

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Ibn Khaldoun - Tiaret



Faculté des Sciences de la Matière
Département de Physique

Mémoire
Présenté par

M^{elle} MEKADIM Souhila

*Pour obtenir le diplôme de
Master*

*Filière Physique
Spécialité : Physique des matériaux
Thème :*

L'effet de l'insertion de l'atome de Bore sur les propriétés électroniques des deux binaires InAs et InN par simulation numérique

Soutenu le : 20-09 -2021

Devant le jury :

Mr. ABDICHE
Mr. HADJI
Mr. GUEMOU

Ahmed
Kouider
M'hammed

Président
Examineur
Encadrant

ANNEE UNIVERSITAIRE: 2020/2021

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail :

*A ma mère qui m'a entouré d'amour,
A mon père qui m'a aidé à devenir ce que je suis
aujourd'hui
que dieu le garde et le protège.
A Mes frères (Karim, Aziz et Ahmed)*

*A mes amies proches (Rahmouna, Fatima et Sarah).et
tous mes amies de master physique.
A toute la famille Mekadim et l a familles Salem et
toute
personne m'ayant aidé de près ou de loin, qu'il trouve
ici
l'expression de reconnaissance.*

Remerciements

J'aimerais tout d'abord remercier, énormément notre Grand Dieu, qui m'a donné la patience et la santé.

*Au terme de notre mémoire, je tiens particulièrement à remercier mon encadreur Monsieur le Docteur **GUEMOU M'hamed**, pour le soutien, l'aide et les conseils précieux qu'il m'a apportés tout au long de ce travail, je lui exprime toute ma gratitude.*

*Il m'est aussi très agréable de remercier Monsieur **ABDICHE Ahmed**, Professeur à l'université de Tiaret, qui m'a fait l'honneur de présider le jury de mémoire.*

*Mes remerciements les plus élogieux à Monsieur **HADJI Kouider**, professeur à l'université de Tiaret, qui a bien voulu accepter de faire partie du jury et d'examiner mon travail.*

Je remercie également tous mes amis avec qui j'ai divisé tant de moments de la vie, contente et difficile, et qui m'ont aidé à croiser certains essais au cours de cette période.

Liste des matières :

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

Chapitre I :

Généralités sur les semi-conducteur III-V

I.1 Définition et propriétés générales des semi-conducteurs	3
I.2 Définition et propriétés générales du Bore, Indium, Azote et l'Arsenic	5
I.2.1 Définition et propriétés générales du bore	5
I.2.2 Définition et propriétés générales d'indium.....	6
I.2.3 Définition et propriétés générales d'azote	7
I.2.4 Définition et propriétés générales d'arsenic	7
I.3 Semi-conducteurs III-V	8
I.3.1 Les propriétés structurales	9
I.3.1.1 Structure cristalline des semi-conducteurs III-V	9
I.3.1.2 Réseau réciproque	10
I.3.2 Les propriétés électroniques	12
I.3.2.1 Notion de bandes d'énergie	12
I.3.2.2 Gap direct et gap indirect.....	12
I.4 Classification des alliages des semi-conducteurs III-V.....	13
I.4.1 Les composés binaires.....	13
I.4.2 Les composés ternaires	15
I.5 Les propriétés des matériaux binaires InN et InAs	16
I.5.1 Les propriétés des matériaux binaires InN	16

I.5.2 Les propriétés des matériaux binaires InAs	16
I.5 Les applications des semi-conducteurs III-V.....	17
I.6 Conclusion	18
Références bibliographiques	19

Chapitre II :

Méthode de calcul : La théorie de la fonctionnelle de la densité

II.1 Introduction	22
II.2 Equation de Schrödinger à un électron – Hamiltonien exact du cristal.....	22
II.3 Approximation Born-Oppenheimer (1927).....	23
II.4 Approximation de Hartree-Fock	24
II.5 Théorie de la fonctionnelle de la densité	25
II.6 Le théorème et équation de Hohenberg-Kohn	25
II.7 Equation de Kohn-Sham	26
II.8 Différents types de fonctionnelles	27
II.8.1 Approximation de la densité locale (LDA)	28
II.8.2 Approximation du gradient généralisé (GGA)	28
II.9 Résolution des équations de Kohn-Sham	29
II.10 Les méthodes de calculs	31
II.10.1 La méthode des ondes plane augmentées linearisees (FP-LAPW)	31
II.11 Le code de calcul Wien2k.....	32
II.12 Conclusion.....	35

Références bibliographiques.....	36
----------------------------------	----

Chapitre III :

Résultats et discussions

III.1 Introduction.....	39
III.2 Détails de calcul.....	39
III.3 Propriétés structurales.....	41
III.3.1 les alliages binaires BN, BIn, InN et InAs.....	41
III.3.2 les alliages ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$	43
III.4 Propriétés électroniques.....	49
III.4.1 Structure de bande.....	49
III.4.1.1 Les alliages binaires BN, BIn, InN et InAs.	49
III.4.1.2 Les alliages ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$	51
III.5 Conclusion	56
Références bibliographiques.	57

Liste des figures et les tableaux :

Figure I.1: Diagramme énergétique des semi-conducteurs, (a) intrinsèque, (b) type-n et (c) type-p	3
Figure I.2: La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux.....	4
Figure I.3 : Représentation des bandes d'énergie.....	5
Figure I.4 : représente le bore solide	6
Figure I.5 : représente l'élément de bore.....	6
Figure I.6 : représente l'indium solide	6
Figure I.7 : représente l'élément d'indium.....	6
Figure I.8 : représente l'azote liquide	7
Figure I.9 : représente l'élément d'azote	7
Figure I.10 : représente l'arsenic solide	8
Figure I.11 : représente l'élément d'arsenic	8
Figure I.12 : Représente le tableau de périodique de Mendeleïev.....	8
Figure I.13: Structure cubique du zinc blende ZnS (B3).....	10
Figure I.14: Réseau cristallin dans la structure zinc blende et leur projections selon différents axes.....	10
Figure I.15 : Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende.....	11
Figure. I.16: Structure de bandes d'énergie des matériaux ; (a) Isolants, (b) Semi-conducteurs et (c) Conducteur.....	12
Figure I.17 : Structure de bande d'énergie du : (A) gap indirect et (B) gap direct.....	13
Figure I.18 : Bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents semi-conducteurs.....	15

Figure I.119 : Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications....	17
Figure II.1 : Mise en œuvre d'algorithmique de l'approximation de Born-Oppenheimer	24
Figure II.2 :(a) Système réel formé de plusieurs électrons en interaction réciproque, (b) Système fictif de fermions indépendants de même énergie et de même densité électronique que le système réel.....	26
Figure II.3 : Schéma représentatif de l'approximation LDA en 2D. La distribution de la densité électronique réelle (à gauche) est approximée en 4 éléments locaux de densité électronique uniforme (à droite).....	28
Figure II.4 : Schéma de l'auto-cohérence dans les calculs DFT.....	30
Figure II.5 : Potentiel cristallin d'un réseau carré à deux dimensions : (a) Potentiel total, (b) potentiel muffin-tin.....	32
Figure II.6 : Schéma de la répartition de la maille élémentaire en sphères atomiques et en région interstitielle.....	31
Figure II.7 : La structure du Programme Wien2k	34
Figure III.1 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés binaires.....	42
Figure III.2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés ternaires.....	44
Figure III.3 : La variation du paramètre de maille (a) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}As$	46
Figure III.4 : La variation du module de compressibilité(B) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}As$	46
Figure III.5 : La variation du paramètre de maille (a) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}N$	47
Figure III.6 : La variation du module de compressibilité(B) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}N$	47
Figure III.7 : Structure de bandes des alliages binaires InN, BN, InAs et BAs.....	50
Figure III.8 : Structure de bandes des alliages ternaires.....	52

Figure III.9 : La variation des énergies de bandes interdites direct et indirect en fonction de la concentration x et y des alliages ternaires.....	54
Tableau I.1 : Extrait de la classification périodique des éléments.....	9
Tableau I.2 : Propriétés des principaux composés binaires III-V.....	14
Tableau I.3 : Le différent paramètre de structure InN zinc blende.....	16
Tableau I.4 : Le différent paramètre de structure InAs zinc blende.....	17
Tableau III.1 : Les paramètres utilisés dans le calcul pour la structure zinc-blende.....	40
Tableau III.2 : Paramètre du réseau a en (Å), le module de compressibilité B en (GPa) pour les composés binaires BN, BAs, InN et InAs.....	43
Tableau III.3 : Paramètre du réseau a en (Å), le module de compressibilité B en (GPa) pour les composés ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$	45
Tableau III.4 : Paramètres de courbures pour la constante de maille et le module de compressibilité des alliages ternaires.....	48
Tableau III.5 : Les énergies de gap direct et indirect des composés binaires.....	51
Tableau III.6 : Les énergies de gap direct et indirect des composés ternaires.....	53

Introduction générale :

A cause de leurs propriétés et caractéristiques fascinantes, les matériaux semi-conducteurs sont devenus à la base de plusieurs applications couvrant pratiquement tous les domaines, de l'infiniment petit, nanotechnologie jusqu'aux applications militaires et spatiales. Les recherches relatives aux caractéristiques optoélectroniques, mécaniques, thermodynamiques, magnétiques, ...etc. sont réparties en trois grands axes : les études théoriques, la conception et la synthèse expérimentales et les simulations numériques.

La possibilité de concevoir et de fabriquer des composants électroniques à l'aide des alliages semi-conducteurs binaires, ternaires ou quaternaires a également ouvert un éventail important devant les industriels permettant la conception de nouveaux matériaux possédant de nouvelles propriétés.

Dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et à l'aide de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées, implémentée dans le code de calcul Wien2k, nous allons mener notre simulation numérique relative à la prédiction des propriétés structurales et électroniques des deux ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$ pour cinq concentrations ($x= 0, 0.25, 0.5, 0.75$ et 1) dans la structure Zinc Blende. Par conséquent, l'effet de l'insertion du Bore dans les deux binaires InN et InAs est à étudier.

Dans le chapitre 1, nous présenterons quelques généralités sur les caractéristiques des semi-conducteurs III-V, en particulier les deux binaires InN et InAs, le chapitre 2 présentera la méthode de calcul utilisée dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité implémentée dans le code de calcul Wien2K. Au troisième chapitre, nous exposerons et discuterons nos résultats de calcul relatifs aux propriétés structurales et électroniques.

Chapitre I :

Généralités sur les semi-conducteurs

III-V

I.1 Définition et propriétés des semi-conducteurs :

De point de vue conduction électrique, les matériaux solides se divisent en trois catégories, les conducteurs (métaux), les isolants et les semi-conducteurs. La différence entre les métaux, les isolants et les semi-conducteurs réside au niveau de la largeur de leurs bandes-interdites (l'énergie nécessaire qu'il faut donner aux porteurs de charge pour pouvoir arriver à la bande de conduction). Les matériaux, dont les énergies de la bande interdite (E_g) sont comprises entre 0 et 4 eV, sont appelés des semi-conducteurs. [1]

Un semi-conducteur est caractérisé par une bande de valence (BV), une bande de conduction (BC) et une bande-interdite située entre les deux (**Figure I.1**), son niveau de Fermi dépendant principalement du dopage.

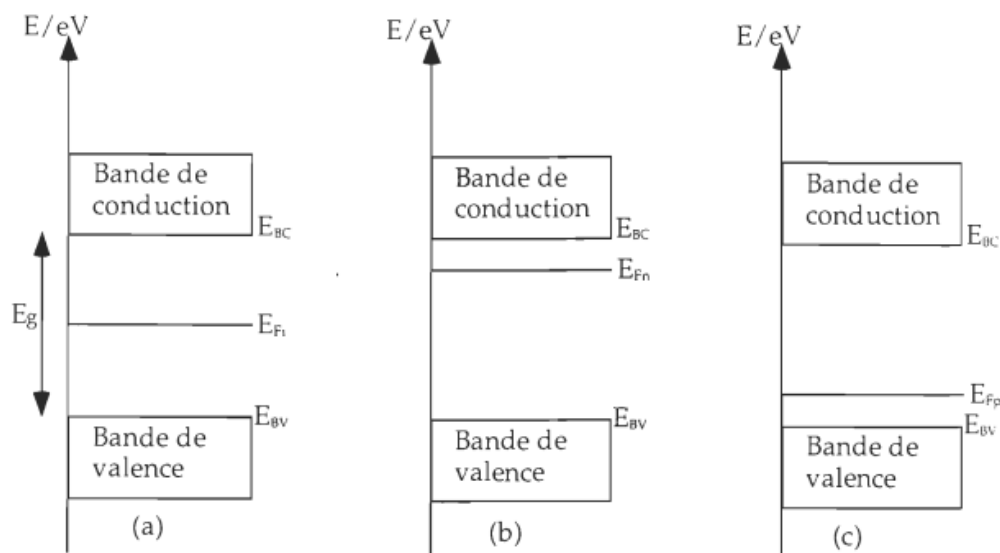


Figure I.1: Diagramme énergétique des semi-conducteurs, (a) intrinsèque, (b) type-n et (c) type-p. [2]

On distingue deux types de semi-conducteurs: les semi-conducteurs intrinsèques et les semi-conducteurs extrinsèques. Dans le cas d'un semi-conducteur intrinsèque, les électrons de la bande de conduction proviennent seulement de l'excitation thermique et optique de ceux de la bande de valence. Il en résulte l'équation suivante : $n = p = n_i$ où n et p représentent, respectivement, les densités des électrons et des trous libres. n_i est la densité des porteurs intrinsèques. [3].

Chapitre I : Généralités sur les semi-conducteurs III-V

Par contre, un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur dopé dans le but de modifier ses propriétés électriques, optiques et structurelles.

L'ajout d'un petit pourcentage d'atomes étrangers dans un réseau cristallin d'un semi-conducteur intrinsèque produit éventuellement des modifications des propriétés électriques, car ces atomes étrangers incorporés dans la structure cristalline du semi-conducteur fournissent des porteurs de charge (électrons ou trous) dans le semi-conducteur.

En général, il existe deux types d'atomes de dopant résultant en deux types de semi-conducteurs extrinsèques qui sont classés comme accepteurs d'électrons ou donneurs et les semi-conducteurs dopés correspondants sont appelés:

- Semi-conducteurs de type n .
- Semi-conducteurs de type p .

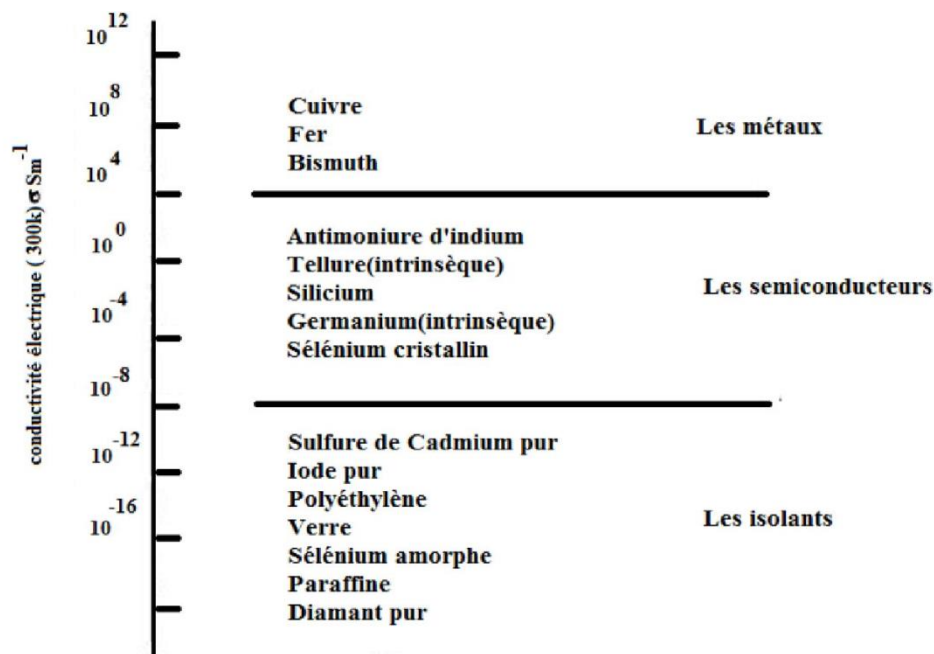


Figure I.2 : La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux. [4]

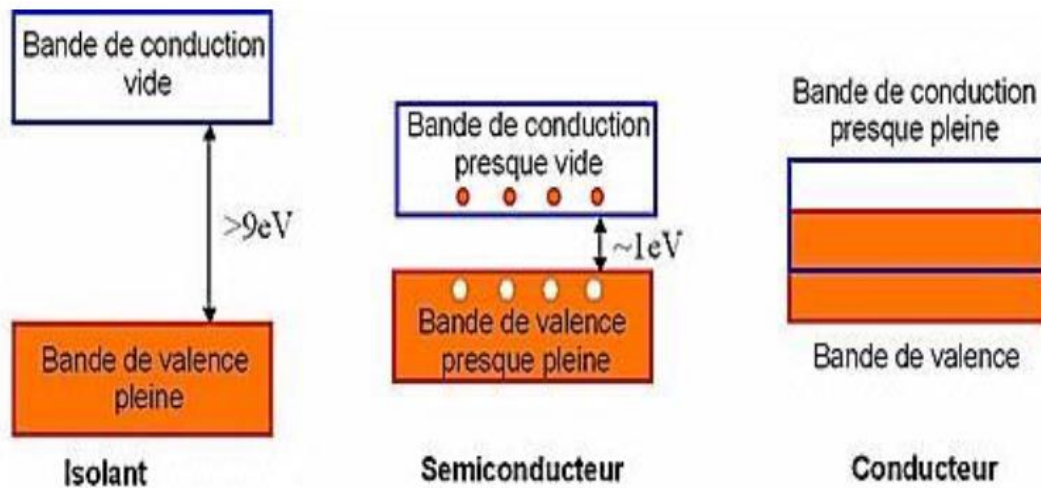


Figure I.3 : Représentation des bandes d'énergie.

Avec l'évolution des techniques et des technologies de croissance concernant la fabrication des alliages semi-conducteurs, la plupart des grands laboratoires de recherches se sont intéressés à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

I.2 Définition et propriétés générales du Bore, Indium, Azote et l'Arсениc :

I.2.1 Définition et propriétés générales du bore:

Le bore, grâce à ses propriétés intéressantes, est utilisé dans diverses applications et plusieurs domaines : chimie, métallurgie et nucléaire [5, 6,7]. Il est aussi combiné avec d'autres éléments et employé sous forme d'alliages [8]. Le bore est un excellent conducteur à haute température

L'oxyde de bore et le carbure de bore sont de plus, des composés de grande dureté [9, 10,11] leur permettant d'être utilisés dans de nombreuses applications : les industries mécaniques, les abrasifs, les outils de coupe.. etc.



Figure I.4 : *le bore solide*



Figure I.5 : *l'élément de bore*

I.2.2 Définition et propriétés générales d'indium:

L'indium a été découvert en 1863 dans des minerais de cuivre par Ferdinand Reich et Hieronimus Theodor Richter. L'indium, isolé en 1867, est un métal gris brillant qui possède un point de fusion assez bas (156,60 °C). Chimiquement proche de l'aluminium et du gallium, il est très rare. L'indium devient supraconducteur en dessous de 3,41 K. Son isotope le plus courant est très légèrement radioactif (période $4,41 \cdot 10^{14}$ années).



Figure I.6 : *l'indium solide*



Figure I.7 : *l'élément d'indium.*

I.2.3 Définition et propriétés générales d'azote:

L'azote est un gaz incolore, inodore et sans saveur qui constitue un peu plus des trois quarts du volume de l'atmosphère.



Figure I.8 : *l'azote liquide*



Figure I.9 : *l'élément d'azote*

I.2.4 Définition et propriétés générales d'arsenic:

L'arsenic se présente généralement sous forme de cristaux gris, brillants, d'aspect métallique. Il existe sous deux autres formes allotropiques : l'arsenic jaune et l'arsenic noir.[13, 14,15]

L'arsenic et ses composés minéraux ont de très nombreuses applications industrielles: Fabrication d'insecticides, de raticides, d'herbicides et de fongicides, industrie des colorants ; métallurgie (pour durcir le cuivre, le plomb, l'or sous forme d'alliage).[12], [13]



Figure I.10 : l'arsenic solide

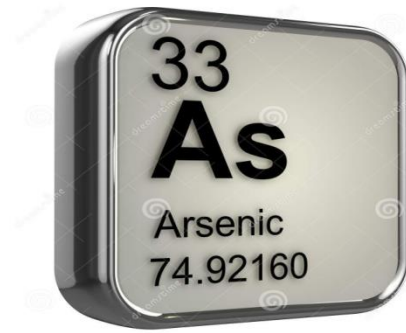


Figure I.11 : l'élément d'arsenic

I.3 Semi-conducteurs III-V :

Les semi-conducteurs de la famille des matériaux III-V sont constitués d'un élément de la colonne III et d'un autre de la colonne V du tableau périodique (Figure I.12).

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	He
1 H Hydrogène 1.008	2 He Hélium 4.0026	5 B Bore 10.811	6 C Carbone 12.011	7 N Azote 14.007	8 O Oxygène 15.999	9 F Fluore 18.998	10 Ne Neon 20.180	2 He Hélium 4.0026
3 Li Lithium 6.941	4 Be Béryllium 9.0122	13 Al Aluminium 26.9815	14 Si Silicium 28.0855	15 P Phosphore 30.9738	16 S Soufre 32.06	17 Cl Chlore 35.453	18 Ar Argon 39.948	10 Ne Neon 20.180
11 Na Sodium 22.9897	12 Mg Magnésium 24.305	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.9216	34 Se Sélénium 78.96	35 Br Brome 79.904	36 Kr Krypton 83.80	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	39 Y Yttrium 88.9058	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdène 95.94	43 Tc Technetium 98	44 Ru Ruthénium 101.07	36 Kr Krypton 83.80
37 Rb Rubidium 85.468	38 Sr Strontium 87.62	55 Cs Césium 132.905	56 Ba Baryum 137.327	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tungstène 180.9479	74 W Wolfram 183.84	75 Re Rhenium 186.207	54 Xe Xénon 131.29
87 Fr Francium 223	88 Ra Radium 226	104 Rf Rutherfordium 261	105 Db Dubnium 262	106 Sg Seaborgium 266	107 Bh Bohrium 264	108 Hs Hassium 277	109 Mt Meitnerium 268	54 Xe Xénon 131.29
57-71 Lanthanides	72-103 Actinides	101 Pm Prométhée 145	102 Sm Samarium 150.36	103 Eu Europium 151.964	104 Gd Gadolinium 157.25	105 Tb Terbium 158.925	106 Dy Dysprosium 162.50	54 Xe Xénon 131.29
89-103 Actinides	104-118 Lanthanides	119 Uu Ununennium 289	120 Uu Unbinilium 288	121 Uu Untrium 288	122 Uu Unquadrum 289	123 Uu Unquadium 290	124 Uu Unpentium 291	54 Xe Xénon 131.29

Figure I.12 : Représente le tableau de périodique de Mendeleïev.

Le tableau I-1 résume un extrait de cette classification (les chiffres en haut et base représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

III	IV	V
$^{5}_{10,81}B$	$^{6}_{12,01}C$	$^{7}_{14,01}N$
$^{13}_{26,98}Al$	$^{14}_{28,09}Si$	$^{15}_{30,97}P$
$^{31}_{69,74}Ga$	$^{32}_{72,59}Ge$	$^{33}_{74,92}As$
$^{49}_{114,82}In$	$^{50}_{118,69}Sn$	$^{51}_{121,75}Sb$

Tableau I-1 : *Extrait de la classification périodique des éléments.* [16]

C'est une classe très importante et très utilisées dans les domaines de l'optoélectronique en raison de leurs propriétés physiques et électroniques telles que la conductivité thermique, l'énergie de la bande interdite,

Les composés à base de bore appartiennent à la famille des semi-conducteurs III-V. Ce sont des composés à grand gap, particulièrement intéressants pour leurs applications dans le domaine des températures élevées.

I.3.1 Les propriétés structurales :

De point de vu cristallographique, les semi-conducteurs III-V sont connus sous plusieurs formes cristallines.

I.3.1.1 Structure cristalline des semi-conducteurs III-V :

Structure cubique du zinc blende (de type ZnS) (**Figure I.13**). Elle est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées (cfc) décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube d'un vecteur $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$, a_0 est le paramètre du réseau, l'un étant formé par les éléments III et l'autre par les éléments V. Chaque atome se trouve au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre élément [17].

Les positions des atomes sont : [18-19].

Zn : $(0, 0, 0)$; $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$; $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$; $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

S : $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$; $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$; $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$; $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$.

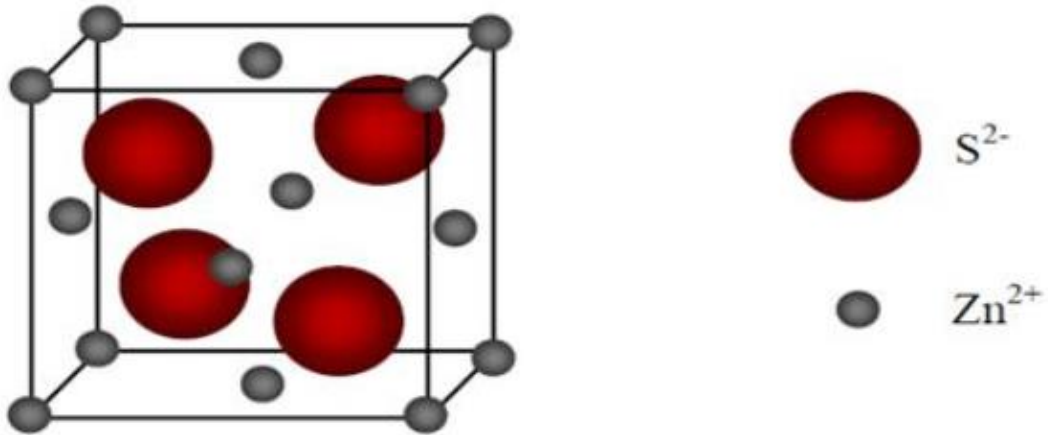


Figure I.13: Structure du zinc blende ZnS (B3).

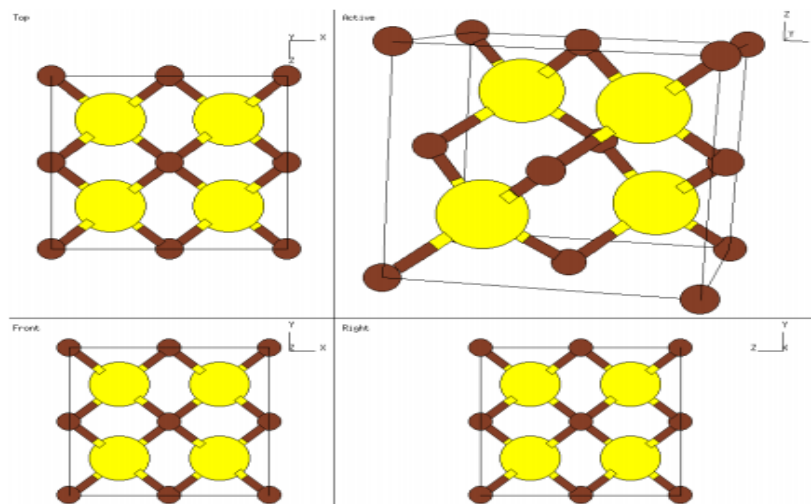


Figure I.14: Réseau cristallin dans la structure zinc blende et leur projections selon différents axes.

I.3.1.2 Réseau réciproque :

Dans le domaine de cristallographie, la notion du réseau réciproque est très utile et très importante, c'est un système de coordonnées (énergie – vecteur d'onde) qui nous permet de représenter les variations de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde k , caractérisant la propagation de l'onde considérée. [20]

Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc blende est cubique centré. Sa maille élémentaire qui correspond à la première zone de Brillouin à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube. [21]

Elle présente un centre de symétrie :

- Les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4 (Δ)
- Les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6 (Λ)
- Les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2 (Σ)

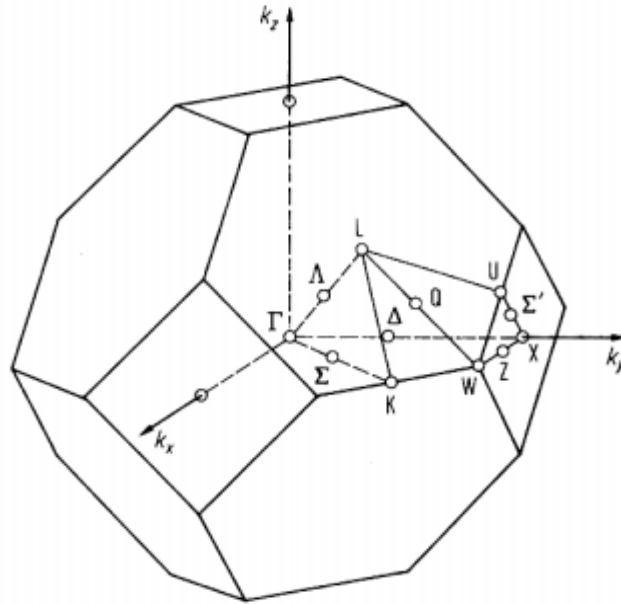


Figure I.15: Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende.

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante:

- Points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.
- Points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.
- Points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

I.3.2 Les propriétés électroniques :

I.3.2.1 Notion de bandes d'énergie :

Un matériau semi-conducteur se caractérise par sa structure de bande [22] :

➤ La bande de valence: c'est la bande qui correspond à la bande d'énergie la plus élevée entièrement remplie d'électrons.

- La bande de conduction: est définie comme le premier niveau énergétique au dessus de la bande de valence où accèdent les électrons excités.
- La bande interdite: cette bande 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 figure I.16 présente la structure de bande d'énergie.

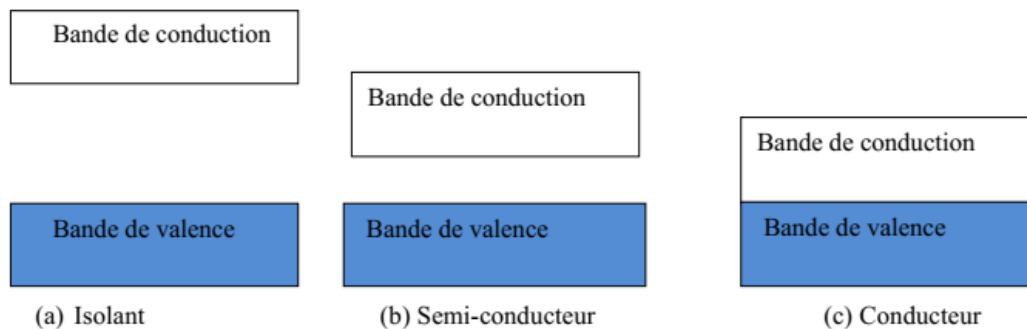


Figure. I.16: Structure de bandes d'énergie des matériaux ; (a) Isolants, (b) Semi-conducteurs et (c) Conducteur. [23].

I.3.2.2 Gap direct et gap indirect :

Par définition le gap est la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence.

Les structures de bandes représentées sur la **figure I.17** font apparaître deux types fondamentaux de semi-conducteur. Les semi-conducteurs dans lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des \vec{k} . Dans ce cas, le semi-conducteur est dit de gap indirect.

Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur du \vec{k} , on dit que le semi-conducteur a un gap direct. [24]

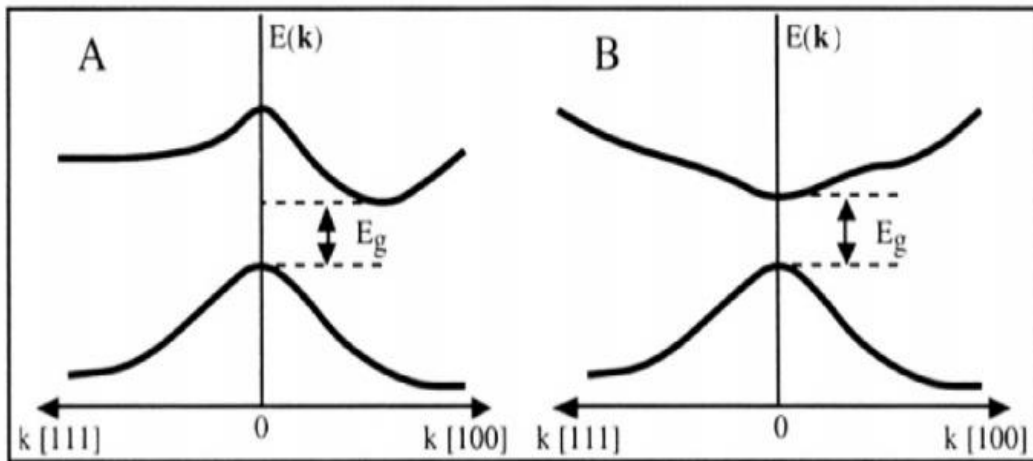


Figure I.17 : Structure de bande d'énergie du : (A) gap indirect et (B) gap direct.[24]

I.4 Classification des alliages semi-conducteurs III-V :

Le développement des techniques modernes de la croissance cristalline et la purification des semi-conducteurs, a permis la réalisation de plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires. L'utilisation de ces alliages dans les domaines de la microélectronique et l'optoélectronique a encouragé les chercheurs à développer le côté théorique et expérimental.

I.4.1 Les composés binaires :

Les semi-conducteurs binaires de la classe (III-V) sont composés d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique par exemple ; les composé a base Aluminium (AlP, AlAs, AlSb), ou les composés base galium (GaN, GaSb), d'indium (InN, InP, InAs, InSb).

Le tableau (I.2) suivant présent le paramètre de maille $a(\text{Å})$, la nature de structure cristalline, l'énergie de gap (ev) et leur nature soient direct ou indirect pour différents matériaux de la famille III-V.

Chapitre I : Généralités sur les semi-conducteurs III-V

Matériel	Le paramètre de maille a (Å)	Structure cristalline	Energie de gap E_g (ev)	Nature du gap
AlN	3.111	W	6.28	Direct
AlP	5.462	Z-B	2.53	Direct
AlAs	5.66	Z-B	2.228	Indirect
AlSb	6.335	Z-B	1.5	Indirect
GaP	5.45	Z-B	2.35	Indirect
GaN	3.189	W	3.44	Direct
GaAs	5.653	Z-B	1.42	Direct
GaSb	6.478	Z-B	0.72	Direct
InN	6.058	W	0.9	Direct
InP	3.615	Z-B	1.35	Direct
InSb	6.478	Z-B	0.180	Direct
InAs	6.058	Z-B	0.330	Direct
BN	3.615	Z-B	7.5	Indirect
Bas	4.777	Z-B	1.25	Indirect
BSb	5.252	Z-B	0.75	Indirect

Tableau I-2 : *Propriétés des principaux composés binaires III-V.* [25]

La figure I.18 reporte les énergies de la bande interdite en fonction du paramètre de maille pour quelques semi-conducteurs.

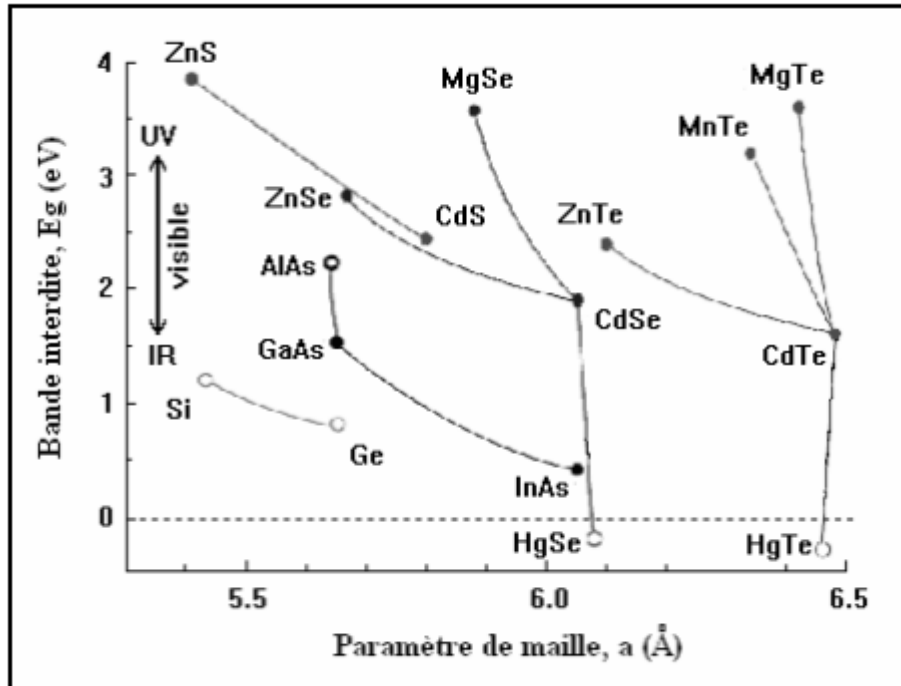


Figure I.18 : Bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents semi-conducteurs. [26]

I.4.2 Les composés ternaires :

Un alliage ternaire est une combinaison de trois éléments, le matériau obtenu ayant des propriétés physique différentes de celles de ses composants. Ces alliages sont caractérisés par la concentration x .

Alliage ternaire anionique : $A^{III}B^V_xC^V_{1-x}$

$$a(x) = x a_{AB} + (1-x) a_{AC} \quad (I.1)$$

Alliage ternaire cationique : $A^{III}_x B^V_{1-x} C^V$

$$a(x) = x a_{AC} + (1-x) a_{AB} \quad (I.2)$$

Avec : a_{AC} : paramètre du réseau du composé binaire AC.

a_{AB} : paramètre du réseau du composé binaire AB.

Son énergie de bande interdite s'exprime selon expression :

$$E_g = x E_g(A) + (1-x) E_g(B) - b x (1-x) \quad (I.3)$$

I.5 Les propriétés des matériaux binaires InN et InAs :

Les semi-conducteur InN et InAs se cristallise dans la phase zinc blende.

I.5.1 Les propriétés des matériaux binaires InN :

Au cours des dernières années InN indium nitrures a attire une attention considérable grâce a ces propriétés très remarquable malgré les problèmes du a l'incorporation de l'indium tel que la grande mobilité des porteurs ce qui rendre les dispositifs a base d'InN très performantes et très rapide.

Le différent paramètre de structure InN (zinc blende) sont regroupées dans le tableau I.3.

Propriétés	InN (zinc blende)
Paramètre de maille (A)	a= 4.98
Eg (ev)	1.91
Masse effectives	$m_e^* = 0.102$

Le tableau I.3 : *Le différent paramètre de structure InN zinc blende.*

I.5.2 Les propriétés des matériaux binaires InAs :

Comme tous les semi-conducteurs composés III-V, le InAs cristallise dans une structure de type zinc-blende. Il est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes d'indium In, l'autre les atomes de l'arsenic As. Le différent paramètre de structure InAs (zinc blende) est regroupées dans le tableau I.4

Propriétés	InAs (zinc blende)
Paramètre de maille (Å)	a= 6.0584
Eg (eV)	0.36
Masse effectives	$m_e^* = 0.023$

Le tableau I.4 : *Le différent paramètre de structure InAs zinc blende.*

I.6 Les applications des semi-conducteurs III-V :

Les applications des semi-conducteurs qui ne cessent d'augmenter de plus en plus dans pratiquement tous les domaines allant du numériques, l'électronique, la téléphonie mobile, ci-après quelques applications :

- la fabrication des détecteurs de rayonnement lumineux et de sources de radiation spontanée ou stimulée, comme indiqué sur la figure ci-dessous. [27]

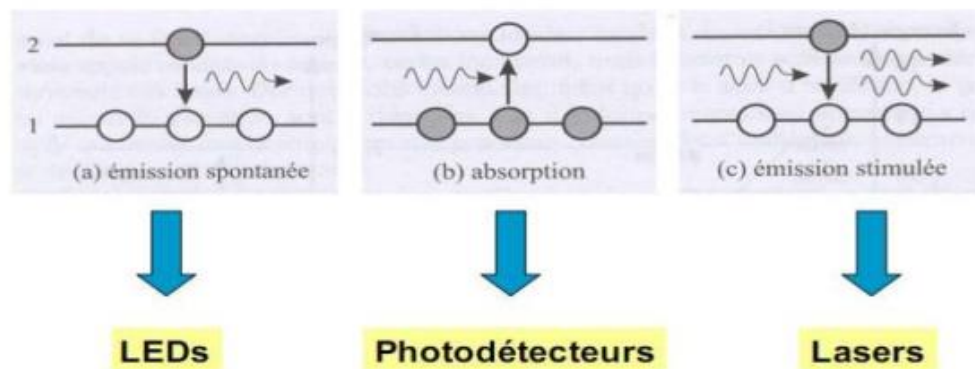


Figure. I.19 : *Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.*

- Les borures (semi-conducteurs à base de Bore) sont des semi-conducteurs à grand gap et ont un intérêt technologique pour des applications à haute température. Ils sont également potentiellement très avantageux pour une utilisation dans un environnement hautement radiatif.
- Le nitrure de bore, BN, est généralement utilisé comme composant dans les équipements destinés à fonctionner à température élevée.

- L'arséniure de bore, BAs, a été proposé pour le développement de cellules photovoltaïques.
- L'arséniure d'indium, InAs, est utilisé dans la fabrication de détecteur infrarouges pour une longueur d'onde comprise entre 1 et 3,8 μm . Il est aussi utilisé pour la fabrication de diodes laser

I.7 Conclusion :

Dans cette première partie consacrée aux généralités des semi-conducteurs, nous avons énoncé les notions fondamentales des matériaux semi-conducteurs, en particulier la classe III-V et leurs alliages. Les propriétés de ses semi-conducteurs et quelques avantages qui font de ces matériaux une alternative incontournables dans les domaines d'optoélectroniques sont aussi présentés.

Références Bibliographiques :

- [1] .Kittel, c.; Introduction to solid state physics, 6ème édition, John Wiley et Sons, New York, 1986.
- [2]. Hagfeldt, A.; Bjorksten U.; Lindquist S.E. Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 1993, 27,293
- [3]. Mathieu, H. *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*, Masson, 1987, 59-76
- [4]. Francis lévy, physique et technologie des semi-conducteurs, Presses polytechnique etunivesitaire romandes CH-1015, Suisse(1995).
- [5]PASTOR H., THEVENOT F., Informations chimie178 <197er 1s1-173
- [6]THEVENOT F., BOUCHACOURT M., l'IndustrieCéramique 732 10 (1979) 655-661
- [7]BEAUVY M., THEVENOT F., Industrie Céramique73 4 12 (1 97 9) 8 1i -8 14
- [8] QUETIER M., note CEA N 2060, novembre 1978
- [9] PASTOR H. Indus céramique 615 (1969) 89-104
- [10] BRODHAG C., THEVENOT F., VIALA J.C., Ann.Chim. Fr. Sei. Mat. 3 (1978) 23-36
- [11] RIZZO B.F., SIMMONS W.C., BIELSTEIN H.O., J. Electrochem. soc. 109 (1962) 1079-1082
- [12] HAGUENOER J.-M., FURON D. – Toxicologie et hygiène industrielles, tome II. Paris, Technique et documentation, 1982, pp. 183-218.
- [13] Encyclopaedia of occupational health and safety, vol. 1. Genève, International Labour Organisation, 1983, pp. 179-183.
- [14] CLAYTON G.D., CLAYTON F.E. – Patty's industrial hygiene and toxicology, 3e éd., vol. 2 A. New York, John Wiley and Sons, 1981, pp. 1517-1528

- [15] BROWNING E. – Toxicity of industrial metals. Londres, Butterworths, 1969, pp. 39-60
- [16] P. Dirac, Proceedings of the Royal Society of London, Series A 123 (1929) 714
- [17] C. Stampfl , C. G. Van de Walle, Density-functional calculations for III-V nitrides using the local-density approximation and the generalized gradient approximation, Phys. Rev B, vol 59, N0 8 .15/02/1999-II
- [18] M. Beaicha, mémoire de Magister, Université de Colonel Hadj Lakhdar, Batna(2007).
- [19] O. Bahi, mémoire de Master Académique, Université Kasdi Merbah, Ouargla(2014).
- [20] C. Kittel, Introduction à la physique de l'état solide, Dunod (1972).
- [21] J. R. Chelikowsky, M. L. Cohen, Phys. Rev. B 14, 556 (1976).
- [22] C. Kittel, physique de l'état solide, édition Dunod ,Paris (1998).
- [23] P. Hohenberg and W. Kohn. "Inhomogeneous Electron Gas». physical Review ,Vol .136,No.3B.pp.B864-B871, (1964)
- [24] J. Pierre Colinge, F. Van de Wiele, physique des dispositifs semiconducteurs ,De Boeck.wesmael , Département De Boeck Université Paris ,Bruxelles (1996).
- [25] B. Dui, D. Lederer, B. Roulet, Eléments de Physique statistique, Hermann France, 1996.
- [26] F. Tinjoux, Thèse de doctorat, université Joseph Fourier, Grenoble I (2003)
- [27] Abdallah Lyoussi, " Détection de rayonnements et instrumentation nucléaire ",EDPSciences, 2010.

Chapitre II :

Méthode de calcul : La théorie de la
fonctionnelle de la densité.

II.1 Introduction:

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est l'une des formules quantiques les plus habituellement employées dans les domaines de la physique du solide et de la chimie quantique pour la détermination des grandeurs physiques et quantiques d'un système (et particulièrement les systèmes contenant un grand nombre d'électrons), telles que sa structure électronique, son énergie d'ionisation ... etc. C'est une méthode dite de premier principe. En effet, elle repose sur les fondements de la mécanique quantique et ne fait intervenir qu'un nombre limité de données d'entrées. Pour un système donné à plusieurs corps, elle permet de résoudre l'équation de Schrödinger sans l'introduction de paramètres ajustés par l'expérience. Dans ce chapitre, nous exposerons les bases sur lesquels repose la DFT, en discutant les différents niveaux d'approximations nécessaires à la résolution de l'équation de Schrödinger. Dans la suite, les approximations utilisées pour le calcul de l'énergie et du potentiel d'échange-corrélation seront présentées [1].

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 [2].

II.2 Equation de Schrödinger à un électron – Hamiltonien exact du cristal :

La résolution de l'équation de Schrödinger nous permet de décrire et d'accéder aux propriétés des électrons dans un cristal ou dans un semi-conducteur, c'est une équation énoncée en 1926 par Erwin Schrödinger [3], elle décrit l'évolution de l'amplitude de probabilité $\psi(r, R)$ d'un système, elle est exprimée par :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{II.1})$$

Où H est l'Hamiltonien du système, r et R étant respectivement les positions des électrons et des noyaux.

L'Hamiltonien exact du cristal (de toutes les particules) résulte de l'existence des forces électrostatiques d'interaction : Répulsive ou attractive suivant la charge des particules (ions, électrons).

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

T_e et T_n sont respectivement l'énergie cinétique des électrons et des noyaux.

V_{ee} et V_{e-n} et V_{nn} sont les énergies d'interaction : électron-électron, électron-noyau et noyau-noyau respectivement.

La résolution de l'équation (II-1) doit impératif passer par des approximations.

II.3 Approximation Born-Oppenheimer (1927):

Nommée de Born-Oppenheimer (1927) ou adiabatique [4], elle est connue comme étant la première approximation proposée pour résoudre le problème de l'équation (II.1), basée sur le fait que les noyaux sont beaucoup plus lourds que les électrons, par conséquent les électrons sont beaucoup plus rapides, qui va permettre la séparation du mouvement des électrons de celui des noyaux de telle sorte qu'à chaque instant les noyaux semblent fixés pour les électrons.

L'équation de Schrödinger à n électrons et à N noyaux peut ainsi être divisée en une partie nucléaire et une partie électronique.

L'énergie cinétique T_n des noyaux est négligée et l'énergie potentielle noyaux-noyaux devient constante [5]. L'Hamiltonien qui en dérive peut ainsi être défini de la manière:

$$H = T_e + V_{ee} + V_{e-n} \quad (\text{II.3})$$

La résolution par **Born-Oppenheimer** peut se traduire par l'organigramme suivant :

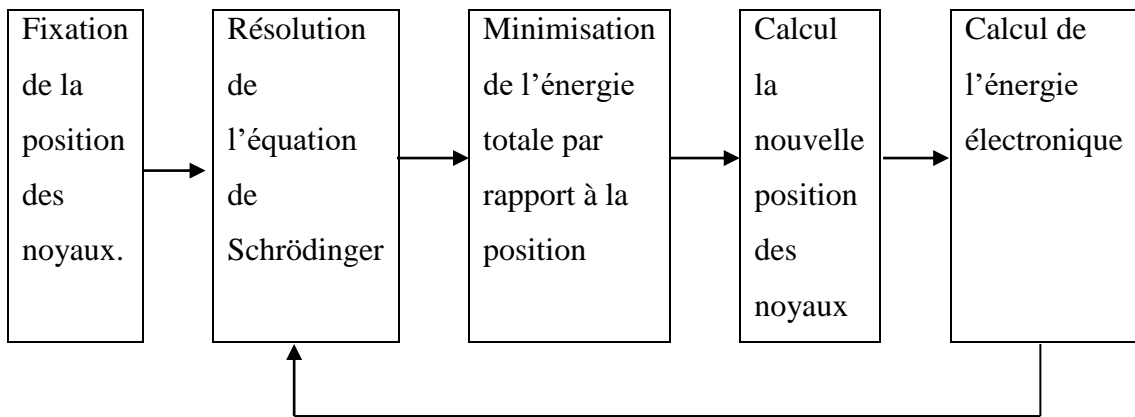


Figure II.1. Mise en œuvre d'algorithmique de l'approximation de Born-Oppenheimer.

II.4 Approximation de Hartree-Fock :

La complication des systèmes à plusieurs électrons dans l'état réel [6], et notamment la présence de termes d'interaction qui couplent le mouvement des électrons entre eux nécessite l'utilisation d'autres approximations, en l'occurrence, L'approximation Hartree-Fock considérée à la base de toute les méthodes ab-initio. Cette dernière considère que les électrons se déplacent dans un champ moyen créé par les autres électrons, isolément les uns des autres.

Ainsi, si on observe deux électrons 1 et 2, la possibilité d'existence de l'électron de coordonnées r_1 dans l'orbitale 1 est indépendante de celle de l'électron de coordonnées r_2 . L'Hamiltonien d'un tel système s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^N h(i) \quad \text{(II.4)}$$

Avec : h est le hamiltonien mono-électronique.

Le produit de **Hartree** désigne la fonction d'onde électronique solution de l'équation de Schrödinger utilisant l'hamiltonien de l'équation II.4, La fonction d'onde électronique est constituée d'un résultat mono-électronique.

Cette approximation est basée sur l'hypothèse d'électrons libres ce qui ne saisit pas en attention les interactions entre les électrons et des états de spin. [7]

En 1930, **Fock** a corrigé ce défaut en ajoutant un terme supplémentaire non local d'échange dans le but de prendre en considération le principe d'antisymétrie, appelé

aussi le principe d'exclusion de Pauli (qui sollicite que deux électrons de même états de spin ne peuvent se trouver dans une même région de l'espace).

La fonction d'onde totale est changée par un déterminant de **Slater** de fonctions mono-électronique et est antisymétrique par rapport à l'échange de deux électrons.[8]

En exprimant la fonction d'onde ψ à l'aide d'un déterminant de **Slater** [9],

$$\Psi^S(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \dots & \phi_K(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \dots & \phi_K(x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(x_N) & \phi_2(x_N) & \dots & \phi_K(x_N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.5})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_i(x_1) & \phi_j(x_1) & \dots & \phi_K(x_1) \\ \phi_i(x_2) & \phi_j(x_2) & \dots & \phi_K(x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_i(x_N) & \phi_j(x_N) & \dots & \phi_K(x_N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.6})$$

Sous la forme développée ce déterminant de **Slater** s'exprime :

$$\Psi^S = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{q=1}^{N!} (-1)^{P_q} P_q \{ \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \dots \phi_K(x_N) \} \quad (\text{II.7})$$

Où : P_q est un opérateur de permutation.

II.5 Théorie de la fonctionnelle de la densité :

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT pour Density Functional Theory) [6, 9, 10, 11] est une méthode de calcul permettant l'étude de la structure électronique et la détermination de l'état fondamental d'un système à N électrons. Elle est très utilisée dans le plusieurs domaines à savoir, la physique de la matière condensée, la chimie quantique,...

La densité électronique $\rho(\mathbf{r})$:

Les électrons dans un système sont indiqués comme des particules inséparables, où chaque particule possède la probabilité de présence dans un élément de volume donné. La densité électronique $\rho(\vec{r})$ est définie comme la probabilité de trouver l'un des N électrons d'un système dans l'élément de volume.

$$\rho(\vec{r}) = N \int \dots \int |\psi(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_N)|^2 d\sigma_1 d\sigma_2 dr_2 \dots dr_N \quad (\text{II.8})$$

II.6 Le théorème et équation de Hohenberg-Kohn :

En 1964, Hohenberg et Kohn [6] ont formulé et démontré deux théorèmes qui ont donné les bases mathématiques pour le développement de la théorie DFT. Cette approche s'applique pour tout système à plusieurs particules en interaction et échangeant dans un potentiel externe.

Théorème 1 : l'énergie d'un système de particules en interaction, dans son état fondamental, est complètement déterminée par sa densité électronique $\rho(\mathbf{r})$. Par conséquent, toutes les propriétés du système peuvent être totalement déterminées si l'on connaît cette densité électronique fondamentale.

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

Théorème 2 : La densité électronique qui minimise la fonctionnelle $E[\rho(\mathbf{r})]$ est la densité électronique exacte de l'état fondamental ρ_0 .

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{II.10})$$

Avec : ρ_0 : la densité de l'état fondamental.

II.7 Equation de Kohn-Sham :

L'approche de **Walter Kohn** et **Lu Sham** en 1965[12] est de remplacer le système de N_e électrons interagissant avec un système fictif de N_e électrons libres de même densité électronique.

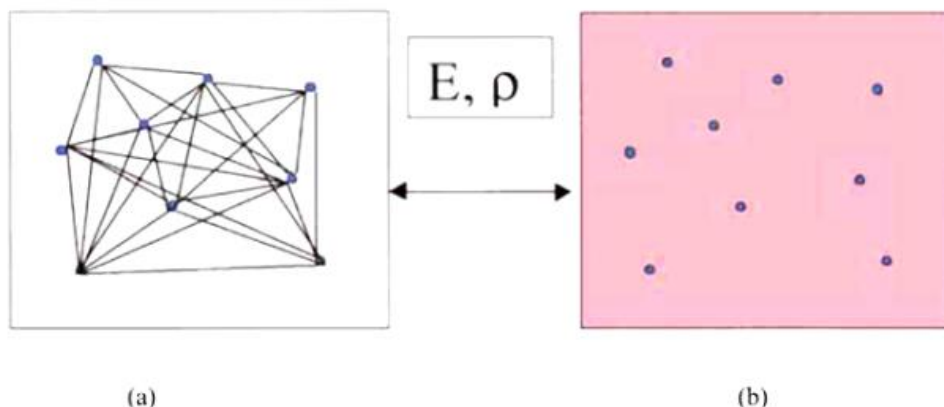


Figure II.2. (a) Système réel formé de plusieurs électrons en interaction réciproque, (b) Système fictif de fermions indépendants de même énergie et de même densité électronique que le système réel. [20]

Pour tenir compte du potentiel d'interaction entre les différentes particules du système réel, ils montrent que ces électrons doivent être immergés dans un potentiel extérieur fictif, les fonctions d'ondes sont résolues à partir d'une équation analogue à l'équation de **Schrödinger** :

$$H \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.11})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_H(\vec{r}) + V_{\text{ion}}(\vec{r}) + V_{\text{xc}}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.12})$$

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

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

$V_{\text{xc}}(\vec{r})$: le potentiel d'échange et corrélation.

$$V_H(\vec{r}) : \text{le terme de } \mathbf{Hartree} \text{ donné par : } V_H(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

Le potentiel d'échange-corrélation est obtenu à partir de :

$$V_{\text{xc}}(\vec{r}) = \frac{\partial E_{\text{xc}}[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho(\vec{r})} \quad (\text{II.13})$$

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

$$H \psi_i(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.14})$$

$$\text{Avec : } V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \int \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \rho(\vec{r}_i) d\vec{r}_j + V_{\text{xc}}(\vec{r}) \quad (\text{II.15})$$

Et $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ c'est l'effet potentiel fictif créé par tous les noyaux et les autres électrons.

Ce n'est pas encore résolu et pour que la DFT et le formalisme de **Kohn-Sham** puissent être appliqués, il est indispensable de passer par d'autres approximations pour le calcul de l'énergie et du potentiel d'échange-corrélation.

II.8 Différents types de fonctionnelles :

Le potentiel d'échange et de corrélation est la principale difficulté de la DFT. Pour l'évaluer, plusieurs approximations sont utilisées, et nous présentons ici les deux fonctionnelles usuellement utilisées durant cette étude: l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).

II.8.1 Approximation de la densité locale (LDA) :

Dans l'approximation de la densité locale (LDA pour local Density approximation), on considère que la densité électronique $\rho(r)$ est localement uniforme en chaque point, d'où la fonctionnelle d'échange-corrélation peut être exprimée sous la forme :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{LDA}\rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (\text{II.16})$$

Où $\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ est l'énergie d'échange-corrélation d'une particule d'un gaz d'électrons homogène.

Pour les systèmes magnétiques, la LDA doit être étendue à l'approximation de la Densité Locale de Spin (LSDA : Local Spin Density Approximation), où l'énergie d'échange et corrélation est une fonctionnelle des deux densités de spin haut et bas:

$$E_{xc}^{LSDA}[\rho \downarrow, \rho \uparrow] = \int \varepsilon_{xc}[\rho_{\downarrow}(r), \rho_{\uparrow}(r)] \rho(r) dr \quad (\text{II.17})$$

Dans la LSDA, l'énergie d'échange et de corrélation est composée de deux termes :

$$\varepsilon_{xc}\rho(r) = \varepsilon_x\rho(r) + \varepsilon_c\rho(r) \quad (\text{II.18})$$

Avec $\varepsilon_x\rho(r)$ l'énergie d'échange et $\varepsilon_c\rho(r)$ l'énergie de corrélation

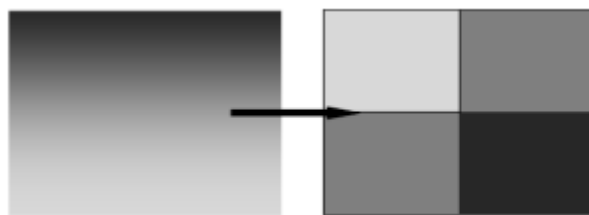


Figure II.3 : Schéma représentatif de l'approximation LDA en 2D. La distribution de la densité électronique réelle (à gauche) est approximée en 4 éléments locaux de densité électronique uniforme (à droite). [13]

II.8.2 Approximation du gradient généralisé (GGA) :

Dans l'objectif d'améliorer les résultats obtenus à l'aide de la LDA, notamment l'énergie de cohésion et les paramètres de maille, l'approximation du gradient

généralisé GGA (Generalized Gradient Approximation) a été aussi utilisée, elle prend en compte l'inhomogénéité de la densité électronique par l'introduction dans l'énergie d'échange-corrélation de termes qui dépendent du gradient de la densité.

L'énergie d'échange-corrélation en GGA s'écrit de la manière suivante [14]:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int f_{xc}(\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|) d\vec{r} \quad (\text{II.19})$$

II.9 Résolution des équations de Kohn-Sham :

Le choix d'une base pour les fonctions d'ondes est nécessaire pour la résolution des équations de **Kohn-Sham** que l'on peut prendre comme une combinaison linéaire d'orbitales, appelées orbitales de **Kohn-Sham** (KS) écrites sous la forme suivante :

$$\Psi_i(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_j C_{ij} \phi_j(\vec{k}, \vec{r}) \quad (\text{II.20})$$

Avec : $\phi_j(\vec{k}, \vec{r})$: Les fonctions de base.

C_{ij} : Les coefficients de développement.

La résolution des équations de KS se fait alors d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent illustré par l'organigramme de la figure II.5

La première étape consiste à introduire la densité de charge initiale ρ_{int} . Pour diagonaliser l'équation séculaire : $(H - \epsilon_i S) C_i = 0$ (II.21)

avec : H est la matrice hamiltonien et S la matrice de recouvrement.

Et puis, la nouvelle densité de charge ρ_{out} est calculée en utilisant la densité de charge totale qui peut être obtenue par une sommation sur toutes les orbitales occupées.

Si les calculs ne correspondent pas, on mélange les deux densités de charge ρ_{in} et ρ_{out} de la manière suivante :

$$\rho_{in}^{i+1} = (1-\alpha)\rho_{in}^i + \alpha\rho_{out}^i \quad (\text{II.22})$$

Où : i représente la i^{ieme} itération et α un paramètre de mixage. Ainsi la procédure itérative peut être continuée jusqu'à ce que la convergence soit réalisée.

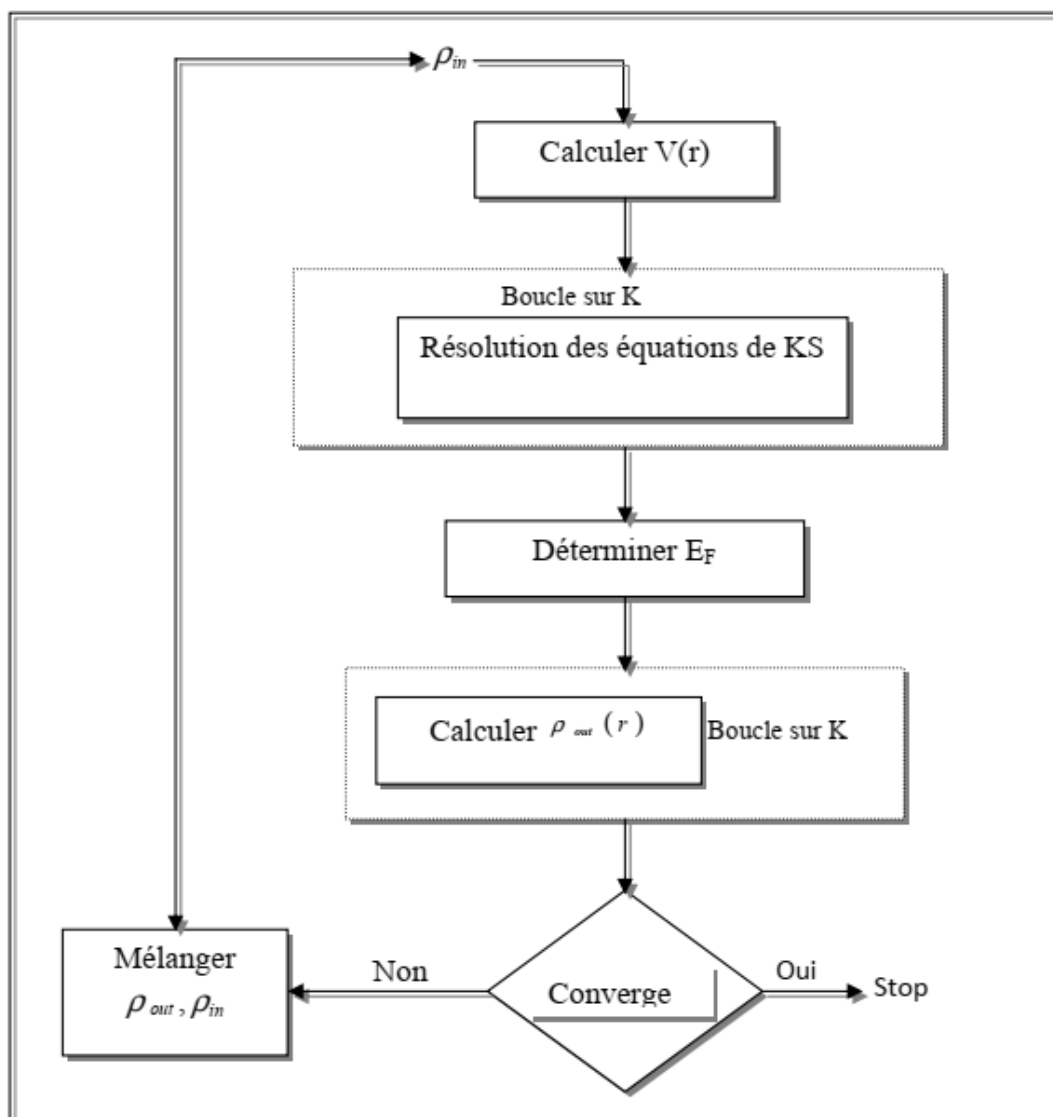


Figure II.4: Schéma de l'auto-cohérence dans les calculs DFT.

II.10 Les méthodes de calculs :

La résolution de l'équation de Kohn-Sham conduisant à la détermination de la densité électronique $\rho(r)$ et donnera aussi l'énergie totale du matériau considéré. Au cours des dernières années, les chercheurs ont développé des méthodes appelées du premier principe ou méthodes **ab-initio**, permettant d'étudier la distribution des électrons considérés à la base des propriétés des matériaux.

Les méthodes ab-initio sont classées, selon le choix des fonctions d'onde décrivant le comportement des électrons de cœur et de valence, en deux groupes :

- 1- Les Méthodes linéarisées.
- 2- Pseudo potentiels.

II.10.1 La méthode des ondes plane augmentées linearisées (FP-LAPW) :

La méthode des ondes planes augmentées linearisées (LAPW : Linearized Augmented Plane Wave), développée par **Andersen [15]**, est une amélioration de la méthode dite des ondes planes augmentées (APW : Augmented Plane Wave) élaborée par **Slater [16,17]**. Dans cette méthode, l'espace de la matière est divisé en deux régions : une région sphérique proche du noyau des atomes dite sphère MT « muffin-tin » [18] et une région interstitielle (voir la figure (II.6)).

Dans la méthode LAPW, on doit avoir la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT. Le potentiel atomique s'écrit sous la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & \text{à l'intérieur de la sphère} \\ \sum_k V_k(r) e^{ikr} & \text{à l'extérieur de la sphère} \end{cases} \quad (\text{II.23})$$

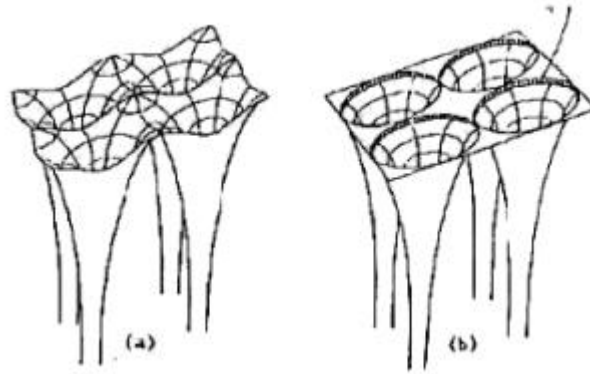


Figure. II.5: *Potentiel cristallin d'un réseau carré à deux dimensions : (a) Potentiel total, (b) potentiel muffin-tin.*

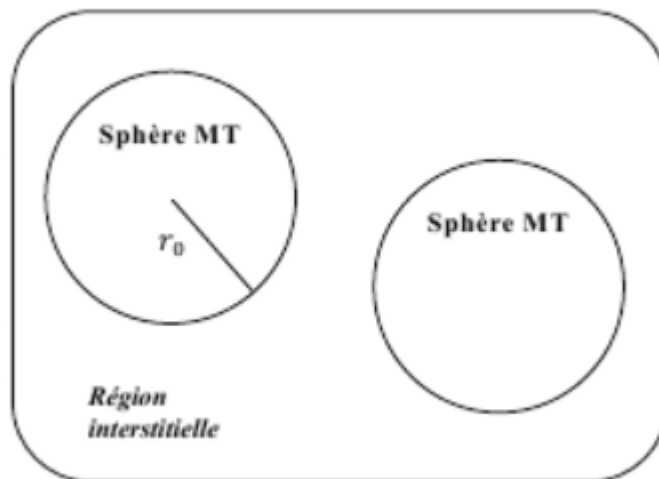


Figure II.6 : *Schéma de la répartition de la maille élémentaire en sphères atomiques et en région interstitielle.*

II.11 Le code de calcul Wien2k :

Le code de calcul Wien2k conçu par Blaha et ses collaborateurs [19] utilisé dans plusieurs domaines de recherches et par rapport aux résultats très encourageant utilisant ce code, il est qualifié comme moyen très efficace.

Le code Wien2k est composé de plusieurs programmes indépendants liés par le CSHELL SCRIPT. Le rôle des différents programmes est montré sur la figure II.8.

Les principaux programmes nécessaires pour faire le calcul auto-cohérent sont :

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

LSTART : Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, 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.

KGEN : 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

.Donc 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 : Calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2 : Calcul les densités de valence.

LCORE : Calcul les états du cœur et les densités.

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

Les différents processus de calcul sont illustrés sur le diagramme de la FIG...

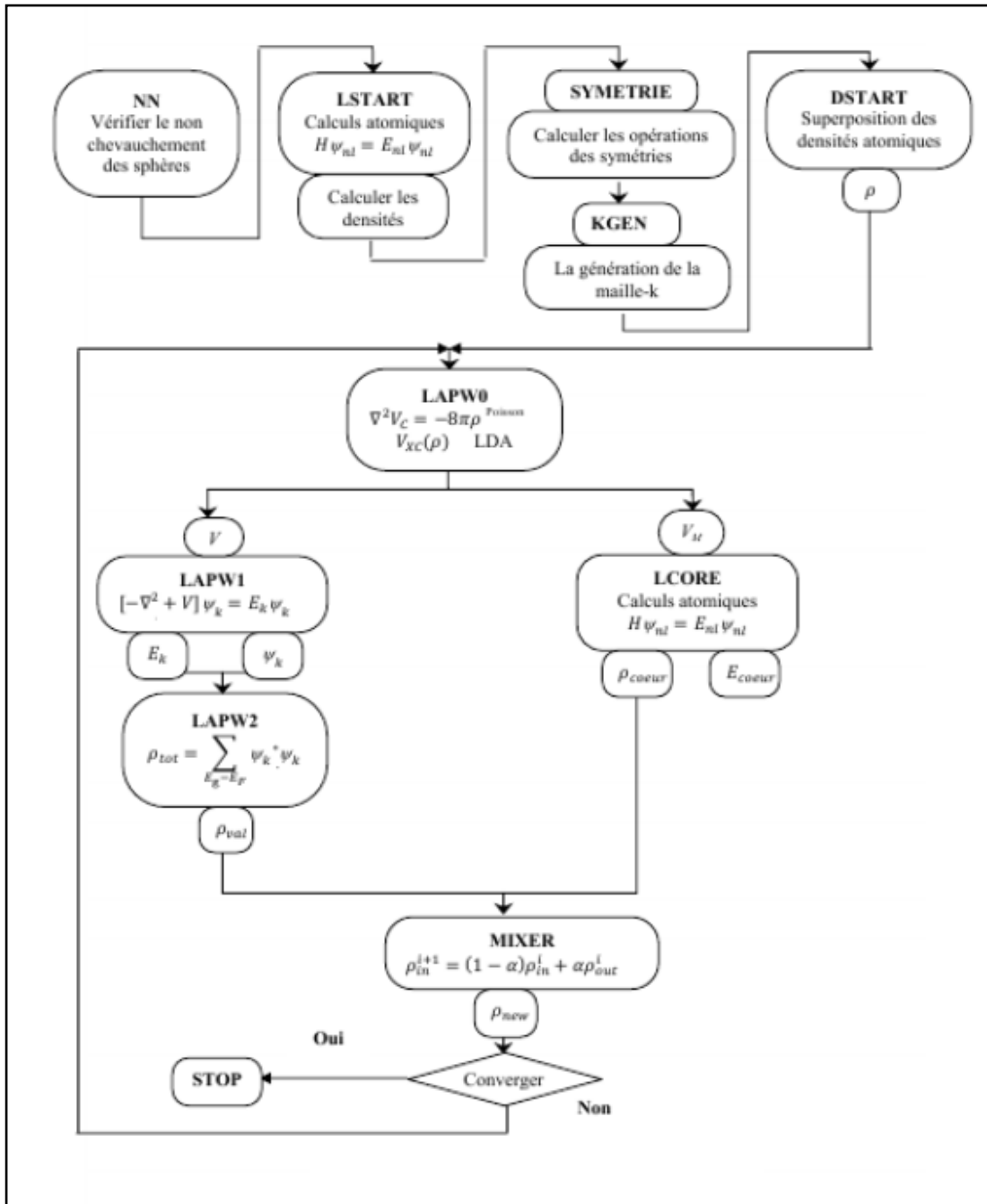


Figure II.7: la structure du Programme Wien2k.

II.12 Conclusion :

Depuis 1964, la théorie de la fonctionnelle de la densité est largement utilisée pour simuler les propriétés structurales, électroniques, ... pour l'ensemble des éléments du tableau périodique et leurs alliages. Les résultats obtenus sont très fiables et relativement comparables avec ceux tirés de l'expérimentale. Cette théorie et les principales approximations ont fait l'objet de ce chapitre, dans lequel nous avons aussi discuté les techniques de calcul de la structure électronique, et en particulier, les méthodes ab-initio considérées comme étant un outil de base pour le calcul des propriétés électroniques et structurales des systèmes les plus complexes. A travers cette théorie et à l'aide des méthodes ab-initio, il est possible de prédire de nouveaux matériaux.

Dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité, les chercheurs développent, au fur et à mesure, des techniques et des approximations permettant l'amélioration de la précision des résultats obtenus dans plusieurs domaines d'intérêt.

Références bibliographiques :

- [1] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Phil. Soc. 89, 111, 42624 (1928).
- [2] P.A.M Schrödinger, Rev. 28.1049,(1926).
- [3] E. Schrödinger, Phys.Rev.28 (1926) 1049,
- [4] M. Born and R. Oppenheimer, Ann. Phys. 74(1927) 1
- [5] Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry 2nd ed, Wiley (2007).
- [6] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. 136 (1964) 864.
- [7] Samir Matar, Approches Monoélectronique, Institut de chimie de matière condensée duBordeaux (14 sep 2004)
- [8]D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24: 89 (1928)
- [9] R. M. Dreizler, E. K. U. Gross, Density Functional Theory : An Approach to the QuantumMany-Body Problem, Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [10] R. G. Parr, W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, Oxford, 1989.
- [11] W. Kohn, Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 12531266.
- [12] S. MAMOUN. Thèse de Doctorat Etude ab initio des propriétés électroniques et optiques du niobate de lithium (Li Nbo3) stœchiométrique. Université de LORRAINE, 2013.
- [13]Azavant Patrick Approche théorique de la diffusion élastique et inélastique dans les solides par la méthode ab initio Hartree-Fock : application aux sulfures de lithium et de sodium.- 180 p. Th. : Chimie-Physique : Pau : 1994 ; 212
- [14] K. Endo, K. Yamamoto, and K. Deguchi, J. Phys. Chem. Solids 54, 15 (1993).
- [15] A. Y. Liu, R. M. Wentzcovitch, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 39, 1760 (1989).
- [16] R. Wentzcovitch, K.J. Chang and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 34, 1071 (1 986).
- [17] J.S Slater Wave function in a peridodic potential, phy.Rev.51:846-851.(1937)

[18] J. P. Perdew, A. Zunger, Phys. Rev. B 23 (1981) 5048.

[19] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Vienna, Austria (2008).

[20] Adrien Allard. Etude Ab-initio des phonons du graphène sur substrats Métalliques .Université des Sciences et Technologie de Lill, 2011.

Chapitre III :

Résultats et discussions

III.1 Introduction :

La prédiction des propriétés structurales, électroniques des composés binaires BN, BIn, InN et InAs et de leurs alliages ternaire a été effectuée, dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité, par la méthode des ondes planes augmentées linéarisées LAPW implémentée dans le code de calcul Wien2K, et ce dans le but d'alimenter la base de données relatives aux propriétés des alliages semi-conducteurs par rapport aux propriétés structurales (paramètre de maille et module de compressibilités) et électroniques (nature et valeur du gap).

III.2 Détails de calcul :

Nos résultats de calcul sont obtenus par la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées FP-LAPW [1] Celle-ci est basée sur le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de densité DFT [2] implémentée dans le code WIEN2K. [3].

Par rapport au potentiel d'échange et de corrélation a été décrit par l'approximation de la densité locale LDA paramétrées par Cerperley et Aldee [4] et l'approximation du gradient généralisé GGA paramétrées par Perdew Burke et Ernzerhef [5]. Une autre approximation notée mBJ (modified Becke-Johnson), développée par Tran et Blaha [6], a été aussi utilisée pour améliorer les valeurs de gap. [7]

Dans la méthode FP-LAPW, l'espace est divisé en deux régions; des sphères non chevauchées entourant les sites atomiques de rayons R_{MT} (Muffin-tin) et une région dite interstitielle.

Dans la première région, les fonctions de base, les densités électroniques et les potentiels sont développés en combinaison d'harmoniques sphériques jusqu'à une valeur de $l_{Max} = 10$ [8], par contre dans la région interstitielle, ils sont développés en série de Fourier avec un rayon de coupure $R_{MT} K_{Max} = 8$, le paramètre $R_{MT} K_{Max}$ détermine la taille de la base dans la région interstitielle où R_{MT} est le plus petit rayon Muffin -Tin et K_{Max} la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes des fonctions propres.

Chapitre III : Résultats et discussions

Les valeurs de R_{MT} pour B, In, As et N sont récapitulés sur le Tableau III.1 et pour la grille des points spéciaux K-points dans la première zone de Brillouin, nous avons choisi $k=2000$ Pour les binaires, et $k= 500$ pour les ternaires.

Elément	Nombre des électrons Z	Rayon Muffin-tin (R_{MT})
B	Z=5	1.3
In	Z=49	2
N	Z=7	1.4
As	Z=33	1.9

Tableau III.1: Les paramètres utilisés dans le calcul pour la structure zinc-blende.

III.3 Propriétés structurales :

Comme toutes les propriétés de nos composés dépendent du paramètre de maille optimisé, il est indispensable de commencer par le calcul de l'énergie total qui est fonction du volume à l'équilibre. Nous avons effectué à l'aide du code Wien2k un calcul self-consistent de l'énergie totale pour plusieurs valeurs du paramètre du réseau a prises au voisinage de la valeur expérimentale. Les valeurs de l'énergie ainsi obtenues ont été ensuite interpolées par l'équation d'état de Murnaghan [9] donnée par :

$$E_{tot}(V) = \frac{B_0 V}{B'_0} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} + 1 \right] + E_0 - \frac{V_0 B_0}{B'_0 - 1} \quad (\text{III.1})$$

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

$$B_0 = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III.2})$$

Le paramètre du réseau à l'équilibre correspond au minimum de la courbe $E(V)$.

III.3.1 les alliages binaires BN, BIn, InN et InAs :

L'optimisation des paramètres de maille des alliages binaires s'effectuée à l'aide de l'équation III.1 et à partir du volume correspondant à la valeur minimale de l'énergie total $E_{tot}(V)$, on peut déterminer le paramètre de maille de chaque binaire. La variation de l'énergie en fonction du volume des composés binaires dans la structure Zinc-blende à l'aide de l'approximation GGA est représentée sur les figures III.1. Tandis que les résultats de calcul comparés à d'autres calculs théoriques et quelques données expérimentales sont résumés sur le Tableau III.2.

Par comparaison de nos résultats avec les données disponibles, on a remarqué un bon accord. Quant aux résultats expérimentaux et puisque la GGA surestime le paramètre de maille et la LDA le sous-estime, nos calculs sont également en bonne concordance.

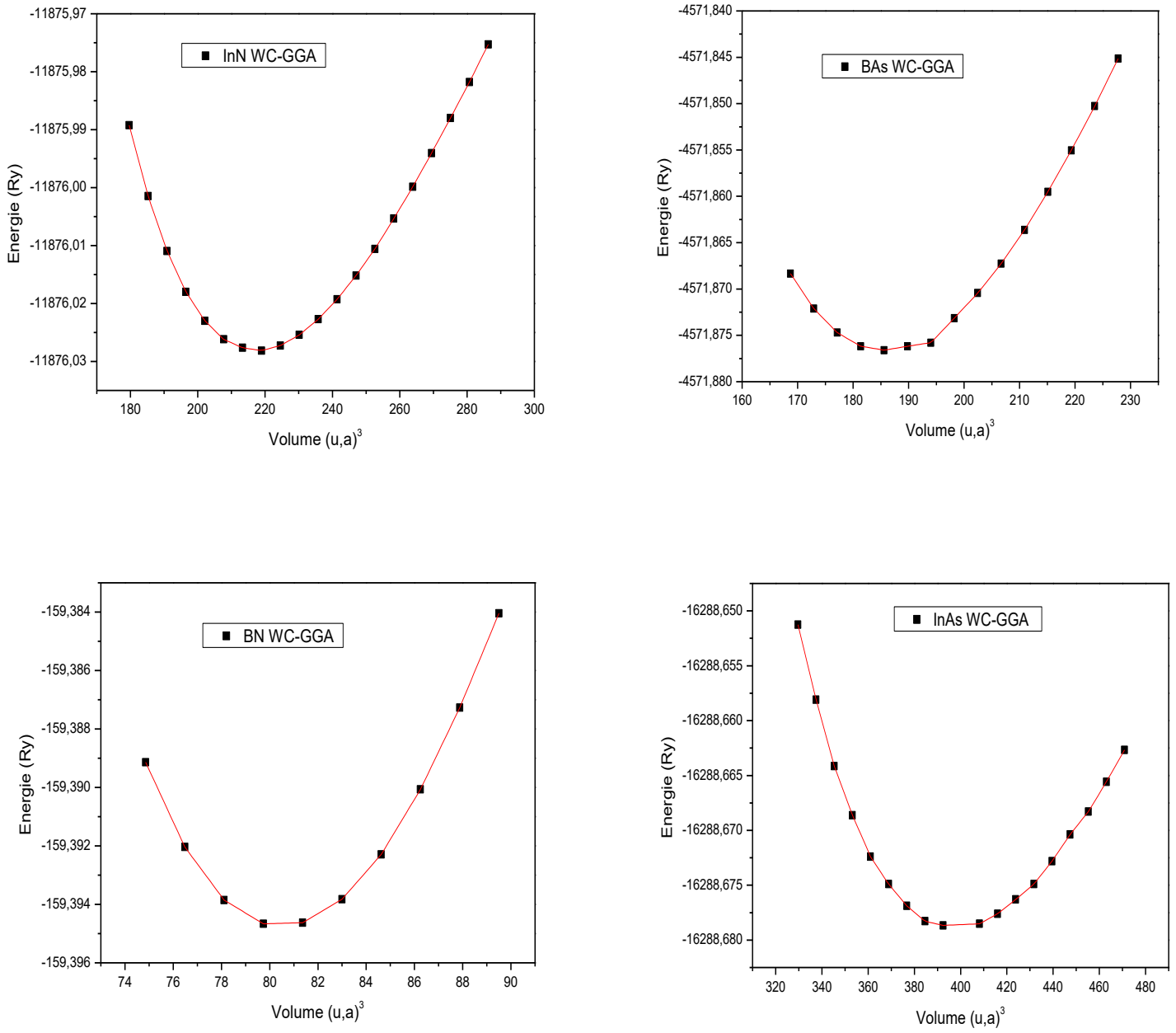


Figure III.1: Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés binaires.

		Nos calculs		Autres calculs	
Composés binaires	Paramètres	WC-GGA	PW-LDA	Théorique	Expérimental
BN	a (Å)	3.62	3.58	3.57 ^a , 3.60 ^b	3.615 ^c
	B (GPa)	.37484	371.24	395 ^a , 367 ^b	369 ^c
	B'	3.62	3.69	3.67 ^a	~4 ^c
BA_s	a (Å)	4.79	4.73	4.74 ^d , 4.81 ^d	4.74 ^e , 4.81 ^e
	B (GPa)	141.36	146.51	147.5 ^d , 131.2 ^d	152 ^e , 133 ^e
	B'	4.73	4.41	4.17 ^d , 4.21 ^d	3.65 ^e , 3.75 ^e
InN	a (Å)	5.05	4.94	4.945 ^f , 4.98 ^g	4.98 ^j
	B (GPa)	121.30	146.44	145 ^f , 155.35 ^g	137 ⁱ
	B'	4.82	4.56	4.75 ^h , 4.49 ^g	
InAs	a (Å)	6.15	6.01	5.9019 ^k	6.0583 ^k
	B (GPa)	49.90	59.34	61.90 ^k	57.90 ^k
	B'	4.08	4.67	4.487 ^k	4.79 ^k

Tableau III.2 : Paramètre du réseau a en (Å), le module de compressibilité B en (GPa) pour les composés binaires BN, BA_s, InN et InAs. ^a Réf. [16]. ^b Réf. [17-18]. ^c Réf. [19]. ^d Réf. [20]. ^e Réf. [21]. ^f Réf. [10]. ^g Réf. [11]. ^h Réf. [12]. ⁱ Réf. [13]. ^j Réf. [14]. ^k Réf. [15].

III.3.2 les alliages ternaires B_xIn_{1-x}As, B_xIn_{1-x}N :

De la même manière et à l'aide de l'équation III.1 de l'énergie total représentée sur la figue III.2, le paramètre de maille et le module de compressibilité des alliages ternaires B_xIn_{1-x}As, B_xIn_{1-x}N ont été déduit et résumés sur le Tableau III.3 comparés aux données théoriques et expérimentales disponibles.

Chapitre III : Résultats et discussions

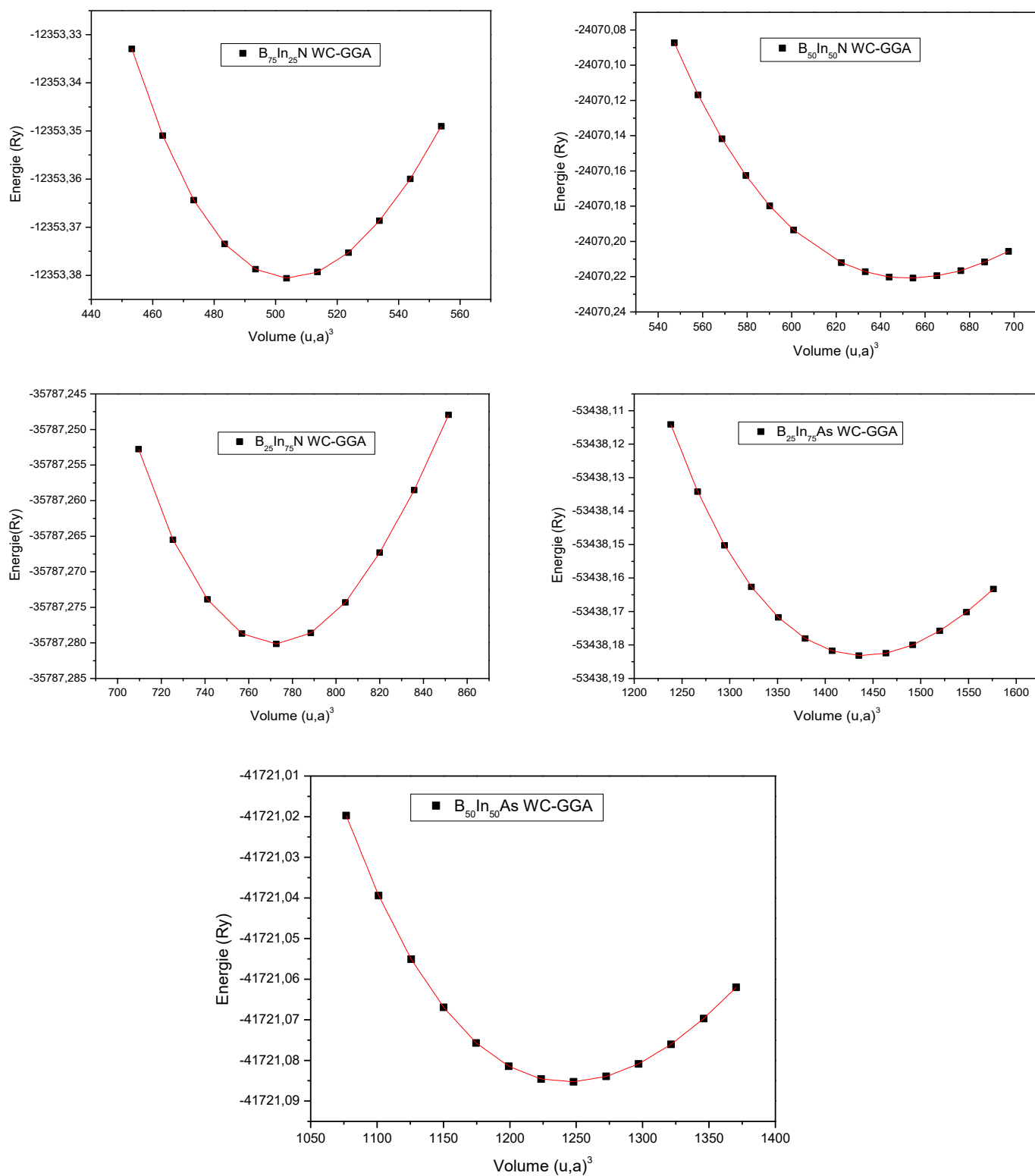


Figure III.2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés ternaires.

Chapitre III : Résultats et discussions

		Nos calculs		Autres calculs	
Composés ternaires	Paramètres	WC-GGA	PW-LDA	Théorique	Expérimental
B_{0.25}In_{0.75}As	a (Å)	5.97	5.90	5.845 ¹	
	B (GPa)	58.10	60.00	71.983 ¹	
	B'	4.25	4.90	4.543 ¹	
B_{0.50}In_{0.50}As	a (Å)	5.66	5.56	5.617 ¹ , 5.67	
	B (GPa)	69.93	77.86	75.252 ¹	
	B'	4.56	4.73	4.046 ¹	
B_{0.75}In_{0.25}As	a (Å)	5.29	5.22	5.265 ¹	
	B (GPa)	93.80	101.27	94.953 ¹	
	B'	5.22	4.71	4.398 ¹	
B_{0.25}In_{0.75}N	a (Å)	4.85	4.75	4.75 ^m	
	B (GPa)	137.86	162.08	166 ^m	
	B'	4.48	4.64	4.24 ^m	
B_{0.50}In_{0.50}N	a (Å)	4.59	4.51	4.51 ^m , 5.32 ⁿ	
	B (GPa)	166.39	195.07	201 ^m	
	B'	4.47	4.51	3.61 ^m	
B_{0.75}In_{0.25}N	a (Å)	4.21	4.15	4.14 ^m	
	B (GPa)	224.40	255.56	255 ^m	
	B'	4.23	4.05	3.88 ^m	

Tableau III.3 : Paramètre du réseau a en (Å), le module de compressibilité B en (GPa) pour les composés ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$. ¹Réf. [31]. ^mRéf. [32]. ⁿRéf. [33].

Il est à signaler que la variation du paramètre de maille en fonction de la composition suit une loi linéaire, d'après la loi de Végard. Pratiquement, il y a toujours une déviation par rapport à cette dernière. Les variations des paramètres de maille de nos alliages ternaires sont représentées sur les figures III- (3-5). L'ajustement des valeurs calculées à l'aide d'une fonction polynomiale quadratique nous a permis de calculer le désordre (Bowling) du paramètre de réseau. Par conséquent, nous avons trouvé de légères déviations par rapport à la loi de Végard qui sont représentées sur le Tableau III.4. L'origine de cette déviation est fort probablement dû à l'écart existant entre les deux paramètres de maille des composés binaires parents constituant chaque l'alliage.

Les variations des modules de compressibilités sont aussi représentées sur les figures III- (4-6), ces variations montrent une déviation par rapport au comportement linéaire engendrée par l'écart enregistré entre les deux modules de compressibilité des composés binaires parents constituant chaque alliage.

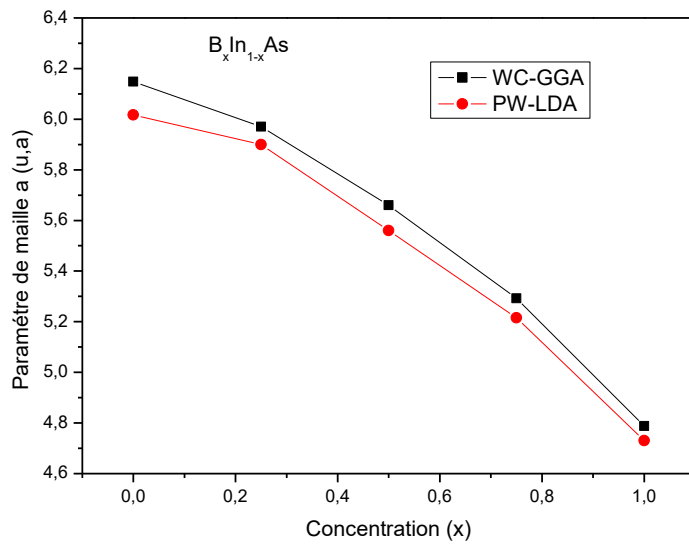


Figure III.3 : La variation du paramètre de maille (a) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}As$.

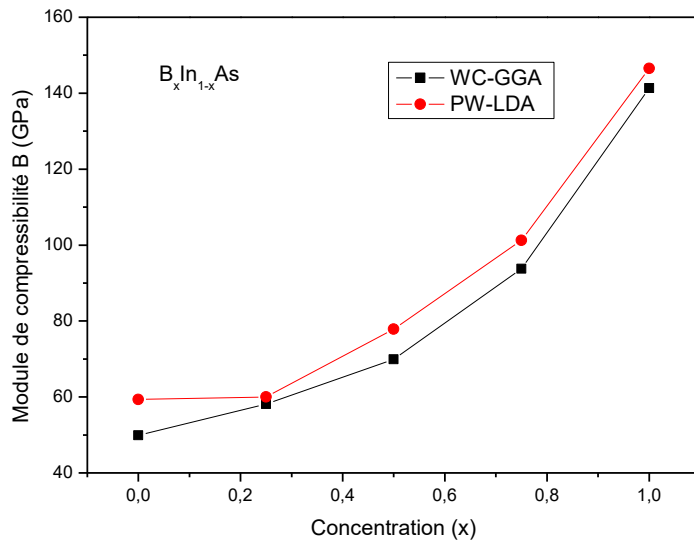


Figure III.4 : La variation du module de compressibilité (B) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}As$.

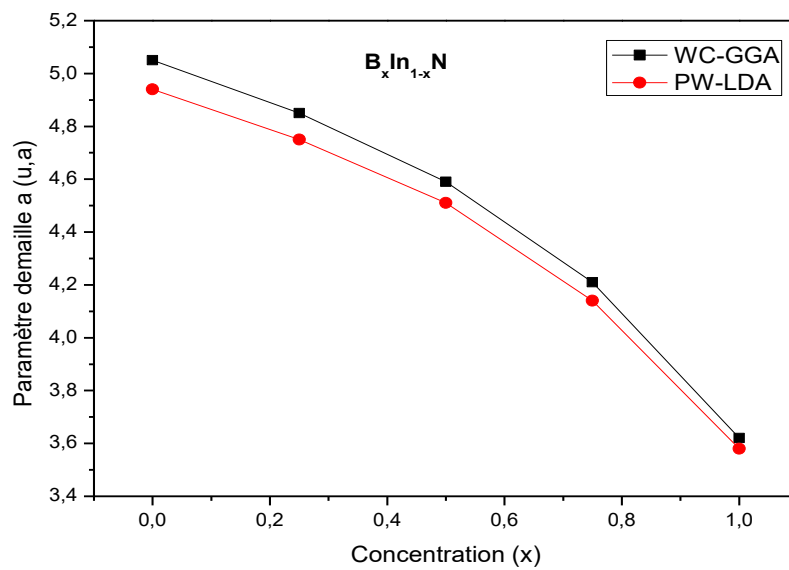


Figure III.5: La variation du paramètre de maille (a) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}N$.

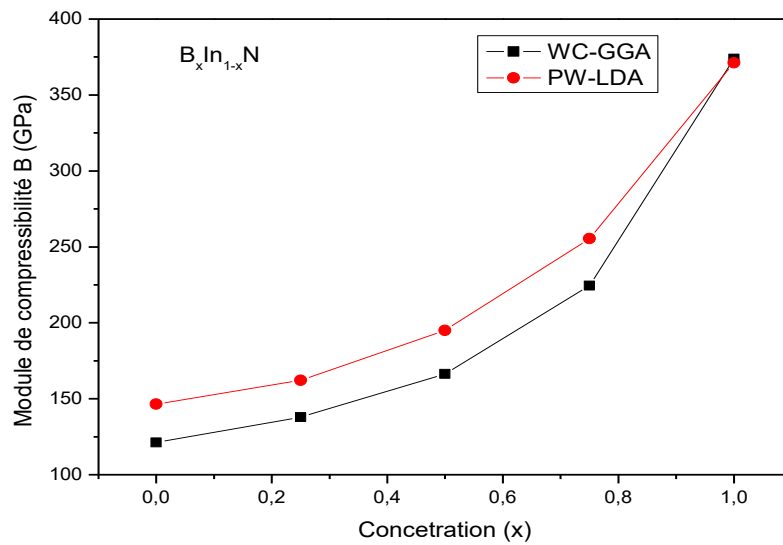


Figure III.6 : La variation du module de compressibilité(B) en fonction de la concentration de l'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}N$.

Composé ternaire	Paramètre de courbure pour la constante de maille (a)		Paramètre de courbure pour le module de compressibilité (B)	
	WC-GGA	PW-LDA	WC-GGA	PW-LDA
$B_xIn_{1-x}As$	-1.36	-1.304	87.448	86.244
$B_xIn_{1-x}N$	-1.4	-1.332	237.44	217.048

Tableau III.4 : Paramètres de courbures pour la constante de maille et le module de compressibilité des alliages ternaires.

III.4 Propriétés électroniques :

III.4.1 Structure de bande :

La théorie des bandes d'énergies joue un rôle très important, dans le domaine de la physique des matériaux notamment dans la physique des solides, elle détermine également les énergies possibles des électrons dans un solide. Dans une structure de bandes, on distingue les bandes d'énergies permises et les bandes d'énergies interdites dont la largeur permet de caractériser nos matériaux semi-conducteurs.

A travers nos calculs, nous avons pu représenter les structures de bandes de nos composés binaires et alliages ternaires dans le réseau réciproques, et pour simplifier, seules les directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin sont traitées.

Les calculs ont été effectués à l'aide des paramètres de mailles qu'on a optimisé dans la partie précédente de chaque composé et utilisant les deux approximations GGA et TB-mBJ-GGA

III.4.1.1 Les alliages binaires BN, BIn, InN et InAs :

La figure III. 7 représente les structures de bandes pour les composés binaires InN, InAs, BN et Bas. A partir de ces figures, on remarque que les composés examinés sont des semi-conducteurs avec une bande interdite direct pour les composés InAs, InN et indirect pour les composés BN et BAs.

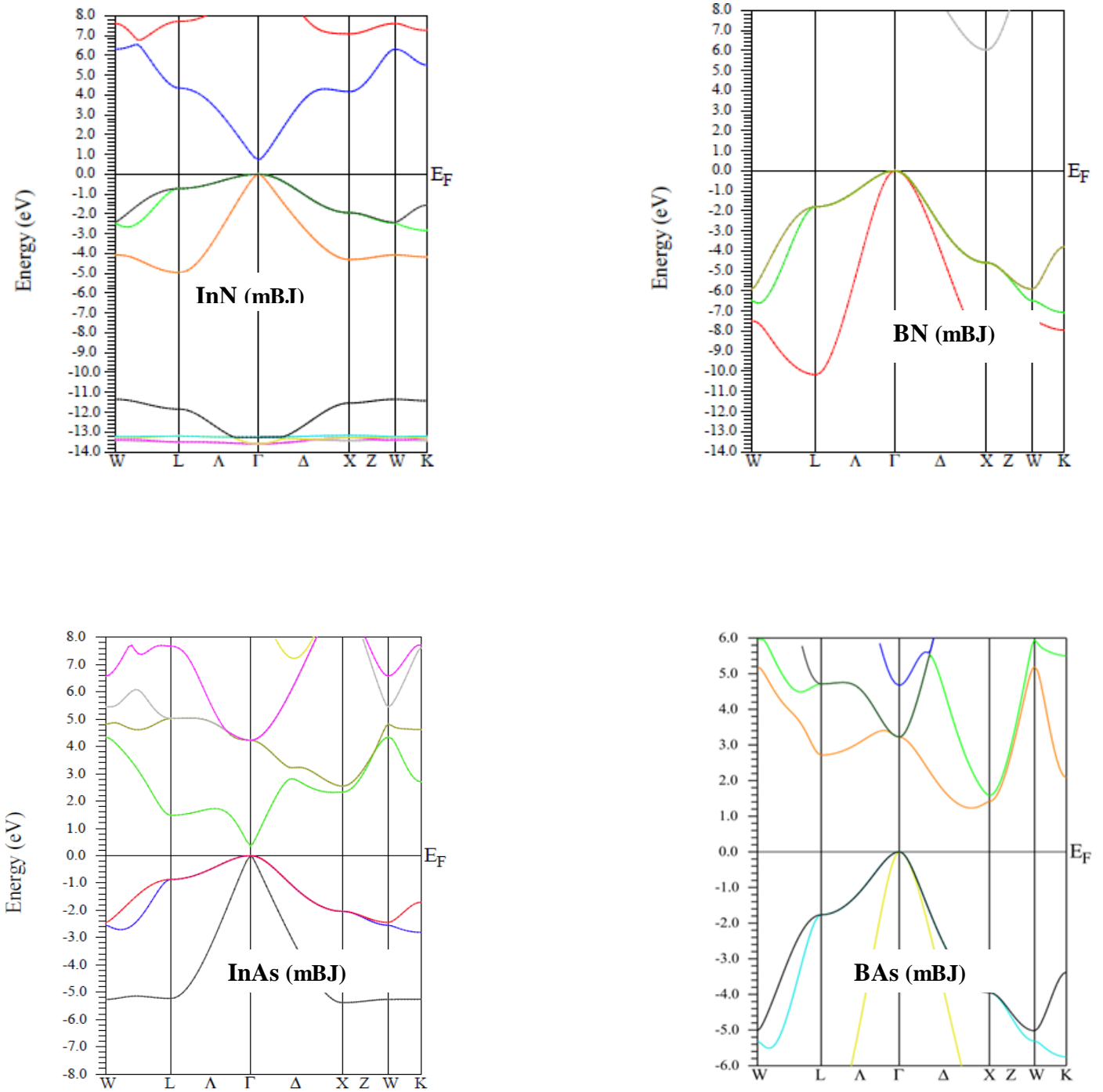


Figure III.7 : Structure de bandes des alliages binaires InN, BN, InAs et BAs.

Chapitre III : Résultats et discussions

Les valeurs calculées des énergies de gap direct et indirect pour les alliages binaires sont résumées dans le tableau III.6, comparées à d'autres résultats expérimentaux et théoriques obtenus par différentes méthodes.

		Nos calculs		Autres calculs	
Composes binaires	Energie de gap (ev)	WC_GGA	mBJ	Théorique	Expérimental
BN	$E_{\Gamma \rightarrow \Gamma}$	8.79	10.58	8.78 ^a	6.3 ^c
	$E_{\Gamma \rightarrow X}$	4.46	6.02	4.45 ^a , 5.42 ^b	6 ^b
BAs	$E_{\Gamma \rightarrow \Gamma}$	3.21	3.24	3.34 ^d	1.46 ^e
	$E_{\Gamma \rightarrow X}$	1.41	1.23	1.93 ^d , 1.82 ^b	0.67 ^f
InN	$E_{\Gamma \rightarrow \Gamma}$	0.00	0.73	0.69 ^g	0.7 ⁱ
	$E_{\Gamma \rightarrow X}$	2.90	4.16	2.765 ^h	2.11 ^j
InAs	$E_{\Gamma \rightarrow \Gamma}$	0.00	0.36	0.568, 0.499	
	$E_{\Gamma \rightarrow X}$	1.64	2.33		

Tableau III.5 : Les énergies de gap direct et indirect des composés binaires.^a Réf. [23]. ^b Réf. [30]. ^c Réf. [27]. ^d Réf. [26]. ^e Réf. [28]. ^f Réf. [29]. ^g Réf. [24]. ^h Réf. [11]. ⁱ Réf. [14]. ^j Réf. [25].

III.4.1.2 Les alliages ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$:

Etant donné que la nature et la valeur de la bande interdite varient en fonction de la composition x , les alliages semi-conducteurs ternaires sont fréquemment utilisés à différentes concentrations et déposés sur plusieurs substrats.

Les structures de bandes ont été aussi calculées pour les alliages ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$ pour les différentes concentrations $x=(0.00,0.25,0.50,0.75,1.00)$ et elles sont montrées sur la figure III.8

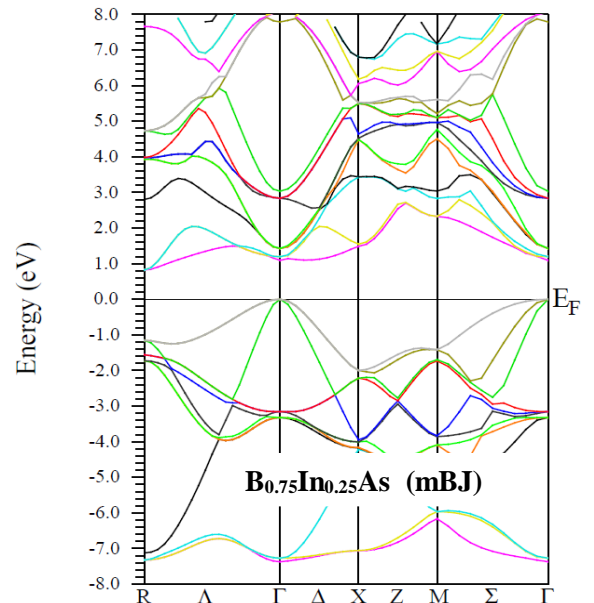
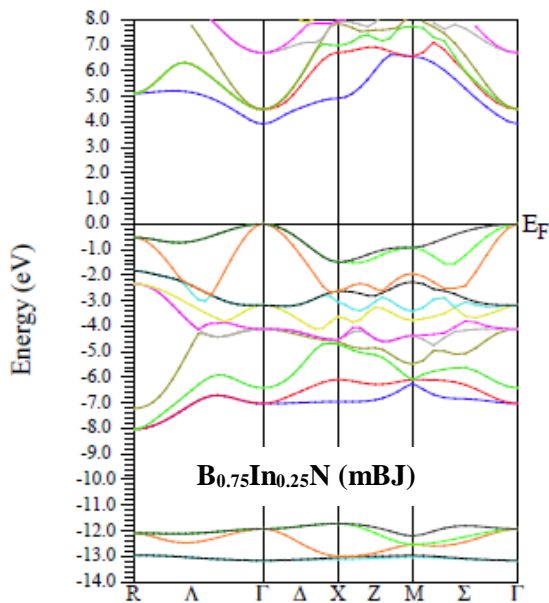
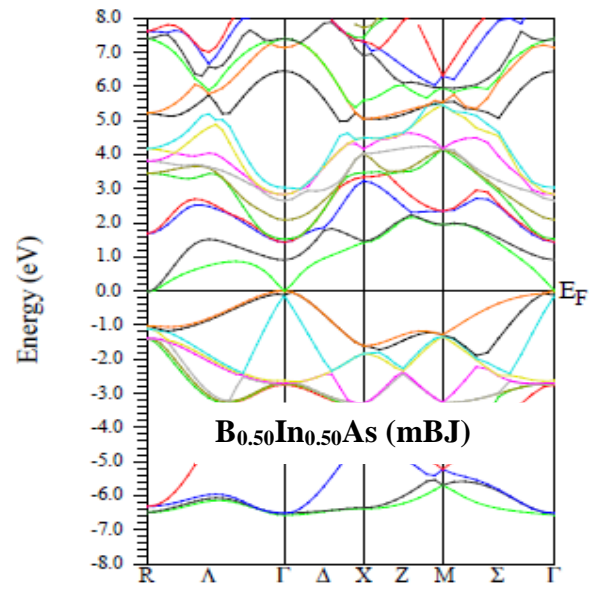
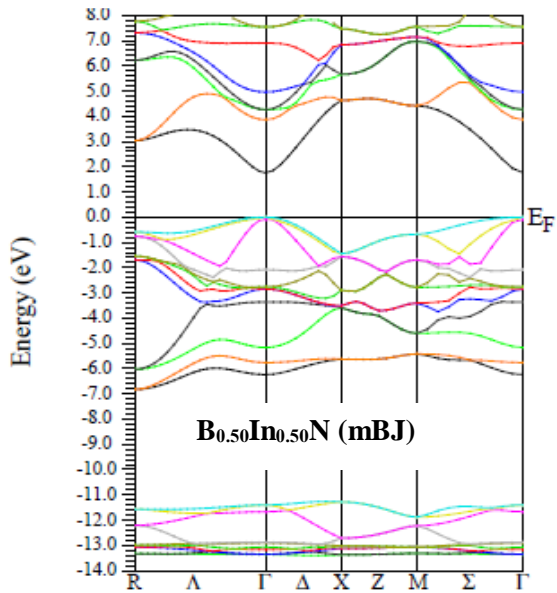
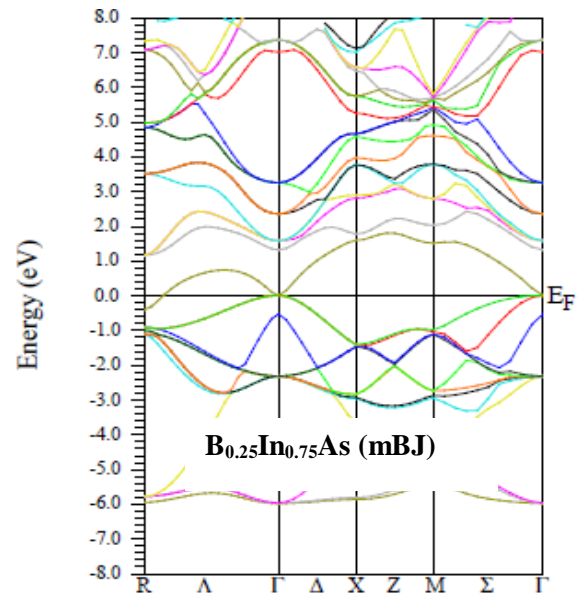
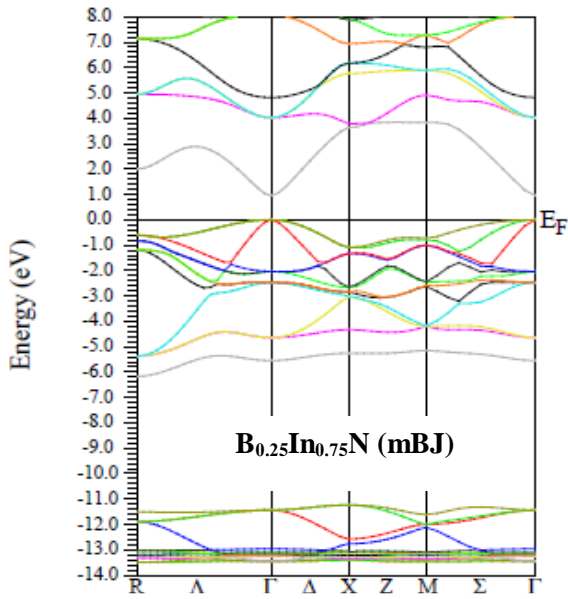


Figure III.8 : Structure de bandes des alliages ternaires.

Les valeurs obtenues de l'énergie de la bande interdite sont résumées dans le tableau III.7.

		Nos calculs		Autres calculs	
Composes ternaires	Energie de gap (ev)	WC-GGA	mBJ	Théorique	Expérimental
B_{0.25}In_{0.75}As	E_{Γ→Γ}	0.00	0.4647	.0119 ^l , 0.0449 ^l	
	E_{Γ→X}	1.63	2.0676		
B_{0.50}In_{0.50}As	E_{Γ→Γ}	0.07	0.7477	0.35 ^l , 0.734 ^l	
	E_{Γ→X}	1.38	1.899		
B_{0.75}In_{0.25}As	E_{Γ→Γ}	1.09	1.11	1.49 ^l , 1.641 ^l	
	E_{Γ→X}	0.94	1.49		
B_{0.25}In_{0.75}N	E_{Γ→Γ}	0.00	0.95	0.16 ^m	
	E_{Γ→X}	2.63	3.64	4.52 ^m	
B_{0.50}In_{0.50}N	E_{Γ→Γ}	0.76	1.76	1.1 ^m	3.75 ⁿ
	E_{Γ→X}	3.52	4.63	5.37 ^m	
B_{0.75}In_{0.25}N	E_{Γ→Γ}	2.91	3.91	3.15 ^m	
	E_{Γ→X}	3.63	4.91	5.4 ^m	

Tableau III.6 : Les énergies de gap direct et indirect des composés ternaires. ^lRéf. [31]. ^mRéf. [32]. ⁿRéf. [33].

A partir des graphes représentant les variations des énergies de bande interdite direct et indirect en fonction de la composition x des alliages ternaires $B_xIn_{1-x}As$, $B_xIn_{1-x}N$ illustrées dans la figure III.9, on peut conclure que :

- L'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}As$ devient à gap indirect au-delà de $x=0.79$ de Bore
- L'alliage ternaire $B_xIn_{1-x}N$ devient à gap indirect au-delà de $x=0.82$ de Bore

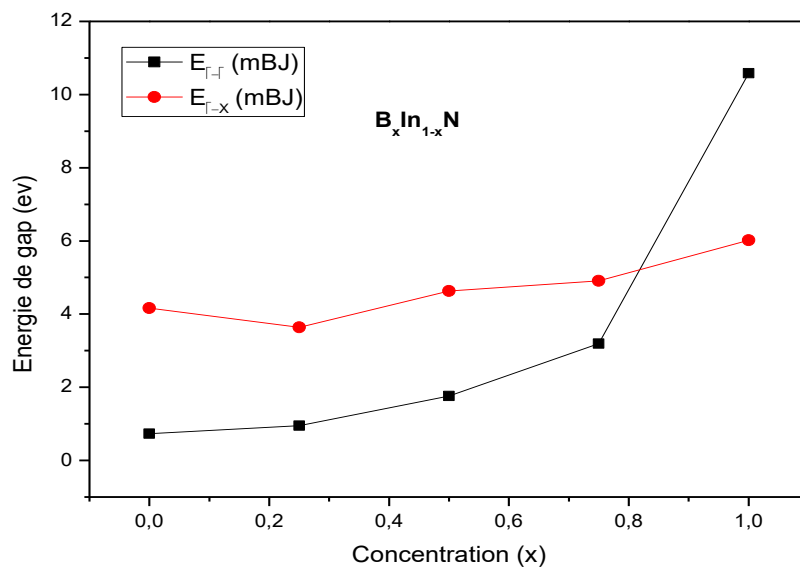
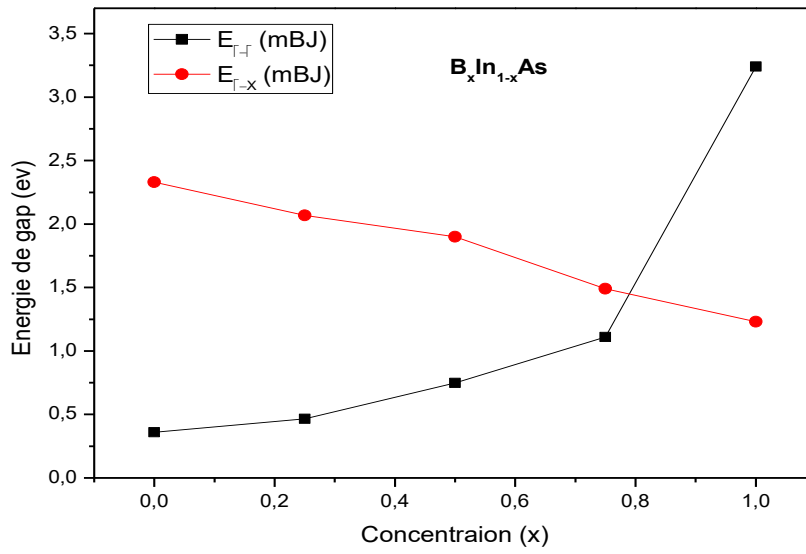


Figure III.9 : La variation des énergies de bandes interdites direct et indirect en fonction de la concentration x et y des alliages ternaires.

De plus, les valeurs calculées des énergies de bande interdite ont été ajustées par des fonctions polynomiales quadratiques.

Les équations des courbes ajustées sont les suivantes :

Pour $B_xIn_{1-x}As$:

$$E_{\Gamma \rightarrow \Gamma} = -2.15777x^2 + 4.71989x + 0.49341$$

$$E_{\Gamma \rightarrow X} = -0.84178x^2 - 0.26926x + 2.32518$$

Pour $B_xIn_{1-x}N$:

$$E_{\Gamma \rightarrow \Gamma} = -8.32114x^2 + 17.09714x + 1.19114$$

$$E_{\Gamma \rightarrow X} = -0.91829x^2 + 2.91429x + 4.03829$$

L'écart entre les paramètres de réseau des composés binaires parents dans chaque alliage est à l'origine de la déviation du comportement linéaire des différentes expressions ci-dessus.

III.5 Conclusion :

Dans notre modeste étude de simulation utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées LAPW implémentée dans le code de calcul Wien2K, nous avons essayé d'analyser l'effet d'ajout de quelques pourcentages du Bore dans les deux binaires, à savoir le InN et le InAs, par rapport aux deux propriétés structurales et électroniques.

Nous avons commencé par les calculs d'optimisation des paramètres de maille pour les alliages binaires et ternaires, à l'aide de l'équation de l'énergie totale de chaque alliage dont on a déduit le paramètre de maille en fonction du volume minimale. Les structures de bande ont également calculé et tracé, les valeurs et la nature de chaque bande interdite ont été déduit.

Nos résultat de calcul nous ont permis de constater que :

L'insertion du Bore réduit le paramètre de maille et par conséquent améliore la dureté de nos alliages obtenus, qui va donner aux expérimentateurs la possibilité de faire croître nos alliages obtenus sur d'autres substrats ayant des paramètres de mailles relativement comparables.

L'ajout de quelque pourcentage du Bore diminue les gaps indirects des deux binaires InN et InAs, d'une part et augment leurs gaps directs, d'autre part, jusqu'aux deux pourcentages de concentration du bore 79% et 82%, respectivement pour les deux alliages $B_xIn_{1-x}As$ et $B_xIn_{1-x}N$, où ils deviennent à gaps indirectes. C'est un résultat permettant la possibilité d'exploiter ces alliages dans plusieurs applications optoélectroniques.

Références bibliographiques :

- [1] O. K. Anderson, Phys. Rev. B 42,3060(1975).
- [2] S. Cottenier, DFT and the family of (L) APW-methods: a step-by-step introduction, K.U.Leuven (http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks), (2002).
- [3] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz, WIEN2k, An AugmentedPlane Wave Plus Local Orbitals Program for calculating Crystal Properties, ViennaUniversity of Technology, Vienna, Austria (2008)
- [4] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45, 566 (1980).
- [5] J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phys. Lett. 77, 3865 (1980).
- [6] F. Tran and P. Blaha, Phys. Rev.Lett 102, 226401 (2009).
- [7] M. Labidi, thèse de Doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba (2011)
- [8] M. Labidi, thèse de Doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba (2011)
- [9] Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology, edited by O. Madelung, M. Schlz, H.Weiss, Landolt-Borstein (Springer, Berlin, 1982), Vol.17.
- [10] Y. Shi Hand Duan, 2008 Phys.Lett.A373165.
- [11] A. Abdiche, H. Abid, R. Raine and A. Bouaza, 2010Acta Phys.Polonica 117
- [12] M. I. Ziane, B. Zouaoui, T. Ouahrani and B. Hamza, 2015 Mater. Sci.Semicond.Process. 30181
- [13] J. Serrano, A. Rubio, E. Hernandez, A. Munoz and A. Mujica, 2000 Phys.Rev.B 6216612
- [14] R. Ahmed, S. J. Hashem far, H. Akbarzadeh, M. Ahmed and F. Aleem, 2007Computat.Mater. Sci. 39580
- [15] P. E. Van Camp, V. E. Van Doren and J. T. Devreese, 1990 Phys.Rev.B. B 41 1598
- [16] J. Furthmuller, J. Hafner and G. Kresse, "Ab initio calculation of the structural and electronic properties of carbon and boron nitride using ultrasoft pseudopotentials." Physical review B 50.21(1994) : 15606.

[17] R. M. Wentzcovitch, K. J. Chang and M. L. Cohen, Electronic and structural properties of BN and BP. *Phys. Rev. B* 34,1071(1986).

[18] R. M. Wentzcovitch, S. Fahy, M. L. Cohen, and S. G. Louie, Ab initio study of graphite diamond transitions in BN, *Phys. Rev. B*. 38,6191 (1988).

[19] Y. N. Xu and W. Y. Ching, Calculation of ground-state and optical properties of boron nitrides in the hexagonal, cubic, and wurtzite structures, *Phys. Rev. B* 44 ,7787 (1991).

[20] R. Ahmed, S. J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, M. Ahmed and Fazal-e-Aleem, " Ab initio study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds." *Computational materials science* 39.3 (2007) : 580-586.

[21] H. Meradji, S. Drablia, S. Ghemid, H. Belkhir, B. Bouhafis and A. Tadjer, (2004). First-principles elastic constants and electronic structure of BP, BAs, and BSb. *physica status solidi (b)*, 241(13) ,2881-2885.

[24] W. Shen and A. Zunger, 1999 *Phys. B*. 605404.

[25] Properties of Group III-Nitrides, Ed. J. H. Edgar, EMIS Data Reviews 11, INSPEC 1994, p. 10233.

[26] M. Rezek and S. Katircioglu. "The structural and electronic properties of the BN and BP compounds and $\text{BN}_x\text{P}_{1-x}$ alloys." *Journal of Alloys and Compounds* 478.1 (2009) : 531-537

[27] N. Chimot, J. Even , H. Folliot and S. Loualiche, *Physica B* 364 (2005) 263.

[28] A. Zaoui and F. El Hadj Hassen, "Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave calculations of structural and Electronic Properties of BN, BP, BAs and BSb," *J. Phys. : Condens. Matter.* 13, pp.253-262, 2001.

[29] M. P. Surh, S. G. Louie and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* 43(1991) 9126.

[30] M. Rabah, B. Abbar, Y. AL-Douri, B. Bouhafis and B. Sahraoui, *Mater. Sci. Eng. B*. 100(2003) 163.

[31] The optoelectronic properties of the ternary $\text{B}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ matched on GaAs substrate for laser diode application: Theoretical study with TB-mBJ

approximation EsmaaKhenous* , Hamza Abid, Miloud Benchehima, Amina Benzina Applied Materials Laboratory, Research Center, Sidi Bel Abbès Djillali Liabes University, 22000, Algeria

[32] First-principles study of cubic $B_xIn_{1-x}N$ alloys Abdelhadi LACHEBI, Mohamed SEHIL and Hamza ABID Applied Materials Laboratory, University Research Center University of Djillali Liabès of Sidi Bel-Abbès-ALGERIA e-mail: Lachebia@yahoo.fr Received 09.02.2009

[33] Growth and Characterization of Nanocolumnar-Structure Boron Indium Nitride Alloys Deposited on Sapphire Substrates by Solution Chemical Vapor Deposition Lung-Chien Chen_ and Ching-Ho Tien Department of Electro-Optical Engineering, National Taipei University of Technology, 1, Sec. 3, Chung-Hsiao E. Rd., Taipei 106, Taiwan, R.O.C. Received April 29, 2009; revised June 25, 2009; accepted June 26, 2009; published online October 20, 2009