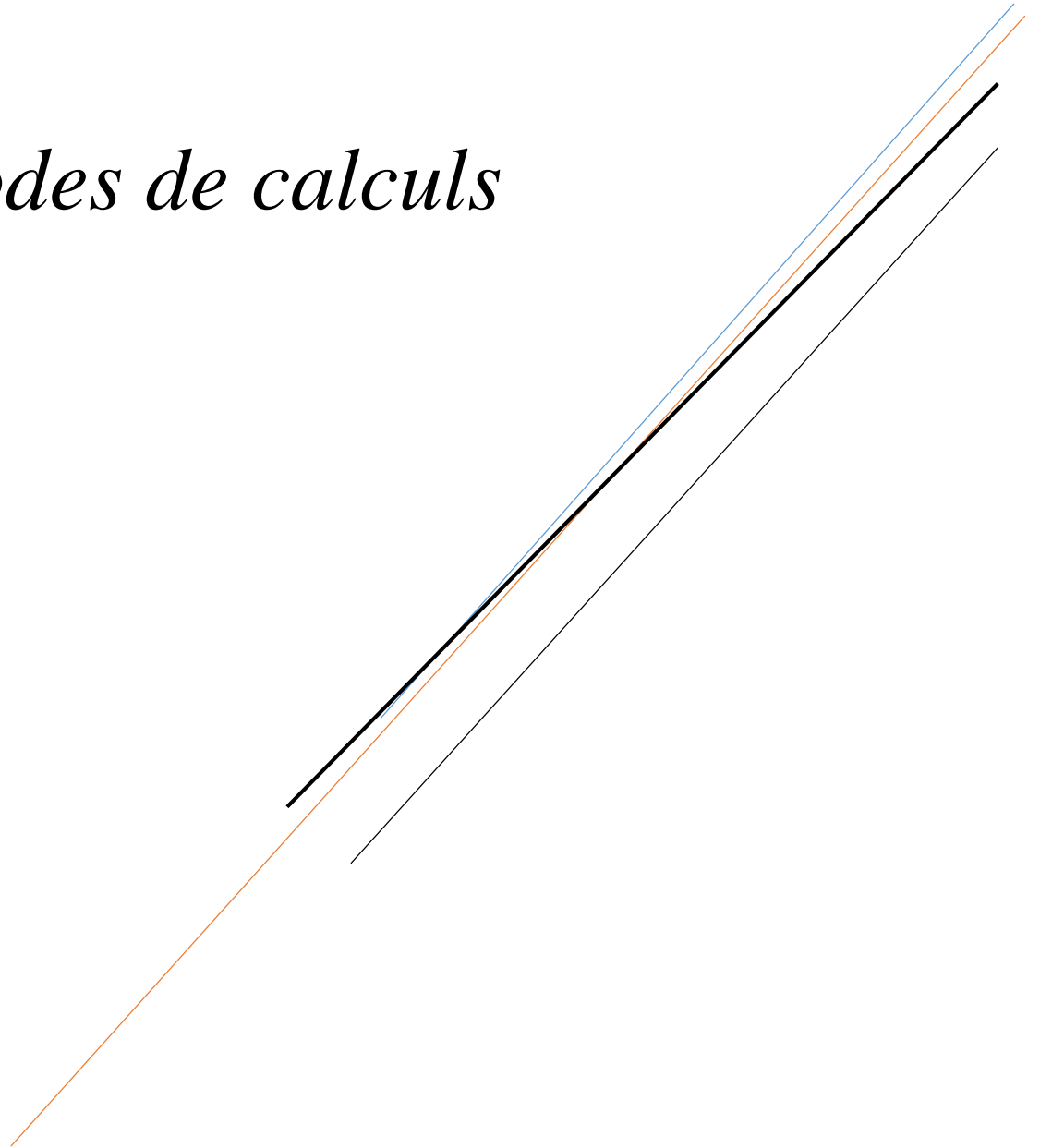
La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux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

Les semi-conducteurs III-V et leurs alliages correspondants, occupent actuellement une position privilégiée dans plusieurs domaines d'application tels que l'optoélectronique.

Le domaine de l'optoélectronique a connu un essor considérable grâce à l'utilisation des matériaux semi-conducteurs III-V comme le GaAs, InAs et InN à gap directe. Ces matériaux permettent notamment de réaliser tous les émetteurs performants que nous connaissons aujourd'hui.

Chapitre II :

Méthodes de calculs



II.1. Introduction

L'étude des propriétés électroniques et structurales des matériaux est basée sur la détermination de leurs structures. L'étude des différents phénomènes qui se manifestent nécessite la résolution de l'équation de Schrödinger. Vu la complexité de cette dernière, plusieurs méthodes ont été proposées pour effectuer différents calculs.

Parmi ces méthodes, on peut citer les méthodes ab-initio ou méthodes de premier principe. Ces dernières sont basées sur les concepts de la mécanique quantique, et elles consistent à résoudre l'équation de Schrödinger sans utilisation de données expérimentales, passant par différentes approximations de simplification.

II.2. L'équation de Schrödinger

La mécanique quantique définit une particule de la matière comme une onde, c'est-à-dire, elle ne possède pas une trajectoire bien définie, plutôt distribuée à travers l'espace. La donnée de la fonction d'onde de la particule permet de décrire son état. Pour trouver la fonction d'onde d'un système, le physicien autrichien Schrödinger proposait une équation indépendante du temps qui s'écrit comme suit :

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

Où : H : l'Hamiltonien.

E : l'énergie total du système.

Ψ : la fonction d'onde (fonction propre).

La résolution de l'équation de Schrödinger de ce système est impossible à cause de nombre des interactions élevé, c'est pour ça il est nécessaire de faire appel à certaines méthodes, si l'on souhaite accéder à une solution réaliste de H . La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) offre ainsi des perspectives intéressantes.

Le hamiltonien exacte est de forme :

$$H = T_n + T_e + V_{n-n} + V_{n-e} + V_{e-e} \quad (\text{II.2})$$

Où : T_n : énergie cinétique des noyaux

T_e : énergie cinétique des électrons.

V_{n-n} : énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

V_{n-e} : énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.

V_{e-e} : énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

Afin de trouver des états propres approximatifs acceptables, nous avons besoin de faire des approximations comme l'approximation de Born-Oppenheimer, approximation de Hartree et approximation de Hartree-Fock [15].

II.2.1. La théorie de la densité fonctionnelle (DFT)

Les méthodes de calcul par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), forment la base d'un domaine théorique diversifié et très actif de nos jours pour le calcul atomique, moléculaire, de l'état solide et même pour la physique nucléaire. Le nombre de travaux publiés basés sur cette approche attrayante et efficace semble avoir augmenté de façon quasi exponentielle ces dernières années. Le problème fondamental de la théorie de la matière condensée que la DFT tente de résoudre est de savoir comment traiter mathématiquement les interactions d'un grand nombre de particules. Si le système qui nous intéresse est un atome ou une petite molécule, le nombre de particules est encore assez faible, mais si nous avons affaire à des systèmes plus importants, décrivant la fonction d'onde du système devient explicitement impossible.

L'équation de Schrödinger traitée précédemment est écrite en fonction de la fonction d'onde car elle contient toutes les informations du système mais elle ne peut pas être directement mesurée à cause du nombre élevé des interactions. Pour résoudre ce problème, on utilise cette théorie qui est basée sur les deux théorèmes fondamentaux de Hohenberg et Kohn.

II.2.2. Théorèmes de Hohenberg et Kohn

Théorème 1

Hohenberg et Kohn ont montrés qu'il existe une correspondance biunivoque entre le potentiel extérieur et la densité électronique $\rho(r)$ permettant de représenter le premier comme une fonctionnelle de l'état fondamental de la deuxième. Par conséquent, l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle unique de la densité électronique soit :

$$E = E[\rho(r)] \quad (\text{II.9})$$

Ce théorème est à la base de la théorie de la fonctionnelle de la densité et explique l'appellation qui lui a été donnée. Une conséquence immédiate de ce théorème est que la densité électronique détermine de façon unique l'opérateur hamiltonien du système. Ainsi, en connaissant la densité électronique, l'opérateur hamiltonien peut être déterminé et à travers cet hamiltonien, les différentes propriétés du matériau peuvent être calculées [16].

Théorème 2

Ce théorème montre que :

pour un potentiel V_{ext} et un nombre d'électrons N donnés, l'énergie totale du système atteint sa valeur minimale lorsque la densité $\rho(r)$ correspond à la densité exacte de l'état fondamental $\rho_0(r)$:

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{II.9})$$

La fonctionnelle de l'énergie totale de l'état fondamental s'écrit comme suit :

$$E[\rho(r)] = F[\rho(r)] + \int V_{ext}(r)\rho(r)d^3r \quad (\text{II.10})$$

Où : V_{ext} : le potentiel externe agissant sur les particules.

$F[\rho(r)]$: la fonctionnelle universelle de Hohenberg et Kohn, avec :

$$F[\rho(r)] = \langle \Psi | T + V_{ext} | \Psi \rangle \quad (\text{II.11})$$

La connaissance de cette fonctionnelle permet de déterminer l'énergie totale et la densité de charge de l'état fondamental pour un potentiel externe donné, en utilisant le principe variationnel. Malheureusement, le théorème de Hohenberg et Kohn ne donne aucune indication de la forme de $F[\rho(r)]$ [16].

II.2.3. Les équations de kohn et Sham

Kohn et Sham ont développé une approche basée sur la DFT, dans laquelle ils ramènent le système réel composé de N électrons interagissant, à un système fictif de N électrons indépendants de même densité électronique que le système réel. En effet, l'intérêt vient du fait que les expressions de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle, pour un système sans interaction sont connues.

Pour le système fictif, les théorèmes de Hohenberg et Kohn s'appliquent également. La

fonctionnelle de la densité $F[\rho(\vec{r})]$ pour le système interactif peut être exprimée par

l'expression suivante :

$$E[\rho(\vec{r})] = T_0[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] + V_{ext}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{II.12})$$

Où : $T_0[\rho(\vec{r})]$: l'énergie cinétique du système d'électrons sans interaction .

$E_H[\rho(\vec{r})]$: terme de Hartree.

$E_{xc}[\rho(\vec{r})]$: terme qui comprend les effets d'échange et de corrélation.

$V_{ext}[\rho(\vec{r})]$: inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux .

Le choix de Kohn et Sham de se référer à un système fictif de N électrons sans interaction implique la résolution de N équations de Schrödinger « mono électroniques ». Cela nous amène à réécrire le problème sous la forme de trois équations interdépendantes. Les équations de Kohn et Sham sont les suivantes :

- La première donne la définition du potentiel effectif ressenti par les électrons :

$$V_{eff}[\rho(\vec{r})] = V_{ext} + \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{xc}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{II.13})$$

Où le potentiel d'échange et corrélation est donné par la fonctionnelle dérivée :

$$V_{xc}[\rho(\vec{r})] = \frac{\delta E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (\text{II.14})$$

- La seconde équation utilise le potentiel V_{eff} estimé dans les N équations de Schrödinger afin d'obtenir les fonctions d'ondes φ_i :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.15})$$

$$i = 1, \dots, N.$$

- La troisième équation donne l'expression de la densité électronique en fonction des N

fonctions d'onde φ_i obtenues :

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \quad (\text{II.16})$$

Vu leur interdépendance, ces trois équations doivent être résolues de manière auto-cohérente, illustré par l'organigramme de la Figure II.1. On commence par injecter la densité de charge. En débutant à partir d'une certaine densité initiale, un potentiel $V_{eff}[\rho(\vec{r})]$ est obtenu pour lequel l'équation II.12 est résolue et une nouvelle densité électronique est alors déterminée. A partir de cette nouvelle densité, un nouveau potentiel effectif peut être calculé. Ce processus est répété de façon auto-cohérente jusqu'à ce que la convergence soit atteinte, et que la nouvelle densité électronique soit égale ou très proche de la précédente.

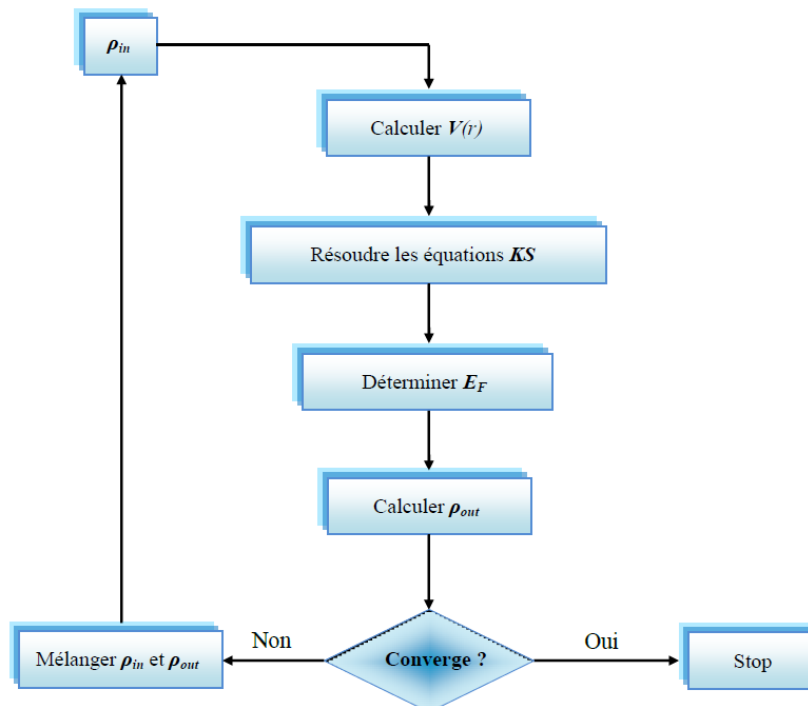


Figure II. 1: Cycle auto cohérent de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [17].

II.3. Le terme d'échange-corrélation

Le formalisme de Kohn et Sham repose sur le lien entre un système réel de N électrons et un fictif sans interaction à travers le potentiel d'échange et de corrélation V_{XC} . Ainsi, V_{XC} contient des informations essentielles sur les corrélations à plusieurs corps. L'énergie d'échange-corrélation tel qu'elle apparaît dans l'équation de Kohn et Sham peut alors être interprété physiquement comme l'énergie due à l'interaction des électrons avec le trou d'échange-corrélation. De nombreux systèmes ont été développés pour obtenir des formes approximatives pour la fonctionnelle de l'énergie d'échange et de corrélation, la recherche sur la plus précise fonctionnelle est un domaine active des efforts de recherche actuels .Concevoir une bonne fonctionnelles de l'énergie E_{XC} est le principal problème dans la théorie de la fonctionnelle de

la densité (DFT). La principale source d'erreur dans la DFT provient généralement de la nature approximative du terme E_{XC} , qui est une fonction inconnue. Cependant, plusieurs approximations sont utilisées comme LDA, GGA, EV-GGA et TB-mBJ [18].

II.3.1. L'approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité locale a été pendant longtemps l'approximation la plus utilisée pour l'énergie d'échange et de corrélation. Elle considère $E_{XC}(\rho)$ comme une fonctionnelle locale de la densité électronique $\rho(r)$.

L'énergie d'échange et de corrélation s'exprime de la manière suivante :

$$E_{XC}^{LDA}(\rho) = \frac{e^2}{2} \int \rho(r) \varepsilon_{XC}(\rho(r)) d^3r \quad (\text{II.17})$$

Où

$\varepsilon_{XC}(\rho)$: l'énergie d'échange et de corrélation d'un gaz homogène d'électrons.

La LDA suppose que $\varepsilon_{XC}(\rho)$ est purement locale. Cette énergie est divisée en deux contributions : l'énergie d'échange et l'énergie de corrélation [19] :

$$\varepsilon_{XC}(\rho) = \varepsilon_X(\rho) + \varepsilon_C(\rho) \quad (\text{II.18})$$

II.3.2. L'approximation du gradient généralisé (GGA)

L'approximation du gradient généralisé (GGA) est apparue à l'origine comme une amélioration de la LDA, et ceci pour rendre compte de certains résultats expérimentaux non reproduite par cette dernière. La GGA utilise la même relation (II.17) mais avec $\varepsilon_{XC}(\rho)$ remplacée par une fonction locale de la densité et de son gradient $\varepsilon_{XC}(\rho, |\nabla\rho|)$.

$$E_{XC}^{GGA}(\rho) = \frac{e^2}{2} \int \rho(r) \varepsilon_{XC}(\rho, |\nabla\rho|) d^3r \quad (\text{II.19})$$

$$E_{XC}^{GGA} = E_C^{GGA} + E_X^{GGA} \quad (\text{II.20})$$

Où $\varepsilon_{XC}(\rho, |\nabla\rho|)$ représente l'énergie d'échange et de corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme [20].

II.3.3. L'approximation EV- GGA (Engel-Vosko)

Dans les deux approximations LDA et GGA apparaît une lacune majeure dans l'estimation d'énergie du gap qui est essentiellement due au terme de corrélation, qui est jugé trop simple. Pour corriger cette lacune, Engel et Vosko ont montré que la GGA ne s'améliore pas sur l'expansion du second ordre du gradient généralisé due la plupart du temps à l'annulation des erreurs locales ; d'où la correction apportée aux termes d'échange et corrélation. En mixant second ordre avec le terme d'échange et corrélation, cette nouvelle forme (EV-GGA) améliore le calcul du gap [21].

II.3.4. Approximation du potentiel Becke-Johnson modifié par Tran et Blaha (TB-mBJ)

Beaucoup de calculs dans ces dernières décennies ont montré que l'approximation du gradient généralisé développée par Engel et Vosko (EV-GGA) donne généralement une bonne description des propriétés électroniques des solides. La EV-GGA est devenue un outil très populaire des calculs basés sur le premier principe de la physique de l'état solides, et a contribué de manière significative à la compréhension des propriétés des matériaux semi-conducteurs. Cependant, quelques erreurs systématiques ont été observés lors de l'utilisation de cette dernière, à savoir la EV-GGA, comme la sous-estimation de l'énergie du gap pour presque tous les éléments semi-conducteurs. Récemment, une nouvelle forme analytique simple pour le potentiel d'échange a été proposée par Becke et Johnson. Ce potentiel, qui dépend de la densité d'énergie cinétique, a été montré pour reproduire parfaitement la forme du potentiel d'échange exacte obtenue avec la méthode du potentiel effectif optimisé (OEP) pour les atomes. Des calculs sur des solides montrent que le potentiel d'échange et de corrélation semi-local de Becke-Johnson (mBJ) et sa forme modifiée proposée par Tran et Blaha (TB-mBJ) conduit à une meilleure description des largeurs de bande interdite de semi-conducteurs et des isolants par rapport à la méthode EV-GGA. L'approximation avec les potentiels Becke-Johnson a été mis en œuvre en auto-cohérente dans le code de calcul informatique Wien2k qui est basé sur la méthode ondes planes augmentées linéarisées avec le potentiel complet [22].

II.4. Méthode de calcul de la structure électroniques

La méthode linéaire des ondes planes augmentées (LAPW) est une modification fondamentale de la méthode des ondes planes augmentées (APW) de Slater. Donc, avant d'entamer cette nouvelle méthode, on commence tout d'abord par un petit rappel sur la méthode(APW).

II.4.1. La méthode des ondes planes augmentées (APW)

Slater a développé la nouvelle méthode (APW) dans laquelle il a proposé une étape radiale par l'introduction de l'approximation Muffin-tin pour décrire le potentiel cristallin. Selon cette approximation, la cellule unité sera divisée en deux types de régions :

- La première région est prise près du noyau atomique, où le potentiel et la fonction d'onde sont similaires à ceux d'un atome isolé, c'est à dire ils varient fortement, donc, dans cette région qui est définie par des sphères « Muffin-Tin » (*MT*) de rayon R_α , le potentiel est à symétrie sphérique et les fonctions d'ondes sont des fonctions radiales qui représentent la solution de l'équation de Schrödinger .
- La deuxième région c'est la région interstitielle (I), où le potentiel est considéré constant et les fonctions d'ondes utilisées sont des ondes planes (Figure II.2)

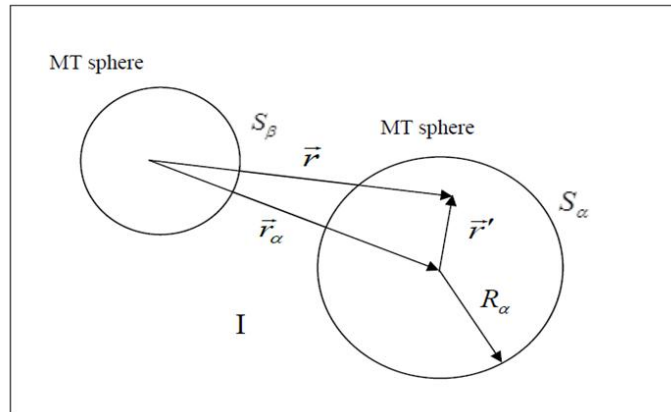


Figure II. 2: Schéma de la division de la maille unité en sphères atomiques (région des sphères muffin-tin) et en région interstitielle (région I) pour le cas de deux atomes.

Une onde plane augmentée (APW) utilisée dans l'expansion de $\psi_{\vec{k}}^{\vec{K}}$ est définie comme suit :

$$\psi_{\vec{k}}^{\vec{K}}(\vec{r}, E) = \begin{cases} \sum_{l,m} A_{l,m}^{\alpha, \vec{k} + \vec{K}} u_l^\alpha(r', E) y_l^m(r') & \vec{r} \in S_\alpha \\ \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i(\vec{k} + \vec{K}) \cdot \vec{r}) & \vec{r} \in I \end{cases} \quad (\text{II.21})$$

Où

\vec{k} : vecteur de l'espace réciproque.

\vec{K} : vecteur du réseau réciproque.

V : volume de la cellule unité.

\vec{r} : position de l'électron par rapport à l'origine du système de coordonnées.

\vec{r}_α : position du centre de la sphère Muffin-tin S_α .

$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{r}_\alpha$: position de l'électron à l'intérieure de la sphère par rapport au centre.

y_l^m : harmoniques sphériques.

$A_{l,m}^{\alpha, \vec{k} + \vec{K}}$: coefficients du développement en harmoniques sphériques.

u_l^α : la solution régulière de la partie radiale de l'équation de Schrödinger pour un atome libre α .

Bien qu'elle s'applique à une plus grande variété de matériaux, l'APW présente quelques difficultés liées à la fonction radiale. Définit par l'équation II.22, du fait qu'il est possible de trouver de l'énergie E_l à la surface de la sphère MT qui s'annule la fonction $U_l(r)$ qui est une solution de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale :

$$\left\{ \frac{-d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V^\alpha(r) - E_l \right\} r u_l^\alpha(r, E) = 0 \quad (\text{II.22})$$

L'utilisation de ces fonctions a été motivée par le fait que les ondes planes sont les solutions de l'équation de Schrödinger dans un potentiel constant et les fonctions radiales sont des solutions dans un potentiel sphérique. Cette approximation au potentiel s'appelle "Muffin-tin" (MT). Pour un atome libre réel, les conditions aux limites telles que $u_l^\alpha(r, E)$ s'annule quand r tend vers l'infini, limitant ainsi le nombre d'énergies E pour les quelles une solution u_l^α peut être trouvée. Mais comme ces conditions aux limites ne s'appliquent pas pour le cas du cristal, nous pouvons trouver une solution numérique pour n'importe quelle E [23].

II.4.2. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec le potentiel complet (FP-LAPW)

Andersen a proposé une méthode dans laquelle les fonctions de base et leurs dérivées sont continués en les égalisant pour une énergie fixe. Ce choix résout les problèmes rencontrés dans la méthode APW en donnant ainsi une méthode de structure des bandes, flexible et exacte. Cette méthode est appelée la méthode linéaire des ondes planes augmentées LAPW. La fonction de base de la Méthode FP-LAPW possède des ondes planes dans la région interstitielle comme dans la méthode APW et harmoniques sphériques dans les

sphères. Ces fonctions sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $u_l(r)$, $Y_{lm}(r)$ et leur dérivé $\dot{U}_l(r)$ et $Y_{lm}(r)$ par rapport à l'énergie. Les fonctions u_l sont définies comme dans la méthode APW mais avec E_l fixe et les fonctions doit satisfaire la condition suivante :

$$\left\{ \frac{-d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (\text{II.23})$$

Les fonctions d'ondes augmentées deviennent les fonctions de base de la méthode FP-LAPW:

$$\Psi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G \text{EXP}[i(G + K)r] & \in I \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r, E_l) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_l)] Y_{lm}(r) & \in S \end{cases} \quad (\text{II.24})$$

Où :

Et par conséquent, la fonction U_l peut être développée en fonction de sa dérivé \dot{U}_l et de l'énergie E_l .

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l) \dot{U}_l(E, r) + Q((E - E_l)^2) \quad (\text{II.25})$$

Où

$Q((E - E_l)^2)$: signifie l'erreur quadratique énergétique.

La méthode FP-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 les fonctions d'onde très correctement, tandis que la méthode FP-LAPW entraîne une erreur sur les fonctions d'onde de l'ordre de $(E - E_l)^2$ et une autre sur les énergies de bandes de l'ordre de $(E - E_l)^4$. Malgré cet ordre d'erreur, les fonctions LAPW forment une bonne base qui permet, avec un seul E_l , d'obtenir toutes les bandes de valence dans un grand intervalle 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 FP-LAPW.

La méthode de potentiel complet(FP-LAPW) est bien la méthode la plus précise et la plus utilisé à l'heure actuelle, bien qu'elle soit relativement lourde(calculs). L'amélioration apportée à cette méthode réside dans l'utilisation du potentiel totale, et aucune approximation n'est utilisée pour sa description [24].

II.5. Présentation du logiciel wien2k :

Le code Wien2k est un programme de calcul des propriétés des matériaux électronique, optiques et structurales dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) basée sur la méthode FP-LAPW. Il a été développé par P. Balaha, et ses collaborateurs. Le Wien2k est fondé sur un ensemble de base alternative qui permet une amélioration significative, en termes de facilité d'emploi, de vitesse et d'universalité. Grâce à ce logiciel, il est possible d'avoir accès à diverses propriétés physiques des matériaux, ainsi de tracer différents spectres tel que la structure de bande.

L'organigramme de ce logiciel est donné par la figure II.3. La procédure de calcul passe par trois étapes :

- **L'initialisation :**

Cette première étape consiste à la géométrie, les densités de départ et le nombre de point nécessaire à l'intégration dans la zone de Brillouin. Ces opérations sont effectuées par une série de programmes qui génèrent :

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

SGROUP : il calcule les groupes ponctuels et spatiaux pour une structure donnée.

LSTART : c'est un programme qui génère les densités atomiques et détermine les différents orbitales qui sont traités dans le calcul de la structure de bandes.

SYMMETRY : il génère les opérations de symétrie du groupe spatiale, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels.

KGEN : il génère le nombre de point k dans la zone de Brillouin.

DSART : il génère une densité de départ pour le cycle auto-cohérent (le cycle SCF) par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

- **Calcul auto-cohérent (ou self-consistant) :**

Cette étape consiste aux calculs des énergies et la densité électronique de l'état fondamental selon le critère de convergence. Les sous-programmes utilisés sont :

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 pour les vecteurs propres.

LCORE : calcule les états et les densités de cœur.

MIXER : effectue le mélange des densités d'entrée et de sortie, et vérifie si la convergence est rétablie ou non.

Afin d'exécuter nos calculs, le code WIEN2K a besoin d'un seul fichier d'entrée, le fichier "case.struct". Ce fichier contenant les coordonnées atomiques décrivant la géométrie du système, à savoir, type du réseau de Bravais, nombre d'atomes équivalent, les paramètres de mailles ainsi que les angles. Les sites atomiques de Chaque particule sont aussi mentionnés dans ce fichier.

- **Détermination des propriétés :**

Les propriétés de l'état fondamental (densité de charge, structure de bande, propriétés optiques...) sont déterminées une fois que le calcul auto-cohérent est achevé.

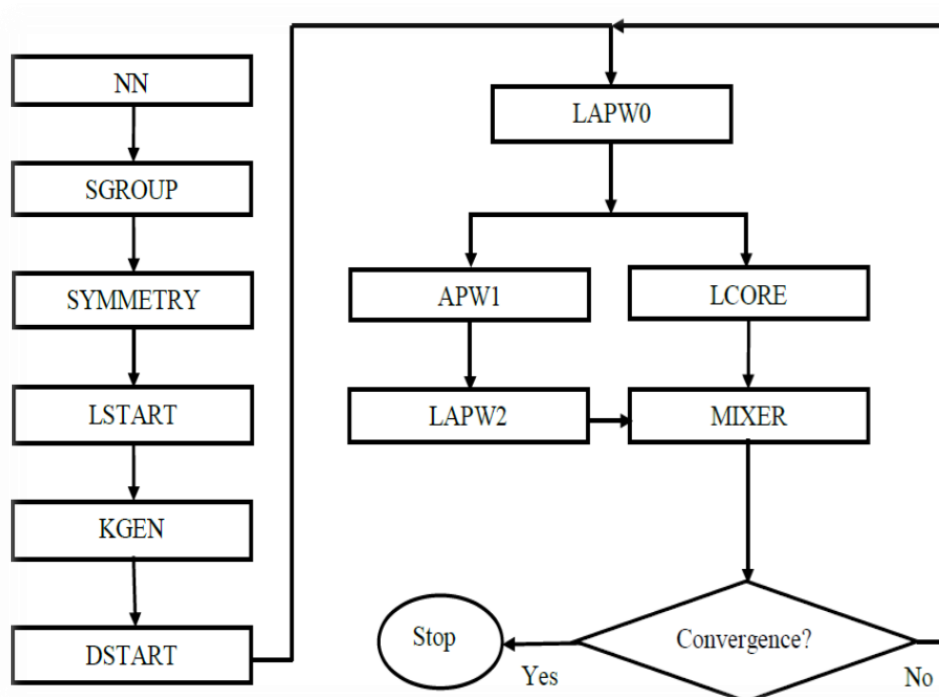


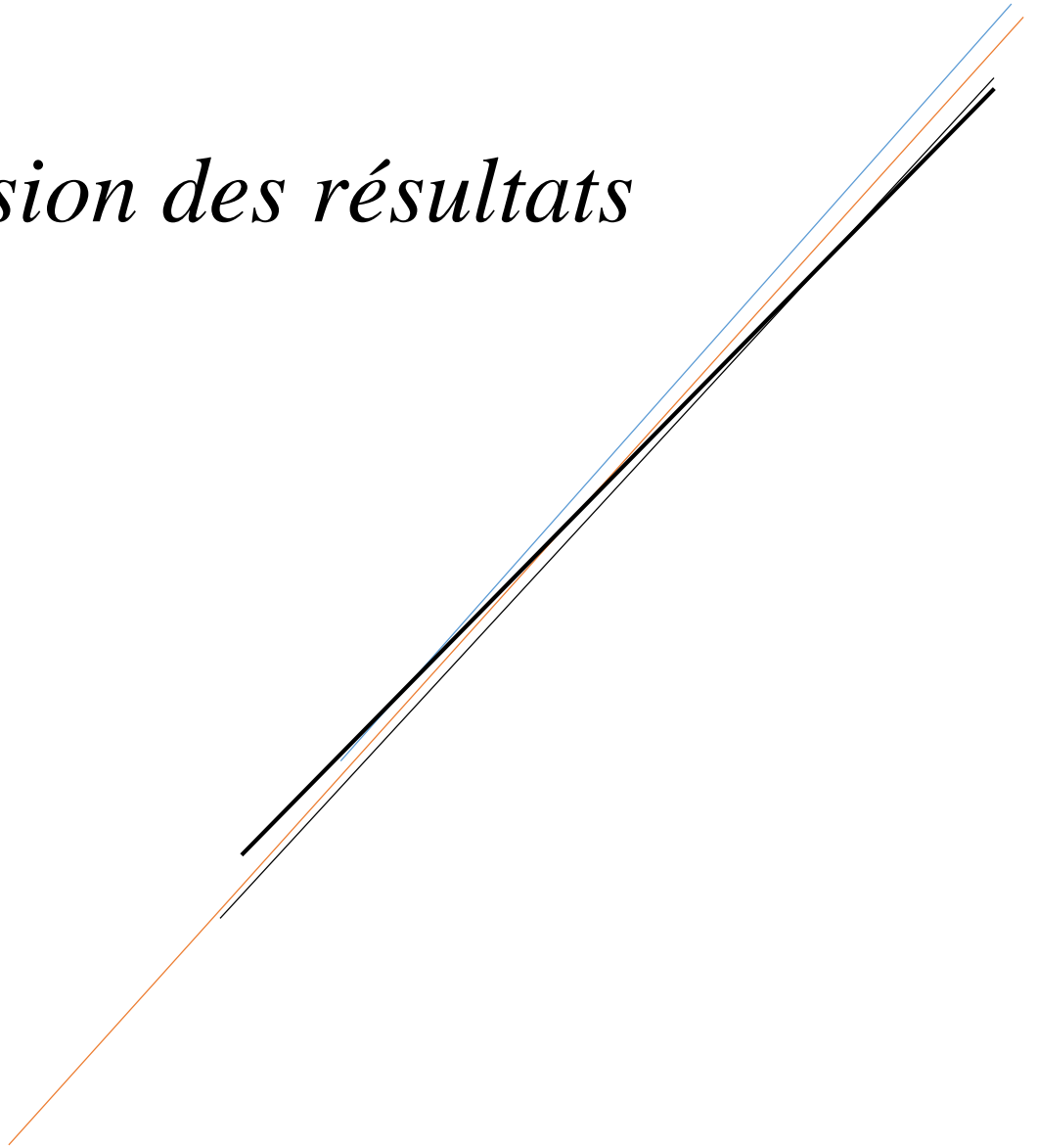
Figure II. 3: Organigramme de Wien2k [25]

II.6. Conclusion

Les méthodes de calcul permettent en principe de calculer n'importe quels systèmes avec le degré de précision voulu. Ces méthodes nécessitent au préalable, un entraînement dans la pratique. En effet, la diversité des méthodes est telle qu'il est important, pour résoudre correctement et dans les meilleures conditions un problème donné, d'être en mesure de choisir efficacement la méthode ou des méthodes mieux appropriées à ce type de problèmes. Grâce au code Wien2k, on peut calculer la structure de bandes des matériaux en utilisant différentes approximations pour déterminer leurs propriétés optiques, structurales et électroniques

Chapitre III :

Discussion des résultats



III.1. Introduction

Au cours de ce chapitre, nous allons analyser et interpréter les résultats obtenus par les calculs des propriétés structurales, électroniques, optiques des binaires zinc blende GaAs, InAs, GaN et InN. Cependant, l'étude de ces caractéristiques passent par une bonne compréhension des propriétés fondamentales de ces matériaux.

III.2. Définition d'un alliage

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

Un alliage est un matériau qui offre la possibilité de moduler l'amplitude du gap et d'autres paramètres physiques afin de mieux optimiser et étendre le domaine d'application, notamment en micro-électronique et optoélectroniques.

Dans notre travail on s'intéresse à l'alliage binaire qui est la combinaison de deux éléments A et B [9].

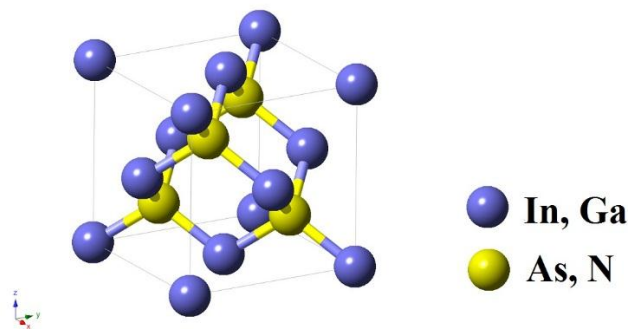


Figure III. 1: structure cristalline de GaAs, InAs, GaN et InN.

III.3. Le détail du calcul

Les calculs ont été réalisés par la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec potentiel complet (FP-LAPW) implémentée dans le code wien2k, dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en traitant l'énergie d'échange et de corrélation par l'approximation de la densité locale (LDA).

Dans la méthode FP-LAPW, la cellule unitaire est divisée en deux régions, une région composée de sphères qui ne se chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome (*Muffin-tin* sphères) de rayon R_{MT} , et une région interstitielle (la région qui reste). La valeur du rayon Muffin-tin R_{MT} a été fixée à 2, 2.05, 2.2, 1.74 *a.u* pour Ga, As, In et N, respectivement.

Les fonctions de base, les densités électroniques, et les potentiels sont étendus en combinaison d'harmoniques sphériques à l'intérieure des sphères MT , et en série de Fourier dans la région interstitielle avec rayon de coupure $R_{MT}K_{max} = 9$ où $R_{MT} = 2$ est le plus petit rayon de la sphère MT , $K_{max} = 1000$ est la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes des fonctions propres.

III.3.1. Propriétés structurales

La première étape importante dans un calcul ab-initio est la détermination des propriétés structurales d'un matériau à étudier. La connaissance de ces informations nous permet d'accéder par la suite à d'autres propriétés électroniques et optiques.

pour déterminer les propriétés structurales telles que le paramètre de maille a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' , on a complété le fichier structure, ensuite on a calculé l'énergie totale E_{tot} pour différentes valeurs du volume de la maille primitive, en utilisant l'équation de Murnaghan:

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

Le module de compressibilité B_0 est déterminé par l'équation :

$$B_0 = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2}$$

Où

V_0 : le volume d'équilibre statique de la maille primitive.

E_0 : l'énergie totale par maille primitive de l'état d'équilibre.

B_0 : le module de compressibilité à l'équilibre.

On a obtenu les résultats suivants

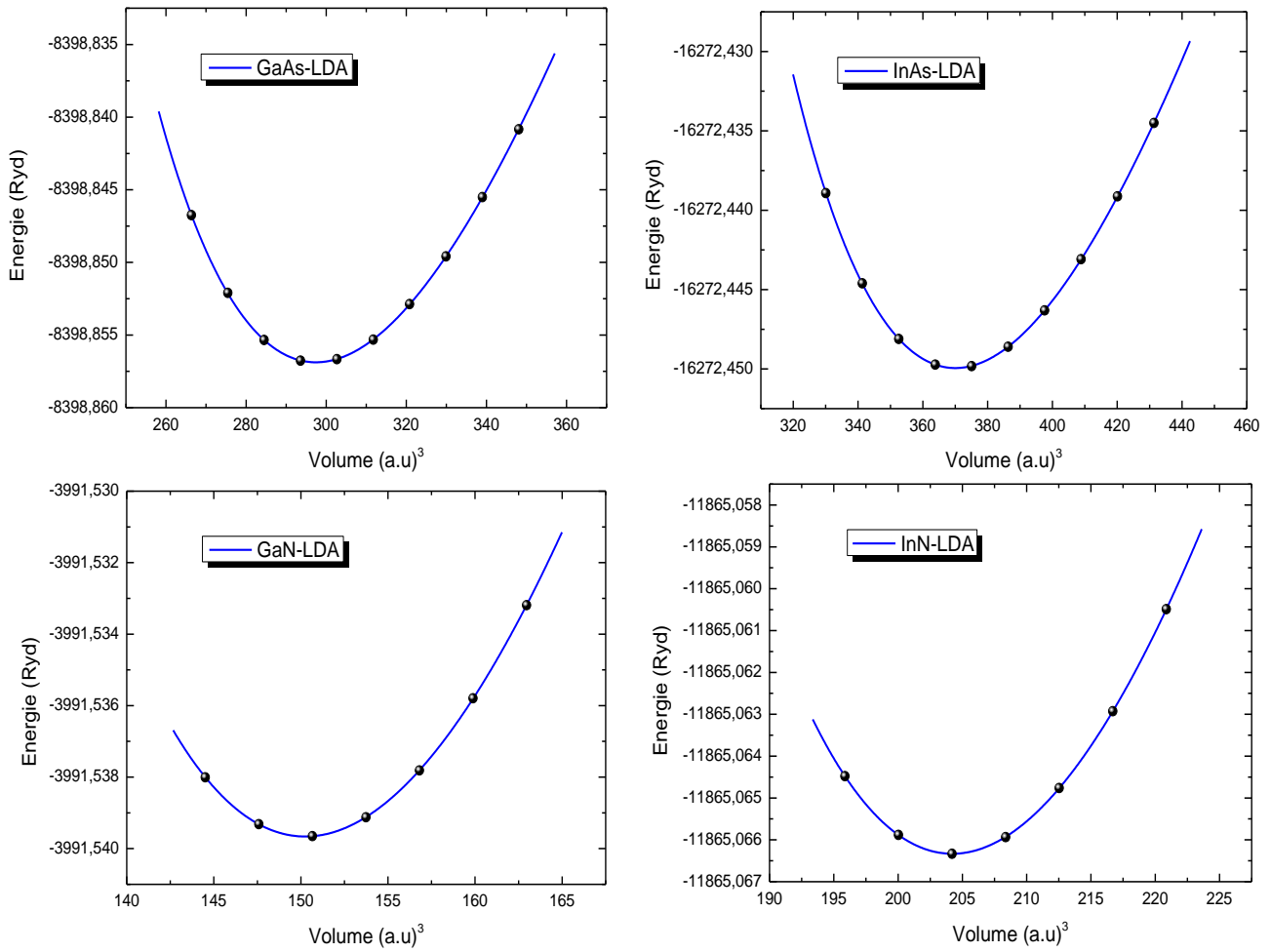


Figure III. 2 Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les quatre composés Binaires GaAs, InAs, GaN et InN.

Les résultats obtenus pour les grandeurs à l'équilibre telles que le paramètre de réseau et le module de compressibilité sont rassemblés dans le tableau III.1. Nous avons ainsi inclus dans le tableau les résultats expérimentaux et les résultats théoriques obtenus par d'autres méthodes théoriques pour faciliter la comparaison avec nos résultats.

Composants	Méthode de calcul	a(A°)	$\Delta a\%$	B(GPa)	B'
GaAs					
Travail présent	FP-LDA	5.607	-0.58	73.639	4.866
Expérimental		5.64 [26]		77.00 [26]	
Les autres travaux théoriques		5.607[27]		74.043[27]	4.879[27]
		5.665[27]		69.674[27]	4.343[27]
GaN					
Travail présent	FP-LDA	4.5	0	206.485	4.781
Expérimental		4.50[29]		190 [30]	
Les autres travaux théoriques		4.465[27]		206.521[27]	4.879[27]
		4.508[27]		193.214[27]	4.343[27]
InAs					
Travail présent	FP-LDA	6.03	0	59.75	4.885
Expérimental		6.036 [28]		58.00 [28]	4.79 [28]
Les autres travaux théoriques		6.026[27]		59.838[27]	4.511[27]
		6.091[27]		55.120[27]	4.734[27]
InN					
Travail présent	FP-LDA	4.98	0	146.981	4.799
Expérimental		4.98 [32]		137 [30]	
les autre trav		4.946[27]		183.3[31]	4.890[27]
		4.995[27]			4.733[27]

Tableau III. 1: Le paramètre de maille a, l'erreur relative Δa , le module de compressibilité B et sa première dérivée B' pour les quatre composés binaires comparés à d'autres résultats.

En comparant nos résultats des paramètres de maille calculés par l'approximation (LDA) avec les valeurs expérimentales, on constate que ce paramètre a_0 est inférieur à ces dernières d'environ 0.58% pour le GaAs et pour les trois composés (GaN, InAs, InN) l'erreur est zéro. Nos valeurs calculées du module de compression B pour nos composés binaires sont plus proches comparées aux résultats expérimentaux par rapport aux autres calculs théoriques. On observe que le module de compressibilité diminue en allant de GaAs vers InAs. Par comparaison aux deux autres binaires à base de nitrure (GaN et InN), une augmentation de la valeur de B est remarquée.

III.3.2. Propriétés électroniques

L'étude des propriétés électroniques des matériaux permet la classification de tous les cristaux (semi-conducteur ou isolant).

III.3.2.1. Structure de bande

A partir de la structure de bande des semi-conducteurs GaAs, InAs, GaN et InN on détermine leurs propriétés électroniques et leurs énergies de gap.

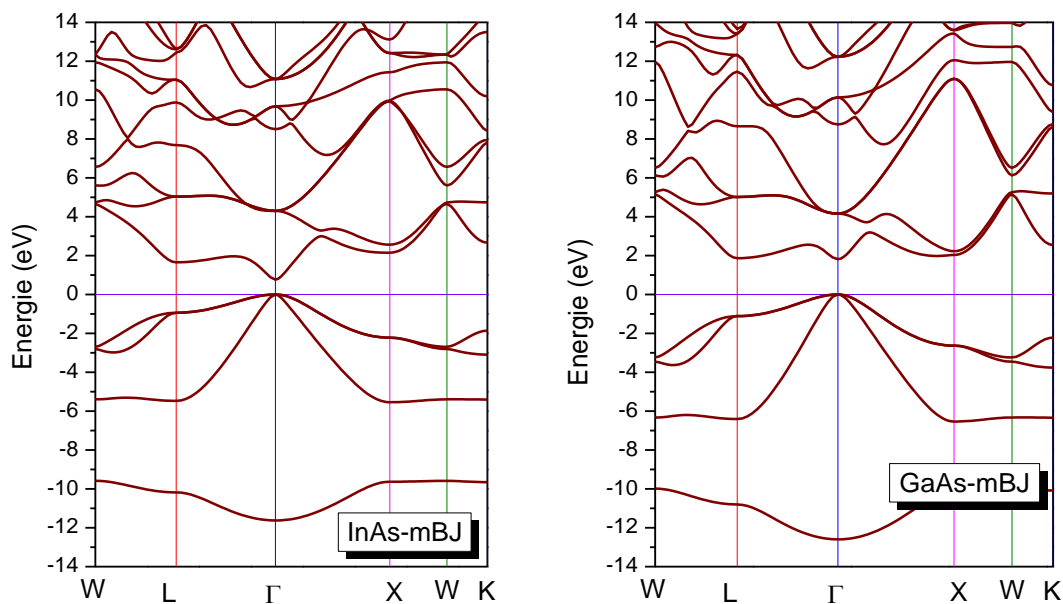


Figure III. 3: structure de bande des composés GaAs et InAs obtenus par l'approximation TB-mBJ

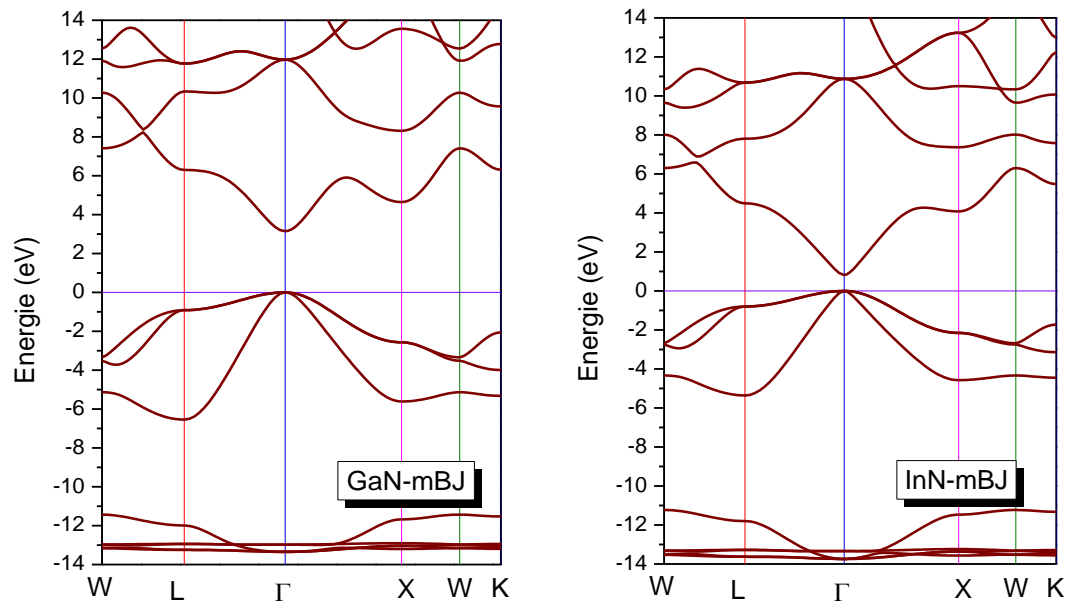


Figure III. 4: structure de bande des composés GaN et InN obtenus par l'approximation TB-mBJ

Les résultats de calculs par l'approximation TB-mBJ, pour les quatre composés binaires a été réalisé suivant des lignes de haute symétrie de la première zone de Brillouin. Le calcul a été effectué en utilisant le paramètre de réseau calculé dans la partie précédente. La structure de bande obtenue est illustrée dans les figures III.2 et III.3. de ces figures nous voyons que tous nos composés ont un gap d'énergie direct ; dire que, le maximum de la bande de valence (VB_{max}) et le minimum de bande de conduction (CB_{min}) se trouvent au même point Γ .

Les valeurs calculées des gaps d'énergies sont présentées dans le tableau III.2

	Méthode de calcul	E_g (eV)
GaAs		
Travail présent	LDA	0.466
	EV-GGA	1.218
	mBJ	1.816
Expérimental		1.43 [33]
Les autres travaux théoriques		1.560[27]
		1.64[33]
GaN		
Travail présent	LDA	1.916
	EV-GGA	2.489
	mBJ	3.146
Expérimental		3.20 [33]
Les autres travaux théoriques		2.933[27]
		2.81 [27]
InAs		
Travail présent	LDA	0
	EV-GGA	0.4
	mBJ	0.762
Expérimental		0.420 [34]
Les autres travaux théoriques	LDA	0.00[27]
	GGA	0.00[27]
	GGA-EV	0.224[27]
InN		
Travail présent	LDA	0
	EV-GGA	0.214
	mBJ	0.815
Expérimental		0.7 [35]

Tableau III. 2: L'énergie de gap (E_g) pour le GaAs, GaN, InAs et InN calculé par les trois types d'approximations.

Nos valeurs calculées avec la EV-GGA sont présentées dans le tableau III.2. Le gap d'énergie a été amélioré et évalué à 1.218, 2.489, 0.4 et 0.214 eV pour le GaAs, GaN, InAs et InN, respectivement. Les résultats de la EV-GGA sont en accord raisonnable avec d'autres calculs théoriques. De meilleures valeurs des gaps d'énergies avec l'approximation TB-mBJ par rapport à celles de la LDA et la EV-GGA sont constatées. Les propriétés des gaps d'énergies dans les semi-conducteurs contrôlent souvent l'applicabilité de ces matériaux dans des applications pratiques.

III.1.1. Propriétés optiques

Pour obtenir une meilleure compréhension des propriétés optiques dans nos semi-conducteurs, il est important de calculer les expressions des deux constantes optiques de base, la partie réelle et imaginaire de la fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{III.3})$$

Pour déduire la partie réelle $\varepsilon_1(\omega)$, on utilise la transformation de Kramers-Kronig :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{III.4})$$

La partie imaginaire est donnée par :

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4e^2\pi^2}{m^2\omega^2} \times \sum \int \frac{2dk}{(2\pi)^3} |\langle \varphi_{fk} | e \cdot p | \varphi_{ik} \rangle|^2 \times \delta(E_v(\omega) - E_c(\omega) - h\omega) \quad (\text{III.5})$$

Où

e est la charge d'électron, m sa masse, p la valeur principale de l'intégrale de Cauchy, ω le volume du cristal et E_v, E_c sont respectivement les énergies, φ_{fk} est la fonction de distribution de Fermi, φ_{ik} est la fonction d'onde de l'électron, correspondant à la même valeur propre de k .

Le calcul des variations spectrales de la fonction diélectrique de la partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ pour les composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN sont représentés sur la figure III.5.

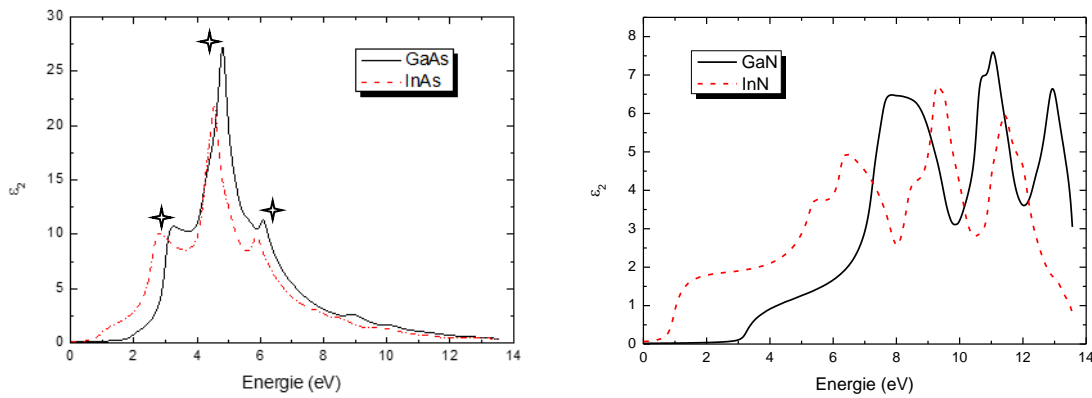


Figure III. 5: la variation spectrale de la partie imaginaire de la fonction diélectrique pour GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mBJ

Figure III.5 : la variation spectrale de la partie imaginaire de la fonction diélectrique pour GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mBJ

Après avoir analysé le spectre de la fonction diélectrique imaginaire $\epsilon_2(\omega)$, on remarque que les deux binaires à base d'arséniure, GaAs et InAs sont caractérisés par trois pics dans l'intervalle d'énergie entre le seuil d'absorption et 8 eV. Ces pics se produisent à 3.14, 4.88 et 6.20 eV pour le GaAs ; dans le cas du composé InAs, les trois pics étant à 2.81, 4.71 et 6.08 eV par un calcul TB-mBJ.

Dans le cas des composés à base de nitrure, GaN et InN, on observe que le spectre optique de la partie $\epsilon_2(\omega)$ de la fonction diélectrique contient trois petits groupes de pics au lieu de trois pics majeurs. Le premier petit groupe de pics est présenté dans l'intervalle d'énergie de seuil à 10 eV. Ce dernier contient deux pics majeurs à 7.80 et 8.66 eV.

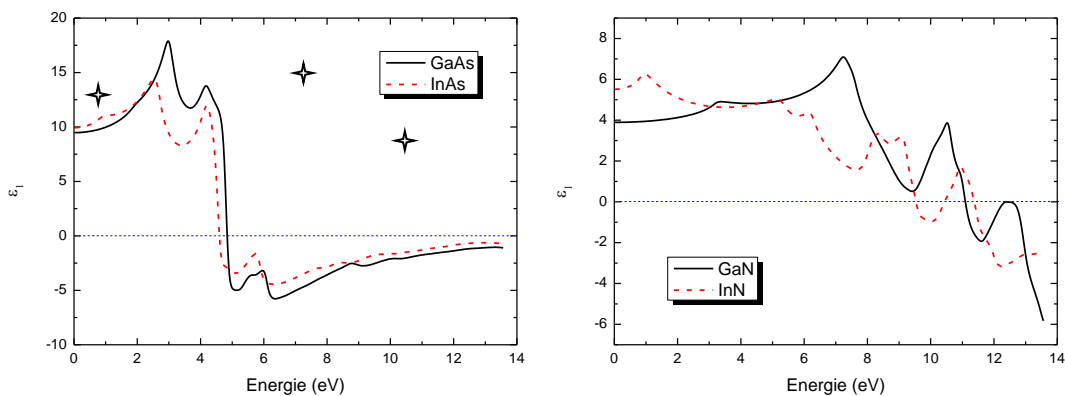


Figure III. 6: la variation spectrale de la partie réelle de la fonction diélectrique pour GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mBJ.

les pics observés de la figure III.6 correspondent aux transitions électroniques (passage des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction). La valeur limite de la partie réelle de la fonction diélectrique complexe à une fréquence d'irradiation proche de zéro est appelée la constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)(\omega=0)$. La valeur calculée de la constante statique est 9.49 pour le GaAs par l'approximation TB-mBJ, et 9.94 pour l'InAs. Pour les binaires à base de nitrure, nous notons une valeur 3.89 pour le GaN, et 5.5 pour l'InN illustrées dans le tableau III.3.

Une fois qu'on a déterminé la fonction diélectrique, on peut calculer à la suite d'autres grandeurs optiques qui sont : le coefficient d'absorption, l'indice de réfraction, la réflectivité et la conductivité.

III.3.2.2. Coefficient d'absorption :

Le coefficient d'absorption est donné par :

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega} \left[\sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} - \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (\text{III.6})$$

A partir du spectre d'absorption représenté sur la figure (III.7)

On constate une absence d'absorption pour les deux binaires GaAs et InAs de 0 à 2 eV. A partir de 2 jusqu'à 10 eV, l'absorption augmente et atteint sa valeur maximale dans la région ultraviolet (UV) ; le pic le plus élevé apparaît à 4.93 eV et 4.77 pour le GaAs et InAs, respectivement, puis il diminue considérablement jusqu'à 14 eV.

On observe une absence d'absorption de 0 à 2.6 et 0.69 eV pour les composés binaires à base de nitrure GaN et InN respectivement. au-dessus de ces dernières valeurs, la lumière est fortement absorbée jusqu'à avoir le maximum d'absorption de 340 et $225 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ pour GaN et InN, respectivement.

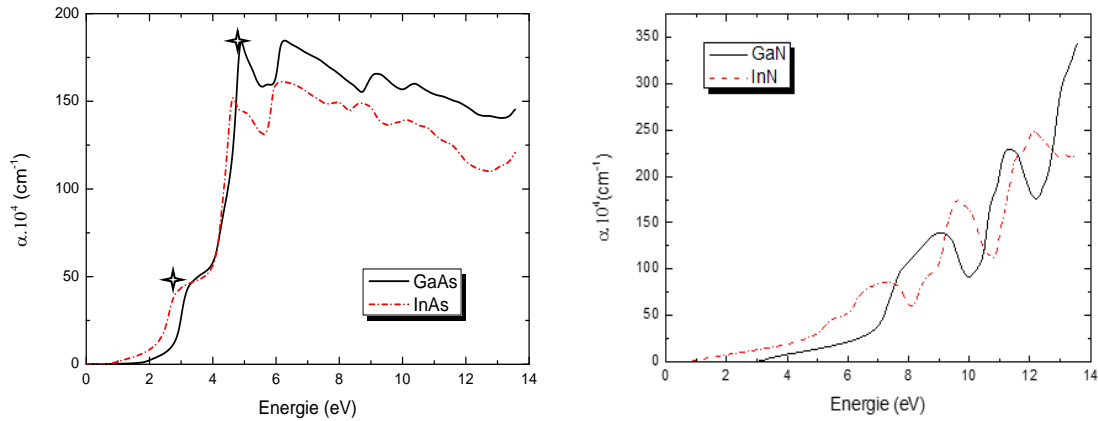


Figure III. 7: la variation spectrale du coefficient d'absorption pour les composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mBJ

III.3.2.3. Indice de réfraction

L'indice de réfraction d'un support est un nombre sans dimension qui décrit comment la lumière se propage.

Il est donné par :

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{(\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2)^{1/2} + \varepsilon_1(\omega)}{2}} \quad (\text{III.7})$$

L'analyse du spectre de l'indice de réfraction représenté dans la figure III.8 montre que :

Entre 0 et 5 eV, cet indice atteint une valeur maximale à 2.9 et 2.4 eV pour GaAs et InAs, respectivement.

Et pour les composés binaires à base de nitrure GaN et InN, leurs pics correspondent aux valeurs 7.2 et 1 eV, respectivement

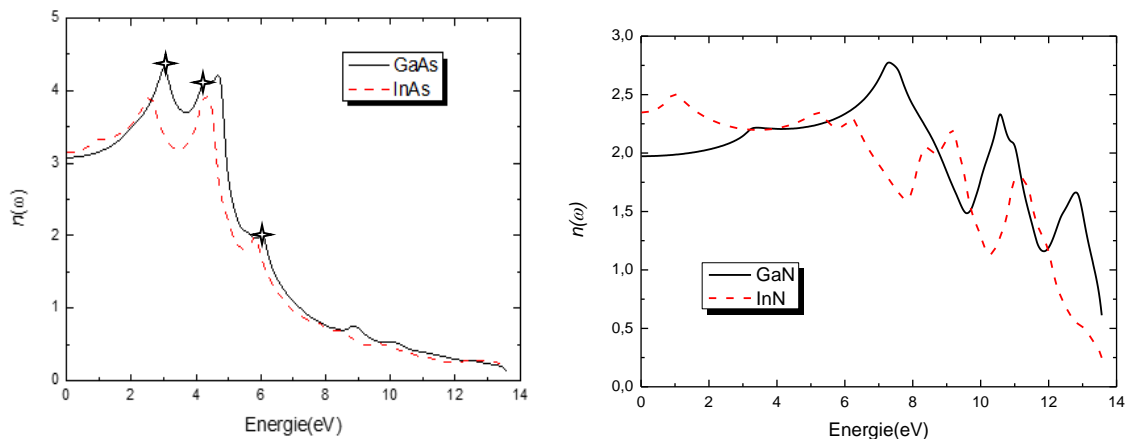


Figure III. 8: la variation de l'indice de réfraction n en fonction de l'énergie pour les composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN.

La limite de l'indice de réfraction ($\omega = 0$) est dite la valeur statique $n(0)$. Les valeurs correspondant à cet indice pour GaAs, InAs, GaN et InN sont 3.08, 3.15, 1.974 et 2.346, respectivement, représentées sur le tableau (III.3).

III.3.2.4. La réflectivité

La figure III.9 illustre la variation du spectre de réflectivité des quatre composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN en fonction de l'énergie photonique. En commençant par une valeur de 0.26 et 0.27 pour GaAs et InAs, respectivement.

On note que la réflectivité maximale de GaAs et InAs se produit à 13.4 eV, correspondent à la région ultraviolette.

Tout comme les binaires à base d'arséniure, la réflectivité pour les deux autres composés, le GaN et InN atteint son maximum à 13.2 eV.

On observe que la réflectivité augmente avec l'augmentation de l'incidence normale de la lumière (ω) sur le matériau.

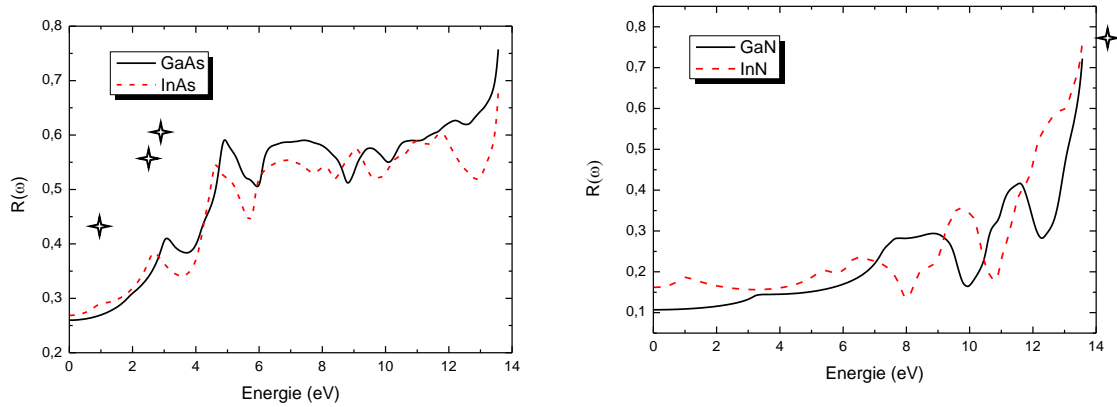


Figure III. 9: la variation spectrale de la réflectivité pour GaAs, InAs, GaN et InN calculées par TB- mBJ.

Une autre grandeur liée à la réflectivité pour décrire le milieu est la valeur statique. La limite de la réflectivité lorsque le photon énergie égale à zéro ($\omega = 0$) correspond à une valeur appelée valeur statique, le calcul de cette dernière pour les quatre composés binaire est dans le tableau III.3.

III.3.2.5. La conductivité

La conductivité est donnée par l'équation :

$$\delta(\omega) = \sqrt{\frac{(\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2)^{1/2} - \epsilon_1(\omega)}{2}} \tag{III.8}$$

L'analyse de spectre de la conductivité représenté dans la figure III.10 montre que :

Pour les composés binaires à base d'arséniure, on remarque la présence de trois pics majeurs où le maximum correspond à 5 et 4.6 eV pour GaAs et InAs, respectivement.

Ainsi que pour les composés binaires à base de nitrure, on observe aussi trois pics majeurs où le maximum correspond à 13 et 11.2 eV pour GaN et InN, respectivement.

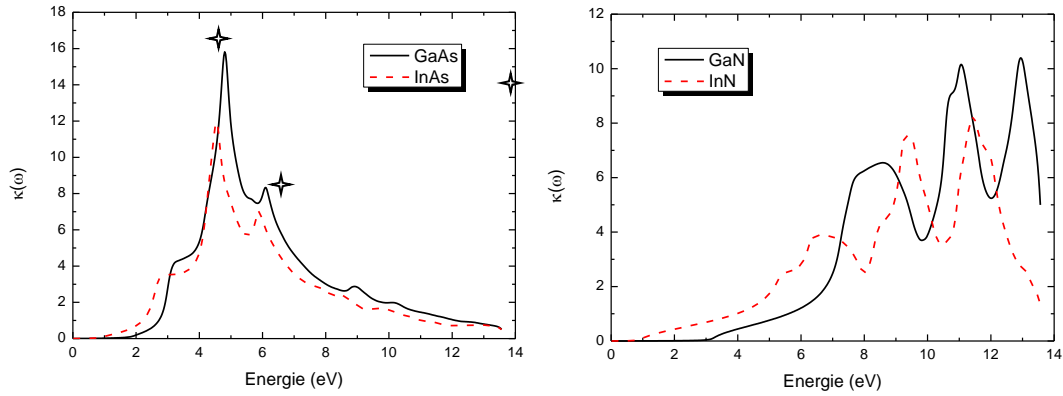


Figure III. 10: la variation spectrale de la conductivité pour les composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN calculées par la TB-mB

Composants	$\epsilon_1(0)$	R(0)	n(0)
GaAs			
Travail présent(mBJ)	9.49	0.259	3.08
Les autres travaux théoriques	14.254[36] 10.645[36] 9.732[36]	0.337[36] 0.281[36] 0.26 [36]	3.775[36] 3.262[36] 3.119[36]
GaN			
Travail présent	3.89	0.107	1.974
Les autres travaux théoriques	4.8[27]	0.13[27]	
InAs			
Travail présent	9.94	0.268	3.15
Les autres travaux théoriques	16.244[36] 11.624[36] 10.227[36]	0.363[36] 0.298[36] 0.265[27]	4.031[36] 3.409[36] 3.198[36]
InN			
Travail présent	5.5	0.162	2.346
les autres travaux théoriques	5.72 [27]	0.15[27]	

Tableau III. 3: Fonction diélectrique statique $\epsilon_1(0)$, la réflectivité statique R(0) et l'indice de réfraction statique n(0) pour les composés GaAs, InAs, GaN, InN calculées par la TB-mBJ.

A partir de ces propriétés on déduit que les matériaux étudiés, absorbent et réfléchissent dans la région ultraviolette, cette dernière leur a permis de devenir des candidats dans le domaine d'optoélectronique, ainsi que dans la fabrication des diodes lasers.

III.4. Conclusion

Notre objectif dans ce travail est de calculer les propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires GaAs, InAs, GaN et InN à l'état fondamental. La méthode des ondes planes linéairement augmentées avec potentiel complet (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), s'est avérée efficace pour les calculs des propriétés structurales et électroniques.

Nos résultats concernant les propriétés structurales sont en bon accord par rapport aux valeurs expérimentales, le calcul de la structure de bande, a donné un gap direct au point Γ .

Pour les propriétés optiques, nous avons calculé la fonction diélectrique afin d'identifier les transitions optiques, ce qui a permis de déterminer d'autres grandeurs (coefficient d'absorption, indice de réfraction et la réflectivité). On a remarqué que nos matériaux présentent un fort coefficient d'absorption, ainsi une forte réflectivité. Ceci dit, ces matériaux sont prédisposés à la fabrication d'émetteurs optiques.

Conclusion générale

Le principal objectif de ce travail était l'étude des propriétés structurales, optiques et électroniques des alliages binaire GaAs, InAs, GaN et InN. Le calcul a été réalisé par le logiciel de simulation Wien2k.

Les propriétés physiques des matériaux jouent habituellement un rôle important dans la sélection d'un matériau pour une application bien particulière. L'intérêt essentiel, réside sur la connaissance élémentaire de ces propriétés fondamentales et comment ces dernières peuvent être modifiées par de nombreux facteurs. Jusqu'à ce jour, le matériaux GaAs a été le plus important composé semi-conducteur, qui présente un certain nombre de propriétés clés qui lui permettent ainsi qu'à ses alliages de les trouver dans divers applications électroniques et optoélectroniques.

Afin de rappeler certaines propriétés intéressantes de ce matériau, et d'autres binaires tels que GaN, InN, et InAs, nous avons effectué un calcul du premier principe en se basant sur la méthode d'ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) implémentée dans le code de calcul WIEN2K.

Les calculs faits sur nos composés binaires nous ont permis d'analyser dans un premier temps les propriétés structurales obtenus en employant un type d'approximation (LDA), et de les comparer avec d'autres résultats publiés ultérieurement.

Après l'optimisation structurales, nous avons décrit les résultats associés aux propriétés électroniques. Dans cette partie d'étude, on a utilisé l'approximation TB-mBJ. Le calcul de la structure électronique de nos matériaux Semi-conducteurs à l'aide de cette approche, peut s'avérer être un moyen prédictif pour une bonne estimation du gap d'énergie. Les meilleurs résultats furent donnés par la TB-mBJ. Le GaN et InN, en tant que représentants de la famille de semi-conducteurs III-V, ont attirés ainsi une attention particulière après le GaAs et le Si. Notre étude sur ces binaires à base de nitrure a été effectuée et un bon accord avec d'autres travaux a été prouvé.

Les propriétés optiques sont indispensables pour déterminer l'utilité et l'applicabilité de cette classe de matériaux dans les dispositifs optoélectroniques. Le calcul de ces propriétés se traduit par l'étude de la fonction diélectrique, l'indice de réfraction, coefficient d'extinction, coefficient d'absorption et la réflectivité, concernant le domaine de télécommunication ces

différents binaires peuvent être utilisés pour concevoir un émetteur optique .Pour cela nous proposons de réaliser des dopages qui vont nous permettent de faire des alliages avec des énergies de gaps correspondantes au gammes visible et infra-rouge exploitées par les télécommunications.

Références bibliographiques

- [1] Dr. AH. Souici, Groupe de Cristallographie et Simulation des Matériaux Laboratoire de physico-chimie des Matériaux et catalyse, Faculté des Sciences Exactes Université de Bejaia, Algérie, 2013.
- [2] FLOYD. Thomas L. composants et systèmes d'application. 5^{ème} édition. REYNALD. GOULET, Mars 2004, 953p.
- [3] A.E, Meriem. Intérêt de la diffraction par les neutrons dans l'étude des biomatériaux dentaires exemple : la bidentine. Université des techniques de Montpellier 2015.
- [4] EL JOUHARI. Pr.N. Cours Cristallographie I, faculté des sciences, département de chimie, université Mohammed V-AGDAL.
- [5] OULADDIAF. Selma. Intérêt de la diffraction par les neutrons dans l'étude des Biomatériaux dentaires Caractérisation structurale de la dentine et d'un ciment silicate tricalcique, la Biodentine, (2012).
- [6] HECHT. Electricité et magnétisme Ed. De boek th. Floyd, Electronique, Composants et systèmes d'application, Ed. Goulet.
- [7] CHOVEL. Alain et MASSON. Pascal, cours de Physique des semi-conducteurs, Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille.
- [8] SASSI. M.Z. Caractérisation de couches épaisses de semi-conducteurs WO_3 et WO_3/TiO_2 pour la réalisation de capteurs à NO_2 , Institut national des sciences appliquées de Lyon, 2002.
- [9] Mr. LOUAZANI. Ahmed. Etudes des propriétés structurales, élastiques et électroniques, des semi-conducteurs III-V GaAs, InP, Université Dr. Tahar Moulay de Saida Faculté des Sciences, Département de Physique 2014-2015.
- [10] Marius Grundman: Graduate texts in physics. The physique of semiconductor. An Introduction Including Nanophysics. second edition. Springer.
- [11] BOURAGBA. Tarik Propriétés optiques de puits quantiques GaInAsN/GaAs. Physique des Hautes Energies. Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II, 2006.
- [12] Mme BAGHDADLI .Nawel. Etude des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs III-V à base de Gallium, Université Abou-Bakr Belkaid –Tlemcen, Département de Physique 2010.

- [13] MATHIEU. Henry. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques 5 édition. Dunod ,1 juillet 2004,827p.
- [14] ZIMMERMANN. J, 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, 1980.
- [15] COTTENIER.S. Density Functional Theory and the Family of (L) APW-methods: a step-by step introduction, 6 aout 2004.
- [16] HOHENBERG.P and KOHN.W. Inhomogeneous electron gas. Phys. Rev., 136(3B): B8. B864, Nov 1964.
- [17] KOHN.W and SHAM.L.J. approximation methods, Phys.Rev. 140.A1133. Published 15 Novembre 1965 Received 21 June 1965.
- [18] ATKINS. Peter, Ronald Friedman, Molecular quantum mechanics, 4th edition, OXFORD university press, 2005.
- [19] SCHAWARZ.K and BLAHA.P: Lecture notes in Chemistry 67, 139(1996).
- [20] PERDE.J. P, in electronic structure of solids 91, edited by ZEISCHE.P and ESHRIG.H, p11, Academic Verlag, Berlin, 1991.
- [21] ENGEL.E and VOSKO.S.H. the virial relation as microscopic criteria for generalized gradient approximations. Phys. Rev. B 47, 13164. Published 15 May 1993.
- [22] TRAN. Fabien, BLAHA. Peter and SHWARZ. Karlheinz, Band gap calculations with Beck-Johnson exchange potential, J. Phys: Condens. Matter 19, 196208, 2007.
- [23] BOUDRIFA. Ouassila. Etudes des propriétés physiques des hydrures A_2RuH_6 (A=Mg, Ca, Sr, Ba) par des méthodes ab initio. Université Ferhat Abbas–SETIF. Département de physique 2017.
- [24] BLAHA.P, SCHWARZ.K and AUGUSTYN.R, Computer Code WIEN93, Technical University.
- [25] ZAOUI. Ali. Etude de premier- principes de la structure électronique des carbures et nitrures des métaux de transition et leurs alliages ternaire : TiC_xN_{1-x} , $Zr_xNb_{1-x}C$ & HfC_xN_{1-x} . Université Djilali Liabes de Sidi-Bel-Abbès , Mars 2005.

- [26] HELLWEGE.K.H, MADELUNG.O, Landolt-Bornstein, Semiconductors Physics of Group IV Elements and III-V Alloys, New Series, Group III, 1982.
- [27] ZINANE Mohammed Issam , BENSAAAD Zouaoui , LABDELLI Boutaleb, BENNACER Hamza , Sensors & Transducers, Vol. 27, Special Issue, May 2014, 374-384
- [28] STEINL.G, RIECHERT.H, YUEGROV.A, Electronics Letters 34(2) (2001) 93–95.
- [29] LEI.T, MOUSTAKAS.T. D, GRAHAM.R. J, He.Y, BERKOWITZ.S. J, Epitaxial growth and characterization of zinc-blende gallium nitride on (001) silicon, J. Appl. Phys. Vol. 71, 1992, pp. 4933-4943.
- [30] SERRANO.J, RUBIO.A, HERNANDEZ.E, MUNOZA.A, A. MUJICA.A, Theoretical study of the relative stability of structural phases in group-III nitrides at high pressures, Phys. Rev, Vol. B 62, 2000, pp. 16612.
- [31] ASLAN. M, YALCIN.B. G, M. Ustundag, Structural and electronic properties of Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y quaternary semiconductor alloy on GaAs substrate, Journal of Alloys and Compounds, Vol. 519, 2012, pp. 55-59.
- [32] VOGEL. D, KRUGER.P, POLLMANN.J, Structural and electronic properties of group-III nitrides, Phys. Rev. Vol. B 55, 1997, pp. 12836-12839.
- [33] TRAN.F, BLAHA.P, Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semi local Exchange-Correlation Potential, Rev Phys. Lett., Vol. 102, 2009, pp. 226401.
- [34] VURGAFTMAN.I, MEYER.J.R, and RAM-MOHAN.L.R, Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys, APPL.J. Phys, Vol. 89, 2001, pp. 5815.
- [35] AHMED.R, AKBARZADEH.H, F. E-ALEEM.F, a first principle study of band structure of III-nitride compounds, Physica B, Vol. 370, 2005, pp. 52-60.
- [36] HADJAB Moufdi , BERRAH Smail, ABID Hamza , ZIANE Mohamed Issam , BENNACER Hamza , YALCIN Battal Gazi, Optik, 127 (2016) 9280-9294.

Résumé

L'électronique et plus particulièrement l'optoélectronique est présente dans de multiples domaines et prend une place de plus en plus importante surtout dans les systèmes de télécommunications par fibres optiques et de conversion d'énergie. Le développement rapide de l'optoélectronique n'aurait pas eu lieu sans une excellente connaissance des matériaux utilisés. L'étude des matériaux semi-conducteurs occupe donc une place particulière depuis quelques années et représente toujours l'étape essentielle dans la conception de n'importe quel dispositif optoélectronique.

Le but du présent travail est de contribuer à l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques des matériaux GaAs, GaN, InAs et InN par le biais de la méthode d'ondes planes augmentée linéarisée (FP-LAPW) implémentée dans le code de calcul WIEN2K basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

L'étude de ces propriétés montre que les matériaux GaAs, GaN, InAs et InN sont distingués par leurs gap direct, par conséquent ces types de semi-conducteurs interviennent dans presque tous les dispositifs électroniques et optiques.

Mots clefs

Semi-conducteur III-V, FP-LAPW, DFT, Wien2k et optoélectronique.

Abstract

Electronics and more specifically optoelectronics are present in multiple domains and take an increasingly important place especially in fibre optic telecommunications and energy conversion systems. The rapid development of optoelectronics would not have occurred without an excellent knowledge of the materials used. The study of semiconductor materials has therefore been a special place for some years and always represents the essential step in the design of any optoelectronic device.

The purpose of this work is to contribute to the study of the structural, electronic and optical properties of GaAs, GaN, InAs and InN materials through the linearized augmented planar wave (FP-LAPW) method implemented in the calculation code WIEN2K based on the theory of functional density (DFT).

The study of these properties shows that the materials GaAs, GaN, InAs and InN are distinguished by their direct gap, therefore these types of semiconductors intervene in almost all electronic and optical devices.

Keywords

III-V semiconductor, FP-LAPW, DFT, Wien2k and optoelectronics.

