



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la  
Recherche Scientifique  
Centre Universitaire El-wancharissi de Tissemsilt



Institut de Sciences et de la Technologie  
Département des sciences de la matière

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme  
de Master académique en

Filière : *Science PHYSIQUES*

Spécialité : *Nano-Physique*

Présenté par :

**BOUMEDIENE Kamel**

**SEKOUM Abdelkader**

*Thème*

---

**Etude AB-initio des propriétés structurales et  
électroniques d'un puit quantique à base S-C III-V**

---

**Devant le Jury :**

M <sup>r</sup> BENALIA Salaheddin	Président	Prof.	CU-Tissemsilt
M <sup>r</sup> MERABET Mostefa	Encadreur	Prof.	CU-Tissemsilt
M <sup>r</sup> DJOUDI Lakhdar	Examineur	Prof.	CU-Tissemsilt

**Année universitaire : 2019-2020**

# Dédicaces

*Je dédie ce modeste travail*

*A ma très chère mère*

*A mon très cher regretté père*

*A mes beaux parents*

*A ma femme et à mon enfant Youcef*

*Toute ma famille*

*Mon encadreur Mr Merabet Mostefa*

*Tous mes collègues et mes amis surtout Choraf Walid*

*Tous ceux que j'aime*

*Boumediene Kamel*

# Dédicaces

***J**E dédie ce modeste travail:*

*A la mémoire de mon père.*

*A ma mère.*

*A ma fille Naama, A ma femme.*

*A mes frères et à mes sœurs.*

*A tous mes ami(e).*

*A toute la famille .*

*Abdel Kader Sekoum*

## *Remerciements*

Un très grand merci au bon Dieu qui nous a donné la force et le courage nécessaire afin d'accomplir cette mémoire.

Nous tenons en premier à exprimer notre profonde et sincère gratitude envers Monsieur MERABET Mostefa Professeur au Centre Universitaire El-wancharissi de Tissemsilt qui a dirigé ce travail. Sa disponibilité permanente et son aide ont été d'un soutien dont nous lui sommes particulièrement reconnaissant. Sa compétence et ses conseils ont été d'un grand secours.

On s'adresse un vif remerciement à Monsieur BENALIA Salaheddin Professeur au Centre Universitaire El-wancharissi de Tissemsilt, qui a bien voulu nous faire l'honneur d'examiner ce travail et de président du jury. Qu'il trouve ici les expressions les plus significatives de notre profonde reconnaissance.

Monsieur DJOUDI Lakhdar Professeur au Centre Universitaire El-wancharissi de Tissemsilt a bien voulu fournir un effort très appréciable en acceptant d'examiner ce travail et d'en être membre de jury. Qu'il trouve ici les expressions les plus significatives de notre profonde reconnaissance.

On remercie a u s s i sincèrement Monsieur C H O R F W a l i d  
Son brillant esprit scientifique, pour les efforts qu'il n'a pas cessé de fournir pour nous aider, orienter et soutenir dans la réalisation de ce travail. Qu'il trouve ici les expressions les plus significatives de notre profonde connaissance.

Nous tenons à remercier tous ceux qui nous ont aidé de près ou de loin .

*BOUMEDIENE KAMEL  
SEKOUM ABDELKADER*

# ملخص

في هذا العمل قمنا اعتمادا على الطرق التقريبية المعتمدة على المبدأ الأول ,عرضنا

دراسة الخصائص البنيوية و الإلكترونية للمركبات الثنائية GaAs و AlAs وشبكتها الممتازة

$(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  من اجل التكوينين (2 ; 1) من اجل الهيكلية (zinc-blende).

تستند طريقة الحساب المعتمدة في هذا العمل على أساس (FP-LMTO). طاقة التحويل

و الترابط المستعملة بتقريبية التدرج المعمم (GGA).

الخصائص البنيوية للمركبات الثنائية GaAs و AlAs متوافقة نوعا ما مع المعطيات

النظرية المتوفرة .

كما قمنا بحساب البنية الطاقوية (structure de bande) للمركبات الثنائية GaAs و

AlAs وشبكتها الممتازة  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  ووفقا لنتائج الخصائص الإلكترونية نجد ان المركب

GaAs والشبكتين الممتازة  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  من اجل (2 et 1)

لهم عصابة طاقوية مانعة مباشرة (gap direct) اما العنصر AlAs فله عصابة طاقوية غير مباشرة

(gap indirect).

الكلمات الافتتاحية:

إلكترونيك – البنية – FP-LMTO-GaAs-AlAs-الشبكة الممتازة.

# Résumé

Dans ce travail, nous présentons les résultats d'une étude de premier principe des propriétés structurales et électroniques pour les composés binaire GaAs et AlAs et leur super-réseaux  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  pour les configurations ( $n = 1$  et  $2$ ) dans la phase zinc-blende.

La méthode de calcul est basée sur la méthode linéaire des orbitales muffin-tin (FP-LMTO). L'énergie d'échange et de corrélation est décrite dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) en utilisant le paramétrage Perdew et al. 1996.

Les propriétés structurales calculées de composés GaAs et AlAs sont en bon accord avec les données théoriques disponibles.

Nous avons également effectué des calculs de structure de bande pour les composés binaire GaAs et de AlAs et de leur super-réseaux (SR)  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$ .

D'après les résultats des propriétés électroniques, nous constatons que les matériaux GaAs et les super-réseaux  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  pour les configurations ( $n=1$  et  $2$ ) ont la valeur du gap direct. Par contre le matériel AlAs a une valeur de gap indirect ( $\Gamma$ -X).

Mots clefs:

Electronique, structure, GaAs, AlAs, FP-LMTO, Superréseaux,.

# *Abstract*

In this work, We present the results of a first-principles study of the structural and electronic properties of binary GaAs and AlAs compounds and their  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  superlattices (SLs) for the five configurations ( $n = 1$  and  $2$ ) in zinc-blende phase.

The computational method is based on the full-potential linear muffin tin orbitals method (FP-LMTO). The exchange and correlation energy is described in the generalized gradient approximation (GGA) using the Perdew et al 1996 parameterization.

The calculated structural properties of GaAs and AlAs compounds are in good agreement with available theoretical data.

We have also carried out band-structure calculations for the binary GaAs and AlAs compounds and their  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  superlattices (SLs).

From the results of electronic properties, we find that the materials GaAs and the  $(\text{GaAs})_n / (\text{AlAs})_n$  superlattices for the ( $n = 1$  and  $2$ ) configurations have the value of the gap direct. On the other hand, the AlAs material has an indirect gap value ( $\Gamma$ -X).

Keywords:

Electronic, structure, GaAs, AlAs , FP-LMTO, Superlattices.

# Sommaire

---

---

<b><u>Sommaire</u></b> .....	<b>I-II</b>
<b><u>Listes des figures</u></b> .....	<b>III</b>
<b><u>Listes des tableaux</u></b> .....	<b>IV</b>
<b><u>Chapitre I</u></b>	
<b>I-1 Introduction générale</b> .....	<b>1</b>
<b>I-2 Généralité sur les semi-conducteurs III-V</b> .....	<b>2</b>
I-2.1 Définitions et propriétés générales.....	2
I-2.2 Les différents types des semi-conducteurs.....	3
I-2.2.1 Les semi-conducteurs intrinsèques.....	3
I-2.2.2 Les semi-conducteurs extrinsèques.....	3
✓ Semi-conducteur de type N.....	3
✓ Semi-conducteur de type P.....	4
I-2.2.3 Classification des semi-conducteurs.....	4
I-2.2.4 Semi-conducteurs binaires.....	5
I-2.3 Propriétés structurales.....	6
I-2.3.1 Structure cubique du zinc blende (ZnS).....	6
I-2.3.2 Structure hexagonale du zinc blende (Wurtzite).....	7
I-2.4 Propriétés électroniques.....	7
✓ La notion de bandes d'énergie .....	7
✓ Gap direct et gap indirect.....	8
<b>I-3 Généralité sur les hétérostructures</b> .....	<b>9</b>
I-3-1 Hétérostructures à Puits Quantiques.....	9
I-3-2 Hétérostructures de Type I, de Type II.....	9
A-Hétérostructures de Type I.....	9
B-Hétérostructures de Type II .....	10
I-3-3 Hétérostructures à Simple Puits Quantique.....	11





# Sommaire

---

I-3-4 Hétérostructures à Multi-Puits Quantiques.....	11
I-3-5 Super-réseaux.....	12
<b>I-4 Les applications des hétérostructures (super-réseau).....</b>	<b>13</b>
I.4.1. La jonction p-n polarisée en direct (la diode).....	13
I.4.2. Structure MIS (Métal-Isolant-Semiconducteur) à effet tunnel et électroluminescence.....	14
I.4.3. Laser à cascade quantique.....	14
<b>Références bibliographiques.....</b>	<b>15</b>
<b><u>chapitre II</u></b>	
<b>II-1 Introduction.....</b>	<b>16</b>
<b>II-2 Les détails des calculs.....</b>	<b>17</b>
<b>II-3 Propriétés des matériaux massifs.....</b>	<b>18</b>
II-3.1 Propriétés structurales du GaAs et AlAs .....	18
II-3.1.1 Introduction.....	18
II-3.1.2 Recherche de la stabilité structurale des matériaux binaires AlAs et GaAs.....	19
II-3.2 Les supers réseaux.....	22
<b>II-4 .Propriétés électroniques.....</b>	<b>24</b>
II-4.1 Les alliages binaires .....	24
II-4.2 Les supers réseaux.....	26
<b>II-5 Densité d'états.....</b>	<b>27</b>
<b>Références bibliographiques.....</b>	<b>32</b>
<b>Conclusion générale.....</b>	<b>33-34</b>



## Liste des figures

---

### Liste des figures

Fig I.1: La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux.....	3
Fig I.2: La structure de bandes des semi-conducteurs type N et P .....	4
Fig I.3: Structure cubique du zinc blende ZnS .....	6
Fig I.4: Structure hexagonale du zinc blende.....	7
Fig I.5: Structure de bandes d'énergie des matériaux.....	8
Fig I.6 : la structure des bandes d'énergie :gap direct et gap indirect.....	8
Fig I.7 : Hétérostructure de Type I .....	9
Fig I.8 : Hétérostructure de Type II .....	10
Fig I.9 :Hétérostructure à Multi-Puits Quantiques avec 3 puits et 4 barrières.....	11
Fig I.10 : super-réseaux.....	12
Figure II-1 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le composé binaire AlAs.....	19
Figure II-2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le composé binaire GaAs.....	20
Figure II-3 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le super réseaux ((GaAs) <sub>1</sub> /(AlAs) <sub>1</sub> ).....	23
Figure II-4 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le super réseaux ((GaAs) <sub>2</sub> /(AlAs) <sub>2</sub> ).....	23
Figure II-5 : La structure de bande le long des lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin pour le composé binaire AlAs dans la phase Zinc-blende.....	25
Figure II-6 : La structure de bande le long des lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin pour le composé binaire GaAs dans la phase Zinc-blende.....	25
Figure II-7 : La structure de bande le long des lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin pour les super réseaux (AlAs) <sub>n</sub> (GaAs) <sub>n</sub> (n=1 et 2) dans la phase Zinc-blende.....	26
Figure II-8 : Densité d'états totale et partielle du binaire GaAs.....	28
Figure II-9 : Densité d'états totale et partielle du binaire AlAs.....	29
Figure II-10 : Densité d'états totale et partielle des super-réseaux (AlAs) <sub>1</sub> /(GaAs) <sub>1</sub> .....	30
FigureII-11: Densité d'états totale et partielle des super-réseaux (AlAs) <sub>2</sub> /(GaAs) <sub>2</sub> .....	31



# Liste des tableaux

---

## Liste des tableaux

<b><u>Tableau 1</u></b> : Extrait du tableau périodique des éléments chimiques .....	5
<b><u>Tableau 2</u></b> :Semi-conducteurs binaires.....	6
<b><u>Tableau 3</u></b> : Paramètre de réseau $a_0$ , le module de compressibilité $B_0$ <i>et sa première dérivée <math>B_0'</math> pour AlAs.....</i>	21
<b><u>Tableau 4</u></b> : Paramètre de réseau $a_0$ , le module de compressibilité $B_0$ <i>et sa première dérivée <math>B_0'</math> pour GaAs.....</i>	21
<b><u>Tableau 5</u></b> : Paramètre de réseau $a_0$ , le module de compressibilité $B_0$ <i>et sa première dérivée <math>B_0'</math> pour <math>(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_n</math> (<math>n=1</math> et <math>2</math>).....</i>	24

# Chapitre *I*

## **I-1 Introduction générale :**

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le silicium. Ce dernier a été l'un des premiers matériaux utilisés (avec le germanium) pour fabriquer des composants électroniques.

Dans les années 1960, une nouvelle famille est apparue, celle des matériaux III-V comme les alliages binaires comme le GaAs, ternaires comme le InGaP, quaternaires comme le AlGaAsP.

Les composants fabriqués à partir de ces semi-conducteurs, surtout les composés binaires comme GaAs qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications dans le domaine de l'optoélectronique et la microélectronique. Tel que les transistors, diodes ...etc.

Les premiers hétérostructures à bases de semi-conducteurs ont été développées durant les années 1970 [1]. Ces dernières constituent la base de la plupart des composants opto-électroniques actuellement sur le marché et leur importance a été reconnue par l'attribution du prix Nobel 2000 de physique à Zhores Alferov et Herbert Kroemer [2].

Les premiers super-réseaux de semi-conducteurs ont été réalisés par Esaki et Tsu consistaient en un empilement de couches ultrafines dont la période était inférieure au libre parcours moyen des électrons [3].

En 1985 les super-réseaux métalliques et semi-conducteurs ont été réalisés par Chang et Giessen [4]. Au début des années 1990, Lijima et al [5] ont réalisé les premiers super-réseaux d'oxydes ferroélectriques.

Plusieurs techniques de croissance ont été utilisées pour réaliser ces super-réseaux . Parmi elles, nous pouvons peut citer l'épitaxie par jets moléculaires (MBE en anglais) ou le dépôt de vapeur chimique métal-organique (MOVCD en anglais) qui ont révolutionné la technologie des semi-conducteurs [6].

La prédiction des propriétés structurales et électronique de ces nouveaux matériaux par ordinateur est devenue actuellement le moyen le plus efficace dans la recherche des sciences des matériaux. Dans ce cadre plusieurs méthodes de calcul ont

été développées et en particulier, les méthodes ab-initio qui sont devenues aujourd'hui un outil de base pour le calcul des propriétés structurales et électroniques des systèmes les plus complexes. Elles sont aussi un outil de choix pour la prédiction de nouveaux matériaux et elles ont parfois pu remplacer des expériences très coûteuses ou même irréalisables en laboratoire. Parmi ces méthodes ab-initio, la méthode linéaire des orbitales muffin-tin (FP-LMTO) est l'une des plus utilisées actuellement, pour le calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Notre travail est organisé en deux chapitres.

Dans le premier chapitre, nous présentons les notions fondamentales liées aux matériaux semi-conducteurs III-V ainsi que les structures à puits quantiques puis les super-réseaux.

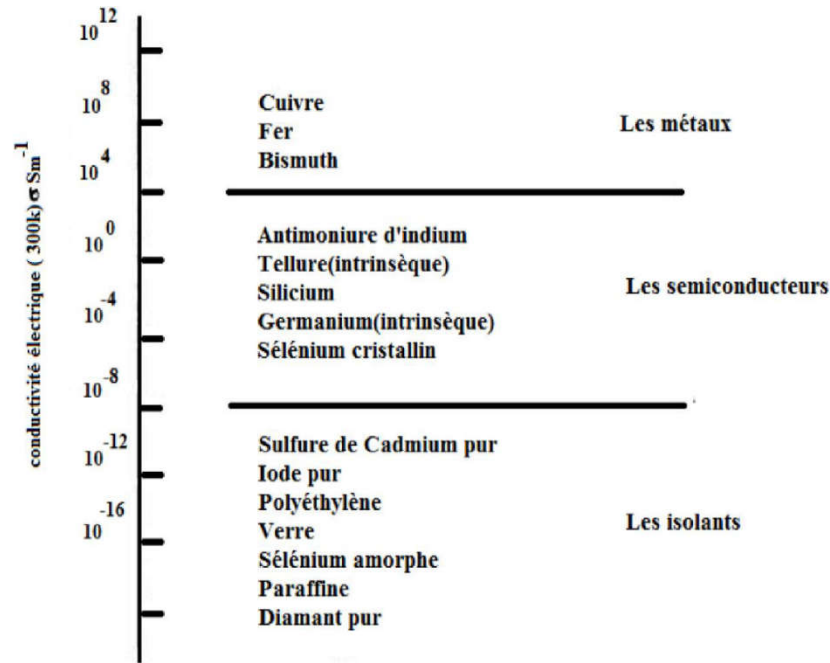
Dans Le deuxième chapitre, seront fournis les résultats obtenus suite aux calculs réalisés par la méthode (FP-LMTO) et seront mises en relief les structures électroniques ainsi les propriétés structurales des binaires GaAs, et AlAs et leurs super-réseaux GaAs/AlAs et (GaAs)<sub>2</sub>/(AlAs)<sub>2</sub>.

Enfin, ce travail est achevé par une conclusion générale qui résume les différents résultats obtenus.

## **I-2 . Generalite sur les semi-conducteurs III-V :**

### **I-2 .1 Définitions et propriétés générales :**

Un semi-conducteur est un matériau dont la conductivité électrique intermédiaire entre celle des conducteurs ( $\sim 10^6 \Omega^{-1} \text{Cm}^{-1}$ ) et des isolants ( $\sim 10^{-22}$  à  $\sim 10^{-14} \Omega^{-1} \text{Cm}^{-1}$ ). Cette conductivité varie sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau) [7-8]. La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux est schématisée sur la figure I.1.



**Fig I.1:** La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux [9].

## I-2.2 Les différents types des semi-conducteurs :

### I-2.2.1 Les semi-conducteurs intrinsèques :

Un semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur dépourvu de toute impureté susceptible de modifier la densité des porteurs. Les électrons de la bande de conduction ne peuvent résulter que de l'excitation thermique des électrons de la bande de valence [8].

### I-2.2.2 Les semi-conducteurs extrinsèques :

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage [8].

Cependant, il y a deux types de dopage :

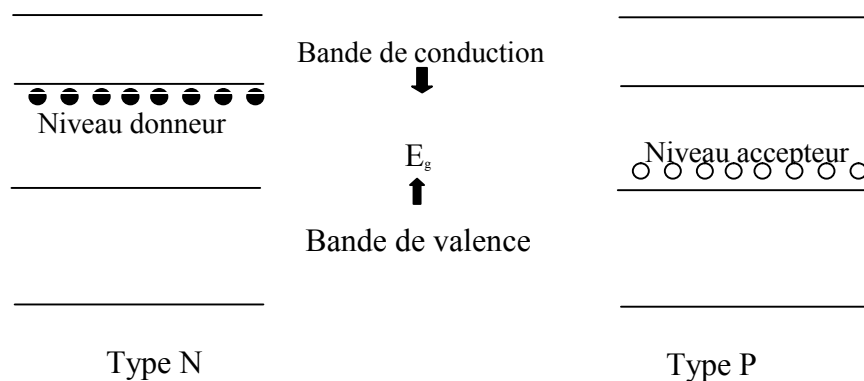
#### ✓ Semi-conducteur de type N

Les dopants de type N sont également connus comme donneurs, car ils sont des éléments ou des composés avec cinq électrons de valence ou plus qui donneront un électron après que les quatre autres forment des liaisons covalentes avec les matériaux intrinsèques dans lequel ils ont été placés.

Dans les matériaux de type N les électrons sont des porteurs majoritaires et les trous des porteurs minoritaires.

### ✓ Semi-conducteur de type P

Les dopants de type P, ou accepteurs sont des éléments ou des composés ayant trois au moins d'électrons de valence et acceptent des électrons. Les matériaux de type P ont des trous comme porteurs majoritaires et des électrons comme porteurs minoritaires. La figure I.2 présente la structure de bandes de deux types N et P.



**Fig I.2:** La structure de bandes des semi-conducteurs type N et P [10].

### I-2.2.3 Classification des semi-conducteurs

Les matériaux semi-conducteurs les plus connus sont des solide inorganiques Cristallins tels que [11]:

Les semi-conducteurs sont classés selon leur composition chimique :

- Des semi-conducteurs élémentaires tels que le Silicium (Si), le Germanium (Ge)
- Semi-conducteurs composés :
  - ✓ binaires : sont composé de deux atome par exemple GaAs, GaN, SiGe.
  - ✓ Ternaires : s'il y a substitution de deux atomes sur l'un des sous réseaux, soit  $A_x A'_{(1-x)} B$ .



- ✓ Quaternaires 1+3: s'il y a substitution de trois atomes sur des sous réseaux, soit  $A_x A'_y A''_{(1-x-y)} B$ .
- ✓ Quaternaires 2+2 : s'il y a substitutions de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit  $A_x A'_{(1-x)} B_y B'_{(1-y)}$ .

### I-2.2.4 Semi-conducteurs binaires

Les semi-conducteurs binaires sont composés de deux atomes dont la somme d'électrons de valence des deux atomes égale à huit [12]. Les semi-conducteurs binaires les plus courants sont les semi-conducteurs composés d'éléments des colonnes III-V et II-VI du tableau périodique [8].

Pour notre étude elle est sur les semi-conducteurs III-V alors sont constitués par l'association d'un élément de la colonne III avec un élément de la colonne V de la classification périodique de Mendeleïev (Tableau 1). L'Arséniure de gallium (GaAs), Phosphure d'indium (InP) sont des exemples.

II	III	IV	V	VI
	<b>B</b> <sup>5</sup>	C <sup>6</sup>	<b>N</b> <sup>7</sup>	O <sup>8</sup>
Mg <sup>12</sup>	<b>Al</b> <sup>13</sup>	Si <sup>14</sup>	<b>P</b> <sup>15</sup>	S <sup>16</sup>
Zn <sup>30</sup>	<b>Ga</b> <sup>31</sup>	Ge <sup>32</sup>	<b>As</b> <sup>33</sup>	Se <sup>34</sup>
Cd <sup>48</sup>	<b>In</b> <sup>49</sup>	Sn <sup>50</sup>	<b>Sb</b> <sup>51</sup>	Te <sup>52</sup>
Hg <sup>80</sup>	<b>Tl</b> <sup>81</sup>	Pb <sup>82</sup>	<b>Bi</b> <sup>83</sup>	Po <sup>84</sup>

Tableau 1: Extrait du tableau périodique des éléments chimiques.

Eléments III-V	Eléments II-VI
<b>GaAs</b>	<b>CdS</b>
<b>GaP</b>	<b>HgTe</b>
<b>GaSb</b>	<b>CdTe</b>
<b>InAs</b>	<b>ZnTe</b>
<b>InP</b>	<b>ZnS</b>
<b>InSb</b>	
<b>AlAs</b>	

Tableau 2 : Semi-conducteurs binaires

### **I-2.3 Propriétés structurales :**

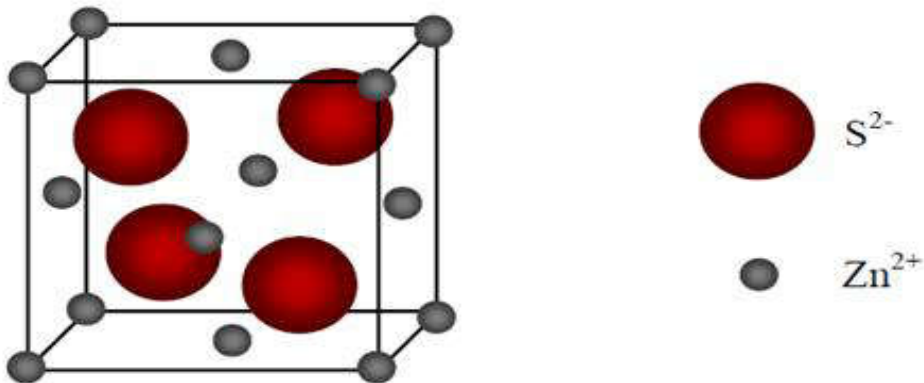
Du point de vue cristallographique, les semi-conducteurs III-V sont connus sous plusieurs formes cristallines :

#### **I-2.3.1 Structure cubique du zinc blende (ZnS):**

Cette structure est obtenue en plaçant les atomes de Zn et de S sur le réseau Diamant de tel sort que chaque atome possède quatre atomes de l'autre espèce comme plus proche voisin. Elle peut être vue comme deux structures CFC décalées l'une par rapport à l'autre d'un quart de diagonale du cube, la figure I.3 présente Structure cubique du zinc blende. Les positions des atomes sont [7-13] :

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

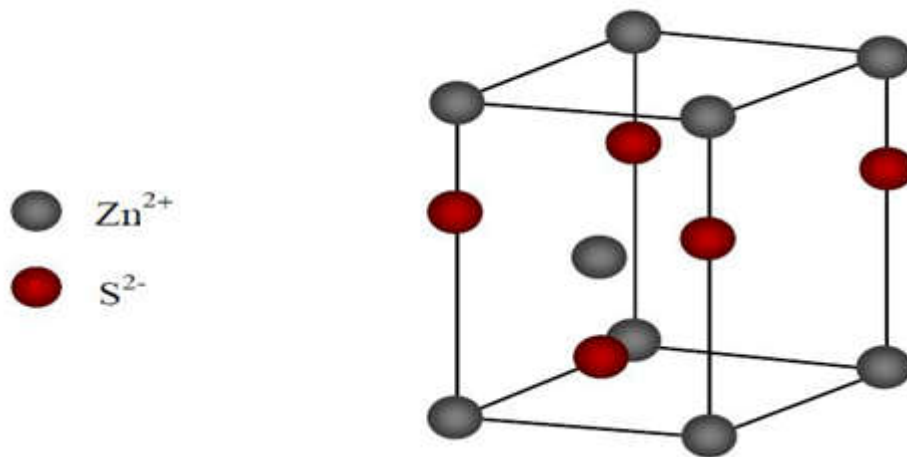
$$\text{S} : (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) ; (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) ; (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}) ; (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}).$$



**Fig I.3:** Structure cubique du zinc blende ZnS .

### I-2 .3.2 Structure hexagonale du zinc blende (Wurtzite) :

La structure hexagonale de zinc blende possède des liaisons covalentes tétraédriques comme la structure cubique du diamant [7-13]. La structure de wurtzite est représentée sur la figure I.4.



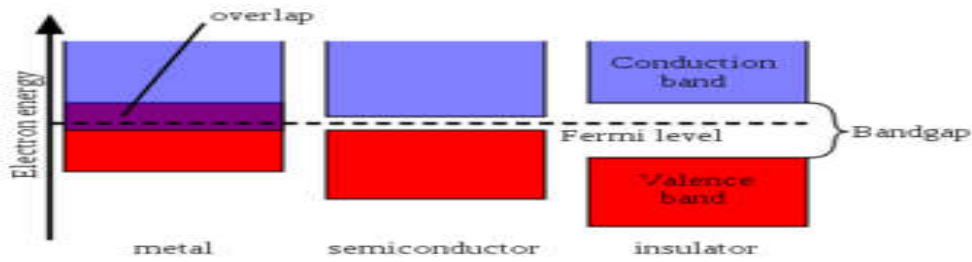
**Fig I.4:** Structure hexagonale du zinc blende .

### I-2.4 Propriétés électroniques

#### ✓ La notion de bandes d'énergie :

Chaque matériau semi-conducteur se caractérise par sa structure de bande [7] :

- La bande de valence est la bande qui correspond à la bande d'énergie la plus élevée entièrement remplie d'électrons.
- La bande de conduction : c'est défini 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.5 présente la structure de bande d'énergie.

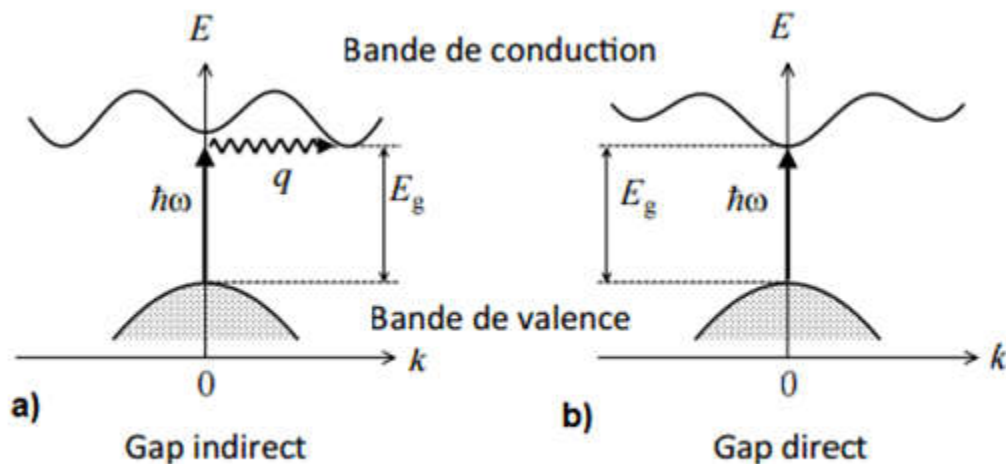


**Fig I.5:** Structure de bandes d'énergie des matériaux .

✓ **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.6 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  $k$ . Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de  $k$  : On dit que le Semi-conducteur a un gap direct. Tandis que, si ce maximum et ce minimum correspondent différentes valeurs de  $k$  le semi-conducteur a un gap indirect [8].



**Figure I.6 :** La structure des bandes d'énergie: gap direct et gap indirect [14].

### ***I-3 Généralité sur les hétérostructures***

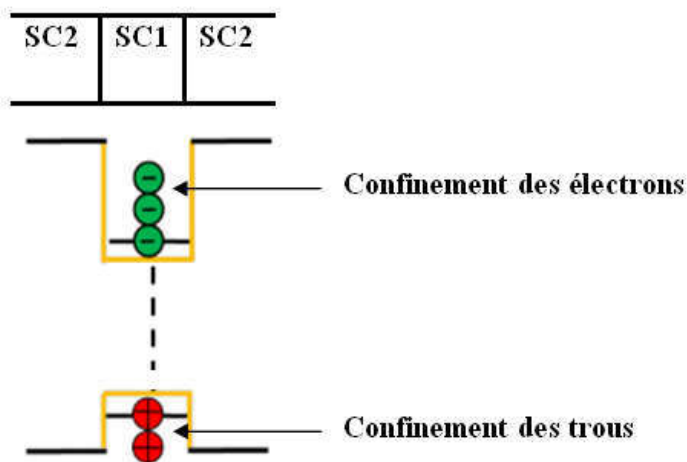
#### **I-3-1 Hétérostructures à Puits Quantiques**

Une hétérostructure à puits quantiques est formée par une succession de matériaux différents, au moins deux types de matériaux dans la configuration la plus simple :

- un matériau à faible largeur de bande interdite qui joue le rôle de puits quantique (son épaisseur doit être inférieure à  $\lambda$  de De Broglie) ;
- le deuxième matériau à forte largeur de bande interdite qui joue le rôle de barrière.

#### **I-3-2 Hétérostructures de Type I, de Type II**

##### **A- Hétérostructures de Type I :**

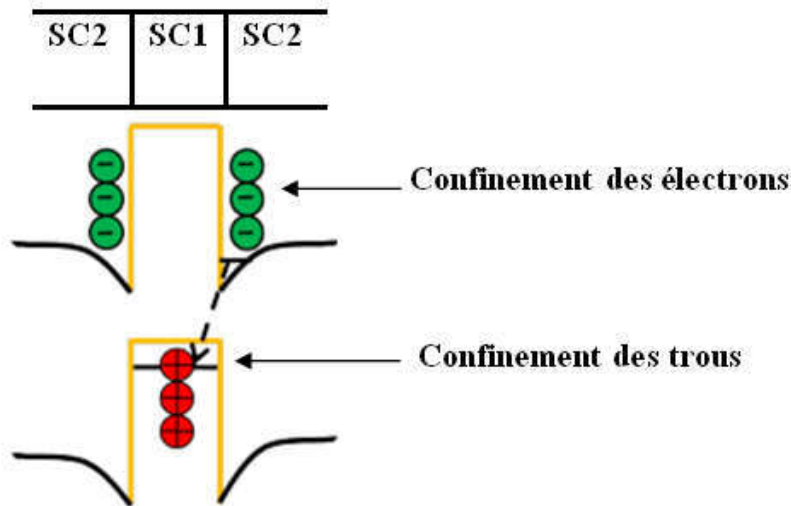


**Fig I.7**

*Hétérostructure de Type I*

Pour que l'hétérostructure soit de type I, il faut que les électrons et les trous soient confinés dans le même matériau qui forme le puits quantique.

La principale propriété de l'hétérostructure de type I c'est que les transitions électroniques entre les états de bandes de valence et de conduction sont des **transitions directes**.

**B-Hétérostructures de Type II :**

**Fig I.8**  
Hétérostructure de Type II

Une hétérostructure est dite de type II. Si les électrons et les trous ne sont pas confinés dans le même matériau :

- le matériau SC1 joue le rôle de puits quantique pour les électrons et de barrière de potentiel pour les trous,
- Le matériau SC2 joue le rôle de puits quantique pour les trous et de barrière de potentiel pour les électrons ;

Cette hétérostructure de type II diffère fondamentalement de celle de type I, en ce sens que les électrons et les trous ne sont pas confinés au même endroit et donc il y aura une conséquence importante : **les transitions seront indirectes** .

**I-3-3 Hétérostructures à Simple Puits Quantique :**

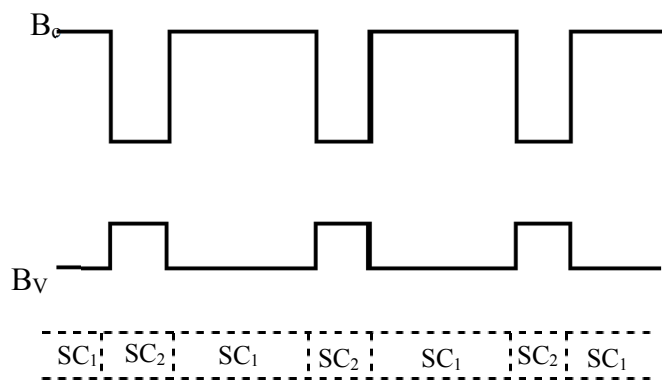
Ces hétérostructures sont formées par un matériau qui joue le rôle du puits quantique qui confine les porteurs de charges : les électrons et les trous et un autre matériau qui joue le rôle de barrières de part et d'autre de ce puits quantique.

En principe, une hétérostructure à simple puits quantique est plutôt de type I; les

électrons et les trous sont confinés dans le même matériau. Cependant, par abus de langage, même des hétérostructures de type II continuent à être appelées hétérostructures à simple puits quantiques, alors que les électrons et les trous ne sont pas confinés dans le même matériau.

**I-3-4 Hétérostructures à Multi-Puits Quantiques :**

Les hétérostructures à Multi-Puits Quantiques sont formées par  $n$  puits quantiques séparés par  $n+1$  barrières. On prend un cas plus simple comme une telle hétérostructure est représenté sur la figure I-9 avec 3 puits et 4 barrières.



**Fig I.9**

*Hétérostructure à Multi-Puits Quantiques avec 3 puits et 4 barrières*

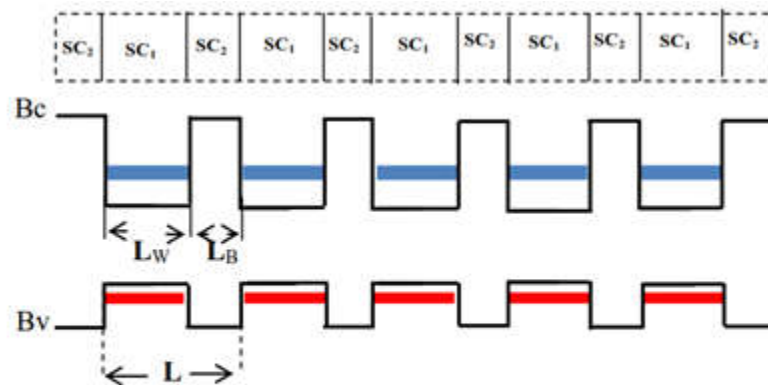
Là aussi le comportement physique de ce type d'hétérostructure dépend des largeurs des barrières  $L_{B1}$  et  $L_{B2}$  insérées entre les différents puits quantiques et des largeurs de ces même puits  $L_{W1}$ ,  $L_{W2}$  et  $L_{W3}$  :

Si  $L_{B1}=L_{B2}$  et  $L_{W1}=L_{W2}=L_{W3}$ , on a alors affaire à une hétérostructure symétrique.

Deux cas intéressants peuvent apparaître :

- Si en plus les largeurs de barrière vérifient les conditions de quantification :  $L_{B1} > \lambda$  de Broglie et  $L_{B2} > \lambda$  de Broglie, alors les 3 puits quantiques sont totalement découplés ; en d'autres termes ils sont indépendants l'un de l'autre. De telles hétérostructures sont intéressantes pour les Lasers à transitions interbandes directes.
- Si par contre  $L_{B1} < \lambda$  de Broglie et  $L_{B2} < \lambda$  de Broglie, alors les 3 puits quantiques sont couplés ; en d'autres termes ils sont dépendants l'un de l'autre. Il peut en résulter là aussi un effet tunnel résonant avec les mêmes implications que pour l'hétérostructure à double puits quantique.

### I-3-5 Super-réseaux :



**Fig I.10** : Super-réseau montrant l'élargissement des niveaux d'énergies fondamentaux en "mini-bandes" : une mini-bande de conduction pour les électrons en bleu et une mini-bande de valence pour les trous en rouge

Un super-réseau (Figure I.10) est une hétérostructure à Multi-Puits Quantique particulière, dans laquelle les largeurs de barrières et les largeurs de puits successifs vérifient un certain nombre de conditions :



- 1-  $L_{B1} = L_{B2} = \dots = L_{B(n-1)} = L_{Bn}$ .
- 2-  $L_{Bi} \ll \lambda$  de Broglie pour toutes les barrières, c'est-à-dire que tous les puits sont très fortement couplés.
- 3-  $LW_1 = LW_2 = \dots = LW_{(n-1)} = LW_n$
- 4-  $LW_i \ll \lambda$  de Broglie pour tous les Puits, i.e. que tous les puits sont quantifiés ;
- 5-  $LW_1 + L_{B1} = LW_2 + L_{B2} = \dots = LW_n + L_{Bn} = L$ ; c'est la condition de périodicité du système où  $L$  est la période du super-réseau.

Il en résulte une série de puits couplés avec une super-périodicité qui fait ressembler ce système à un réseau de puits couplés d'où le nom de 'super-réseau'.

Alors qu'un réseau cristallin est formé par la distribution périodique des atomes dans l'espace qui se traduit par une structure de bande et, en particulier, une bande de conduction pour les électrons "libres" et une bande de valence pour les trous "libres".

Le Super-réseau est donc le résultat d'une succession périodique de puits quantiques fortement couplés.

#### **I-4 Les applications des hétérostructures (super-réseau) :**

Les puits quantiques et les super-réseaux ont des nombreuses applications en électronique (diode tunnel résonnante...) et en optique (lasers, détection ou émission infrarouge...), les diodes laser que l'on utilise quotidiennement dans la lecture de disques laser (CD, CD-Rom ou DVD et des codes à barres). Étant donné qu'on peut ajuster presque « à la demande » les propriétés physiques de ces matériaux, nous allons citer brièvement quelques applications :

##### **I.4.1. La jonction p-n polarisée en direct (la diode):**

La diode électroluminescente, ou LED (Light Emitting Diode), est une jonction p-n polarisée en direct, est réalisée à partir de semi-conducteurs dans lesquels les recombinaisons des porteurs excédentaires sont essentiellement radiatives. Plusieurs possibilités de recombinaison s'offrent aux trous et aux électrons qui traversent la zone de charge d'espace. Ainsi, la plupart des recombinaisons radiatives s'effectuent dans

ces zones neutres n ou p. Elles dépendent de la densité des porteurs injectés dans ces zones et de leur longueur de diffusion. Les taux d'injections sont définis par  $\gamma_n$  et  $\gamma_p$ , respectivement pour les électrons et les trous [15].

#### **I.4.2. Structure MIS (Métal-Isolant-Semiconducteur) à effet tunnel et électroluminescence :**

Une structure MIS à effet tunnel est constituée d'une fine couche isolante, de quelques dizaines d'Å d'épaisseur, séparant le substrat semiconducteur d'une électrode métallique. Si le métal est porté à une tension positive suffisante des électrons de la bande de valence peuvent franchir par effet tunnel la barrière isolante, ce qui correspond à une injection de trous dans la bande de valence du semiconducteur. Ce trou peut se recombiner avec un électron de la bande de conduction [15].

#### **I.4.3. Laser à cascade quantique :**

Le laser à puits quantique est un laser semi-conducteur utilisant un seul type de porteur, basé sur deux phénomènes fondamentaux de la mécanique quantique ; l'effet tunnel et le confinement quantique [16].

# Références bibliographiques

- [1]. L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. 14, 61(1970).
- [2]. G.Renaud, Surf. Sci. Rep.,32, Nos 1 et 2, pp. 1-90, (1998).
- [3]. Gressen et al.
- [4]. L. L. Chang and B. C. Giessen, "Synthetic Modulated Structures" edited by . Academic Press, (1985).
- [5]. K. Iijima, T. Terashima, Y. Bando, K. Kamigaki and H. Terauchi, App Phys. 72.. 2840-2845 (1992).
- [6]. S.M. Sze, "Semiconductor devices: Physics and technology", 2n edition, John Wiley and Sons (2001).
- [7] C. Kittel, physique de l'état solide, édition Dunod ,Paris (1998).
- [8] H. Mathieu, physique des semiconducteurs et des composants électroniques, édition Dunod .Paris (2009).
- [9] Francis Lévy ,physique et technologie des semiconducteurs ,Presses polytechnique et universitaire romandes CH-1015,Suisse(1995).
- [10] J. Pierre Colinge ,F.Van de Wiele ,physique des dispositifs semiconducteurs ,De Boeck  
.wesmael , Département De Boeck Université Paris ,Bruxelles (1996).
- [11] M. Beaicha ,mémoire de Magister ,Université de Colonel Hadj Lakhdar ,Batna(2007).
- [12] O. Bahi,mémoire de Master Académique ,Université Kasdi-Merbah,Ouargla(2014).
- [13] S. Boucenna, memoire de Magister ,Université Farhat Abbas-Setif(2010).
- [14]: J.Marc Frigerio Institut des NanoSciences de Paris. Ecole d'automne "MODELISATION" (2004).
- [15] B. Mombelli, Processus optique dans les solides, MASSON, (1995) 62-65.
- [16] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho, Quantum Cascade Laser, Science **264** (1994) 553

# Chapitre *II*

## II-1 Introduction

Le monde des semi-conducteurs est maintenant dominé, en termes de marché, par de nouvelles familles des matériaux semi-conducteurs. Les composants fabriqués à partir de ces matériaux, qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications hyperfréquences, l'électronique de puissance, mais surtout dans le domaine de l'optoélectronique [1,2]. Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs III-V constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux. Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les s e m i - c o n d u c t e u r s III-V interviennent dans presque tous les équipements électriques et vibrationnelles.

Au cours des trois dernières décennies, des progrès fabuleux a les techniques de croissance épitaxiales des films minces ont conduit à la fabrication des structures de semi-conducteurs en couches avec des épaisseurs de couche atteignant des dimensions atomiques [3]. Ces structures appelées hétérostructures ont eu beaucoup d'attention en raison de leur possibles applications dans les dispositifs électroniques et optiques [4]. Un super-réseau est une hétérostructure périodique formée par deux types des matériaux semi-conducteurs, un type qui agit comme un puits quantique de largeur  $L_w$  et l'autre agissant telle une barrière quantique de largeur  $L_b$ . Les structures sont cultivées par une alternance de puits et de barrières. Le super-réseau est donc une structure périodique de période  $d=L_w+L_b$ .

La périodicité artificielle créée dans les super-réseaux peut conduire à l'adaptation de certaines propriétés des matériaux pour des applications dans des domaines tels que l'optoélectronique [5, 6]. La présence de ces couches ultraminces conduit à l'effet de taille quantique lorsque les dimensions physiques des couches sont comparables à la longueur d'onde de De Broglie des porteurs de charges [7].

L'arséniure de gallium GaAs occupe une place prépondérante. Ce semi-conducteur constitue en effet le matériau de base de la plupart des dispositifs électroniques ultrarapides, que ce soit en électronique digitale ou dans les applications à très haute fréquence. L'arséniure d'aluminium AlAs est un semi-conducteur à gap indirect, il est l'un des plus importants matériaux en électronique et optoélectroniques en raison du fait qu'il est fréquemment incorporé dans les hétérostructures à base de GaAs [8].

E. Marega Jr et al [9], avaient utilisé la technique de l'épitaxie par jet moléculaire (MBE) pour synthétiser la structure GaAs/AlAs (2 nm/2 nm) super-réseaux.

Afin d'exploiter pleinement des propriétés de GaAs, AlAs et leur super-réseaux  $(\text{GaAs})_n / (\text{AlAs})_n$  dans les applications technologiques éventuelles, une étude théorique des propriétés structurales et électroniques est nécessaire. Dans ce sens, nous avons adopté la méthode du premier principe, méthode linéaire des orbitales muffin-tin (FP-LMTO), pour le calcul des propriétés structurales et électroniques des matériaux massifs GaAs, AlAs et de leur super-réseaux  $(\text{GaAs})_n / (\text{AlAs})_n$  (n nombre de monocouches; n = 1 et 2).

## **II-2 Les détails des calculs :**

Les calculs ont été effectués dans ce travail au moyen de la méthode FP-LMTO, telle qu'implémentée dans le code informatique Lmrtart [10,11]. Cette méthode est basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), qui est une approche universelle sur la mécanique quantique. On a effectué des calculs semi-relativistes (l'effet de spin-orbite est négligé). Le potentiel d'échange et de corrélation est traité dans le cadre des approximations suivantes :

- l'approximation du gradient généralisé (GGA : Generalized Gradient Approximation) paramétrisée par Perdew, Burke et Ernzerhop [12].

### II-3 Propriétés des matériaux massifs :

#### II-3.1 Propriétés structurales du GaAs et AlAs :

##### II-3.1.1 Introduction :

La détermination des propriétés structurales est une étape très importante pour avoir de plus amples informations sur les propriétés des matériaux à étudier du point de vue microscopique, ceci avant d'accéder à d'autres propriétés physiques (électroniques, optiques, etc....)

L'étude des propriétés structurales des matériaux GaAs et AlAs est essentielle pour déterminer les paramètres de structure du matériau à l'équilibre statique, à savoir les paramètres de maille  $\mathbf{a}_0$ , le module de compression  $\mathbf{B}$  et sa dérivée  $\mathbf{B}'$  à la phase la plus stable Zinc-Blende.

La détermination de ces paramètres nous permet d'accéder par la suite aux autres propriétés électroniques. Les calculs sont effectués en utilisant la méthode linéaire des orbitales muffin-tin (FP-LMTO), avec l'approximation GGA.

Les propriétés structurales ont été déterminées en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction du volume par l'équation de Birch [13].

$$E(V) = E_0 + \frac{9}{8} B_0 V_0 \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 + \frac{9}{16} B_0 (B'_0 - 4) V_0 \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 + \sum_{n=4}^N \gamma_n \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^n$$

Où :

$E_0$ : l'énergie totale.

$B_0$ : le module de compression.

$V_0$  : le volume à l'équilibre.

-Le module de compression est déterminé au point minimal de la courbe E(V) par la relation :

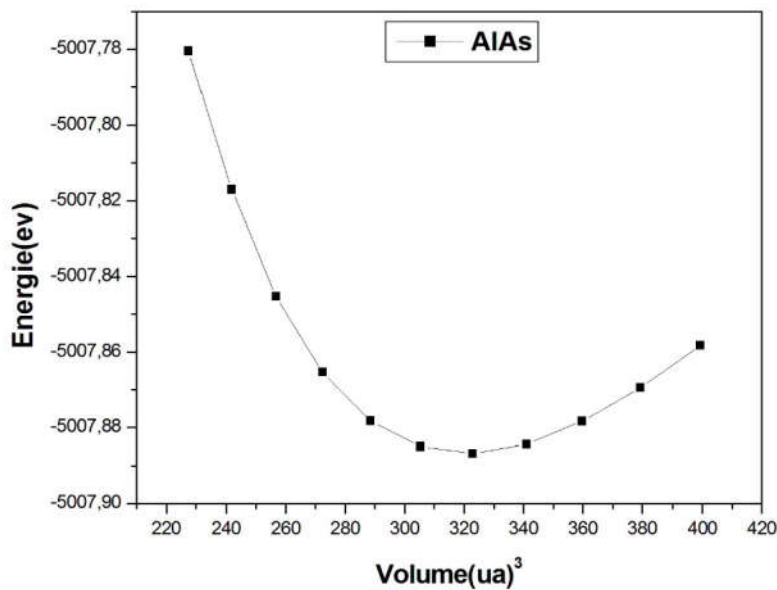
$$B_0 = V_0 \frac{\partial^2 E}{\partial V^2}$$

B' : la dérivée du module de compressibilité déterminé par la relation :

$$E(v) = E_0 + \frac{B_0}{B'(B'-1)} \left[ \left( \frac{v_0}{v} \right)^{B'} - v_0 \right] + \frac{B_0}{B} (v - v_0)$$

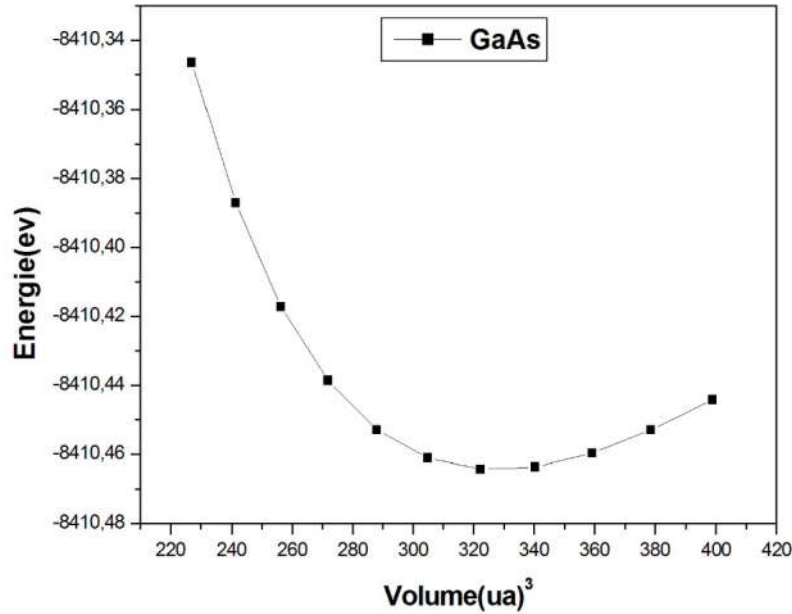
### II.3.1.2 Recherche de la stabilité structurale des matériaux binaires AlAs et GaAs :

Les calculs des propriétés structurales ont été effectués dans la phase Zinc-blende en utilisant l'approximation de la densité locale (GGA). L'énergie totale des composés binaires AlAs et GaAs a été minimisée et sa variation en fonction du volume élémentaire est donnée dans les figures.



FigureII-1 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le composé binaire AlAs





**Figure II-2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le composé binaire GaAs**

La majorité des matériaux semi-conducteurs III-V ont une structure de réseau cristallin de zinc-blende. La structure zinc-blende se compose de deux sous-réseaux cubiques centrés (CFC) interpénétrés. Le 1<sup>er</sup> réseau contient des atomes du groupe III et l'autre contenant des atomes du groupe V. Les deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre par  $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$  où  $a$  est la constante de réseau cubique. Par conséquent, le volume unitaire pour les composés binaires est  $V = \frac{1}{4} a^3$ .

Les résultats des paramètres structuraux à l'équilibre tels que la constante de réseau  $a_0$ , le module de compressibilité  $B_0$  et sa première dérivée  $B_0'$  sont regroupés dans les deux tableaux 3 et 4.

**Tableau 3** : Paramètre de réseau  $a_0$ , le module de compressibilité  $B_0$  et sa première dérivée  $B_0'$  pour AlAs

Les paramètre	Notre travail	Autre travail	reference
$a_0(\text{Å})$	<b>5.755</b>	<b>5.734</b>	[14].
$B_0(\text{GaP})$	<b>64.394</b>	<b>66.5</b>	[14].
$B_0'$	<b>3.982</b>	<b>4.184</b>	[14].

**Tableau 4** : Paramètre de réseau  $a_0$ , le module de compressibilité  $B_0$  et sa première dérivée  $B_0'$  pour GaAs.

Les paramètre	Notre travail	Autre travail	reference
$a_0(\text{Å})$	<b>5.791</b>	<b>5.748</b>	[14].
$B_0(\text{GaP})$	<b>56.161</b>	<b>60.8</b>	[14].
$B_0'$	<b>4.631</b>	<b>4.800</b>	[14].

En général, il y a une petite différence entre nos résultats et les données disponibles mentionnées dans les tableaux 3 et 4, qui peuvent provenir des différentes méthodes de structure électronique basées sur la densité fonctionnelle

### II-3.2 Les super-réseaux :

Un super-réseau est une structure artificielle composée de couches alternées de deux matériaux semi-conducteurs différents, formant un arrangement périodique de puits et de barrières quantiques. Dans notre cas, **AlAs** jouent le rôle de la barrière alors que **GaAs** jouent le rôle du puit pour les deux super-réseaux **(GaAs)<sub>1</sub>/(AlAs)<sub>1</sub>** et **(GaAs)<sub>2</sub>/(AlAs)<sub>2</sub>**.

Pour étudier les propriétés structurales et électroniques des super-réseaux **(GaAs)<sub>n</sub>/(AlAs)<sub>n</sub>** pour les deux configurations (**n=1 et 2**), nous avons utilisé la même méthode employée pour les binaires. C'est la méthode du potentiel total des orbitales muffin-tin linéaire (FP-LMTO), en traitant l'énergie d'échange et de corrélation par l'approximation de gradient généralisé (GGA).

Pour les super-réseaux **(GaAs)<sub>n</sub>/(AlAs)<sub>n</sub>**, on prend [1 0 0] comme axe de croissance (on considère que **x** est perpendiculaire aux couches qui sont parallèles aux axes **y** et **z**). Par conséquent, le super-réseau a une symétrie tétragonale où  $b = c \neq a$  tel que  $b = c = \frac{\sqrt{2}}{2}a$  pour  $n=1$ ,  $b = c = \frac{\sqrt{2}}{4}a$  pour  $n=2$ . Dans ce cas le volume élémentaire pour les deux configurations est  $V_{1,1} = \frac{1}{2}a^3$ ,  $V_{2,2} = \frac{1}{8}a^3$ .

L'énergie totale super-réseaux **(GaAs)<sub>n</sub>/(AlAs)<sub>n</sub>** pour chaque valeur de  $n=1$  et  $2$  a été minimisée et sa variation en fonction du volume élémentaire est donnée dans les figures II-3 et II-4.

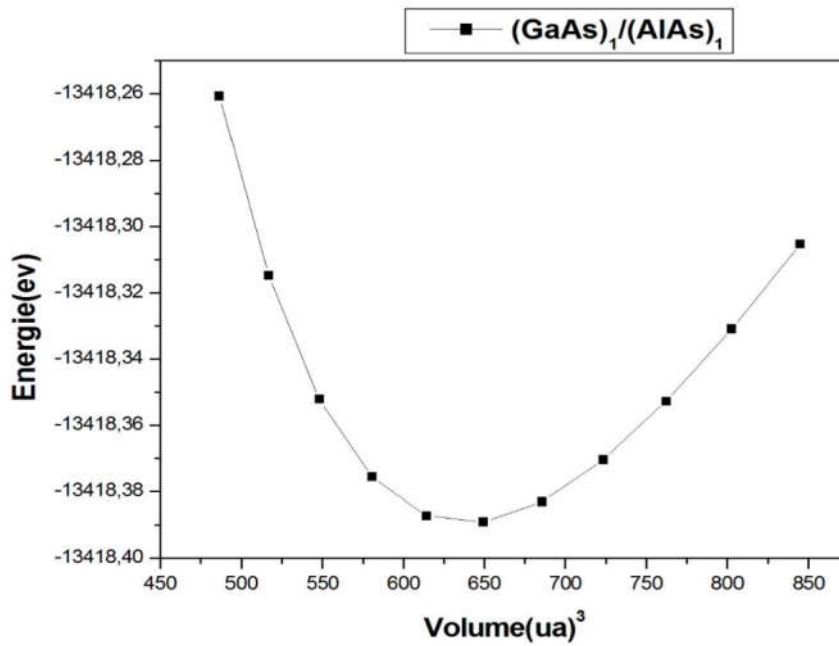


Figure II-3 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le super-réseau  $((\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1)$

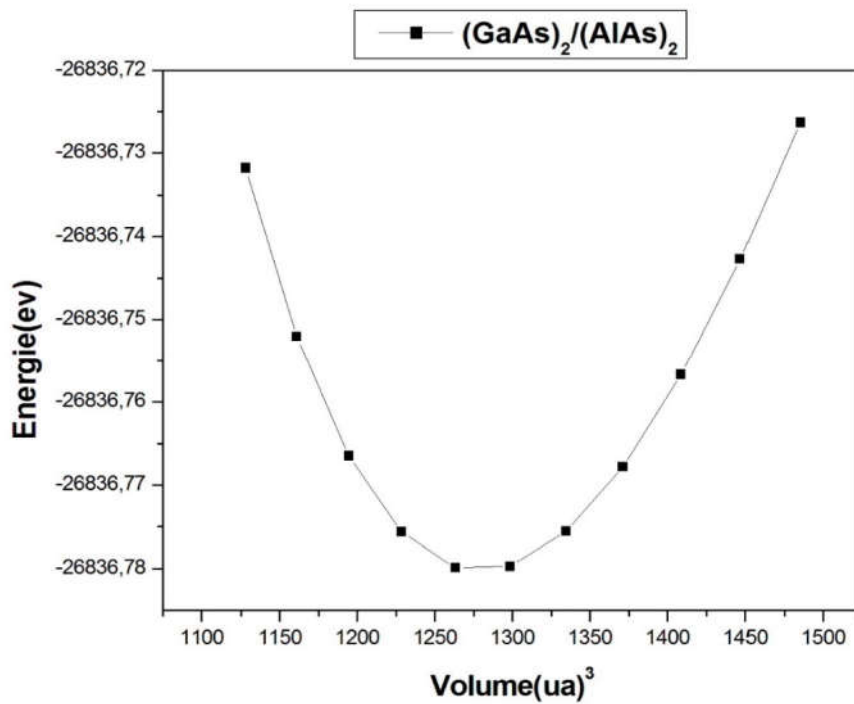


Figure II-4: Variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire pour le super-réseau  $((\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2)$

Après interpoler les valeurs obtenues à l'aide du même modèle de Birch [15], les résultats des paramètres structuraux à l'équilibre tels que la constante du réseau  $a_0$ , le module de compressibilité  $B_0$  et sa première dérivée  $B_0'$  pour les super-réseaux  $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$  et  $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$  sont donnés dans le tableaux 5.

**Tableau 5 : Paramètre de réseau  $a_0$ , le module de compressibilité  $B_0$  et sa première dérivée  $B_0'$  pour  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  ( $n=1$  et  $2$ )**

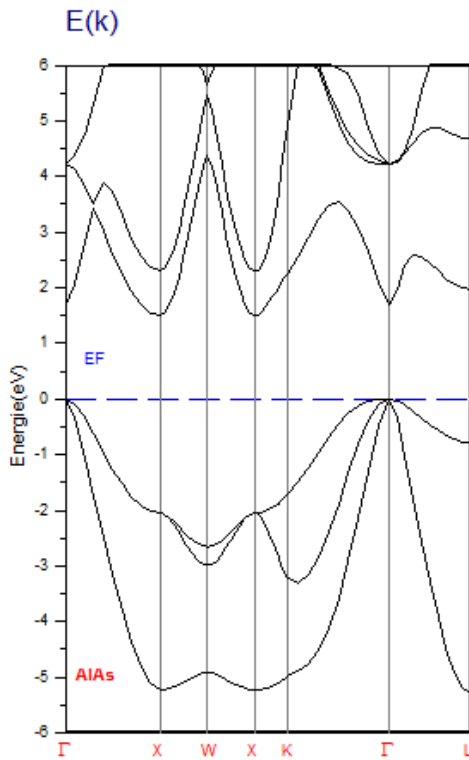
<b>n</b>	<b><math>a_0(\text{Å})</math></b>	<b><math>B_0(\text{GaP})</math></b>	<b><math>B_0'</math></b>
<b>1</b>	<b>5.744</b>	<b>62.63</b>	<b>4.522</b>
<b>2</b>	<b>11.489</b>	<b>63.21</b>	<b>4.623</b>

## **II-4. Propriétés électroniques**

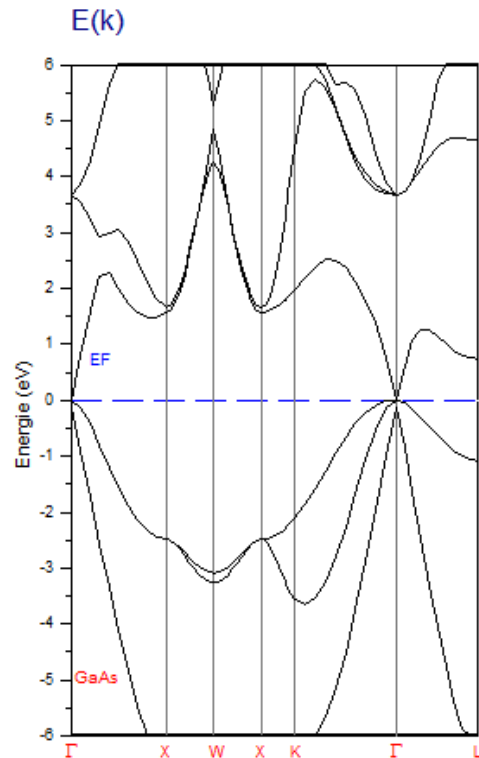
### **II-4.1 Les alliages binaires :**

Des informations considérables peuvent être tirées de la structure électronique des matériaux tels que l'énergie et le type de la bande interdite. Ces deux propriétés peuvent être déterminées par le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction. La différence entre les deux valeurs de l'énergie correspondantes aux deux points est l'énergie du gap. Le type du gap est aussi une propriété électronique reliée aux ces deux points. Si les deux points sont situés au même point de haute symétrie, le gap est dit direct et si les deux points sont situés aux deux points différents, le gap est indirect.

Les structures de bandes calculées le long des lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin dans la phase zinc-blende pour les composés binaires GaAs et AlAs et sont données dans les figures II-5et II-6.



**Figure II-5 :** La structure de bande le long des lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin pour le composé binaire AlAs dans la phase Zinc-blende



**FigureII- 6:** La structure de bande le long des lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin pour le composés binaire GaAs dans la phase Zinc-blende

Dans les figures II-5,II-6, les structures de bandes montrent que les composés binaires ont des propriétés électroniques différentes. L'arséniure d'aluminium (AlAs) est un semi-conducteur avec une énergie de bande interdite 1.49 eV . Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction pour le gap est indirect ( $\Gamma$ -X) ce qui est en bon accord avec les résultats cités dans les références [14]

Par contre, la structure de bande du L'arséniure de gallium ( GaAs) montre le comportement semi-métallique de ce dernier avec une énergie de gap  $E_g \approx 0$  eV .

### II-4.2 Les super- réseaux :

Dans notre cas, nous avons combiné le AlAs qui est semi-conducteur avec le GaAs qui a un caractère semi-métallique pour former le super-réseau  $(AlAs)_n/(GaAs)_n$ .

Les structures de bandes obtenues des super-réseaux étudiés sont présentées dans les figures II-7.

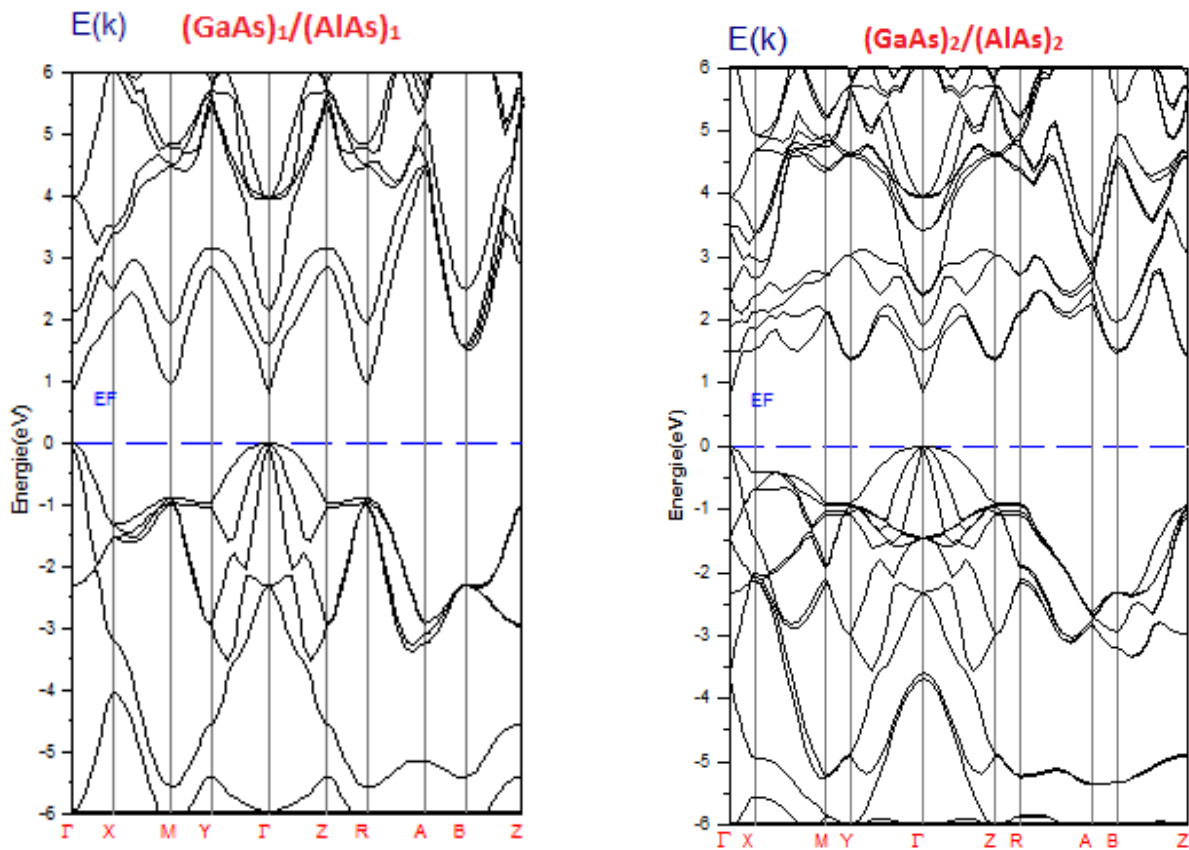


Figure II-7 : La structure de bandes le long des lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin pour les super- réseaux  $(AlAs)_n/(GaAs)_n$  ( $n=1$  et  $2$ ) dans la phase Zinc-blende

La figure II-7 indique clairement le comportement semi-conducteur des nouveaux matériaux  $(AlAs)_n/(GaAs)_n$  de gap direct ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) pour  $n = 1$  et  $2$ . Selon les deux configurations des super réseaux  $(AlAs)_1/(GaAs)_1$  et  $(AlAs)_2/(GaAs)_2$  d'énergie de gap est de  $0.82\text{eV}$  et  $0.85\text{ eV}$  respectivement, il est prévu que  $E_g$  est aussi dépend du nombre de couche  $n$ ,

### **II-5 Densité d'états :**

La densité d'états DOS (Density Of States) apparaît dans des nombreux domaines de la physique, par exemple, l'analyse des fonctions diélectriques, les propriétés de transport ou encore le spectre de photo émission qui exigent la connaissance de DOS.

Les figures de ( II-08 au II-11 ) montrent la densité totale et partielle des états dans lesquels nous expliquons la contribution des différents états des atomes As, Ga, Al dans les alliages binaires GaAs et AlAs et les super-réseaux **(GaAs)<sub>1</sub>/(AlAs)<sub>1</sub>** et **(GaAs)<sub>2</sub>/(AlAs)<sub>2</sub>**. La densité totale d'états des composés étudiés est une contribution d'états différents d'orbitales 4s4p (atomes de Ga), 4s4p (atomes de As) et 3s3p (atomes de Al).



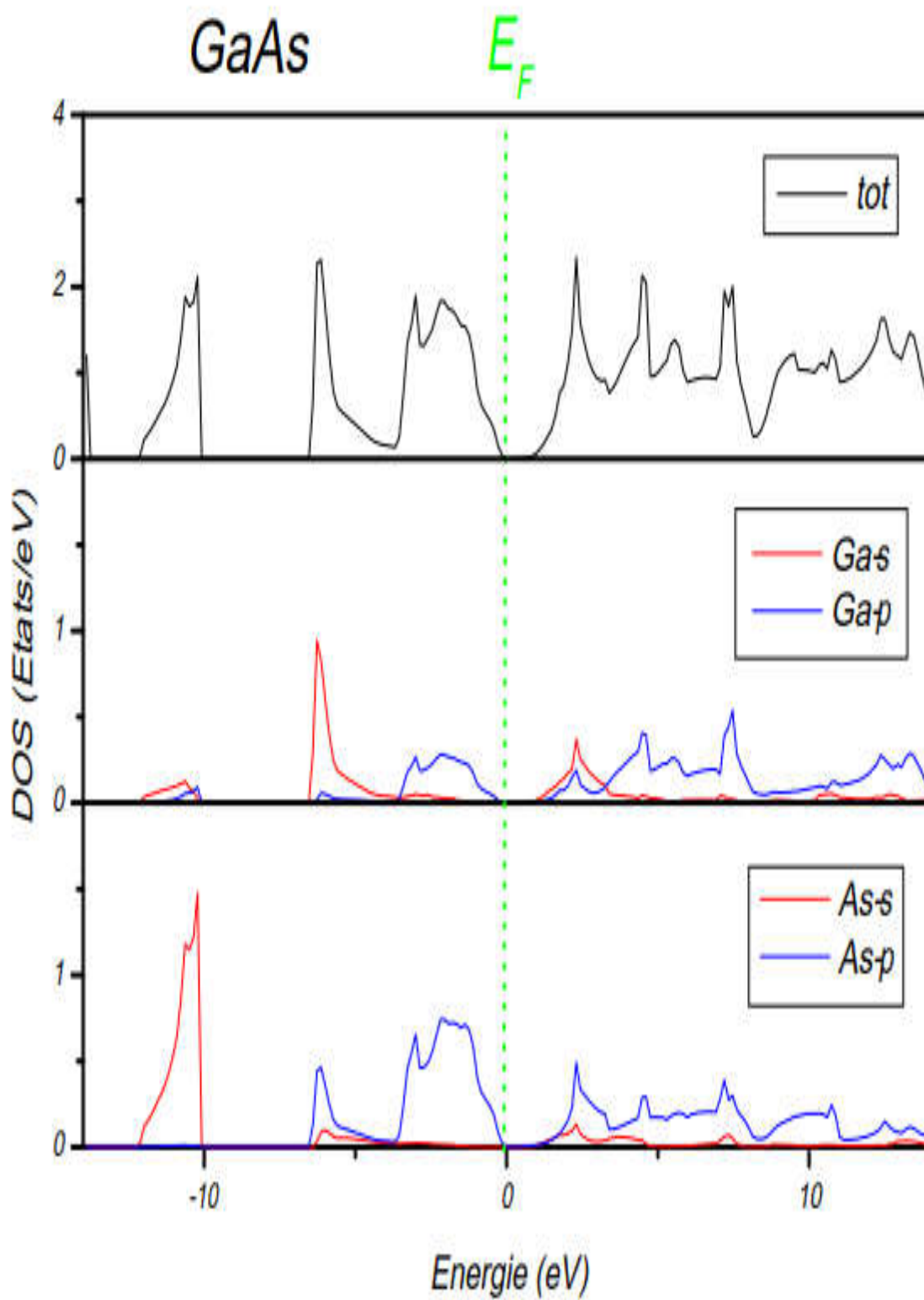
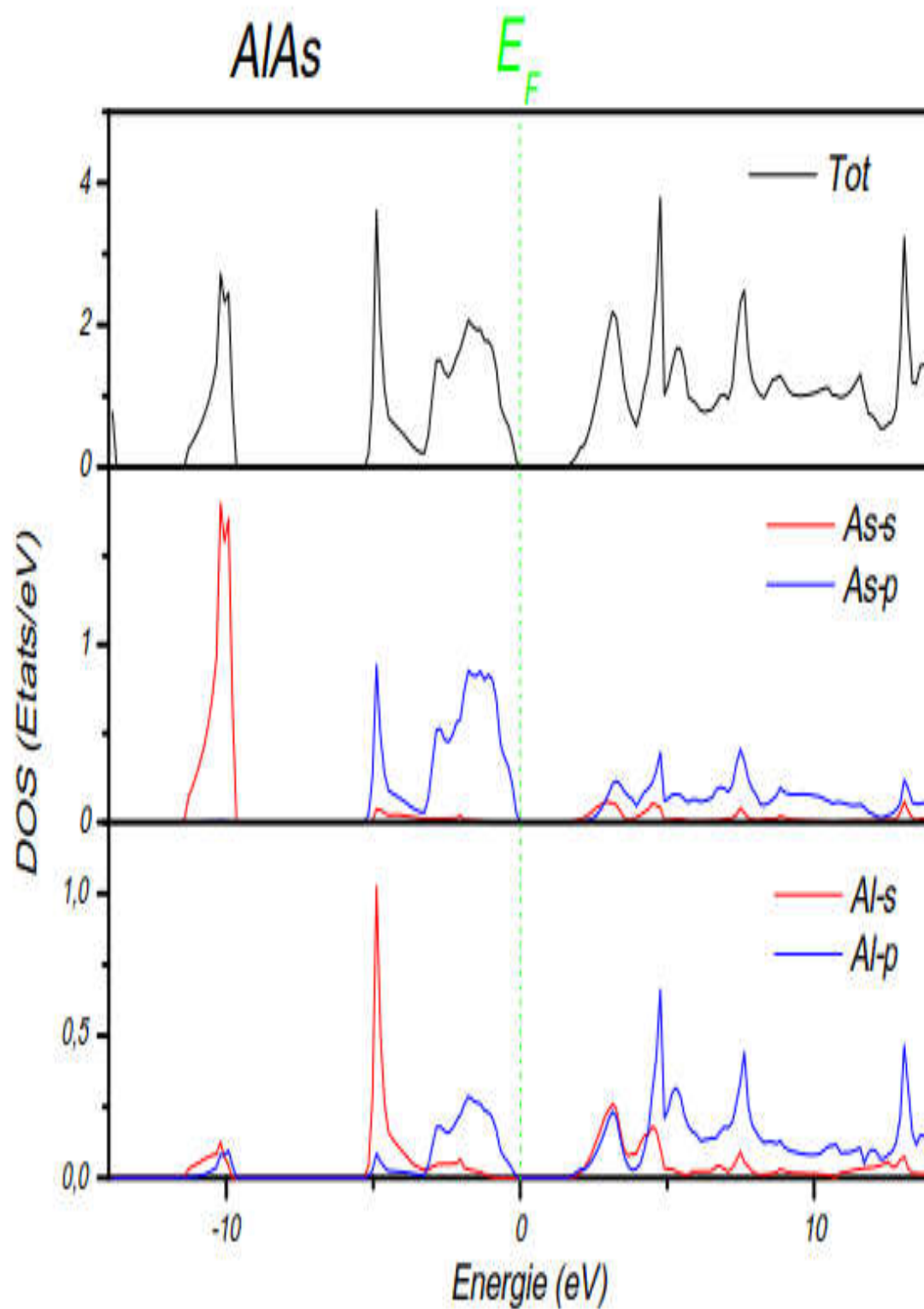
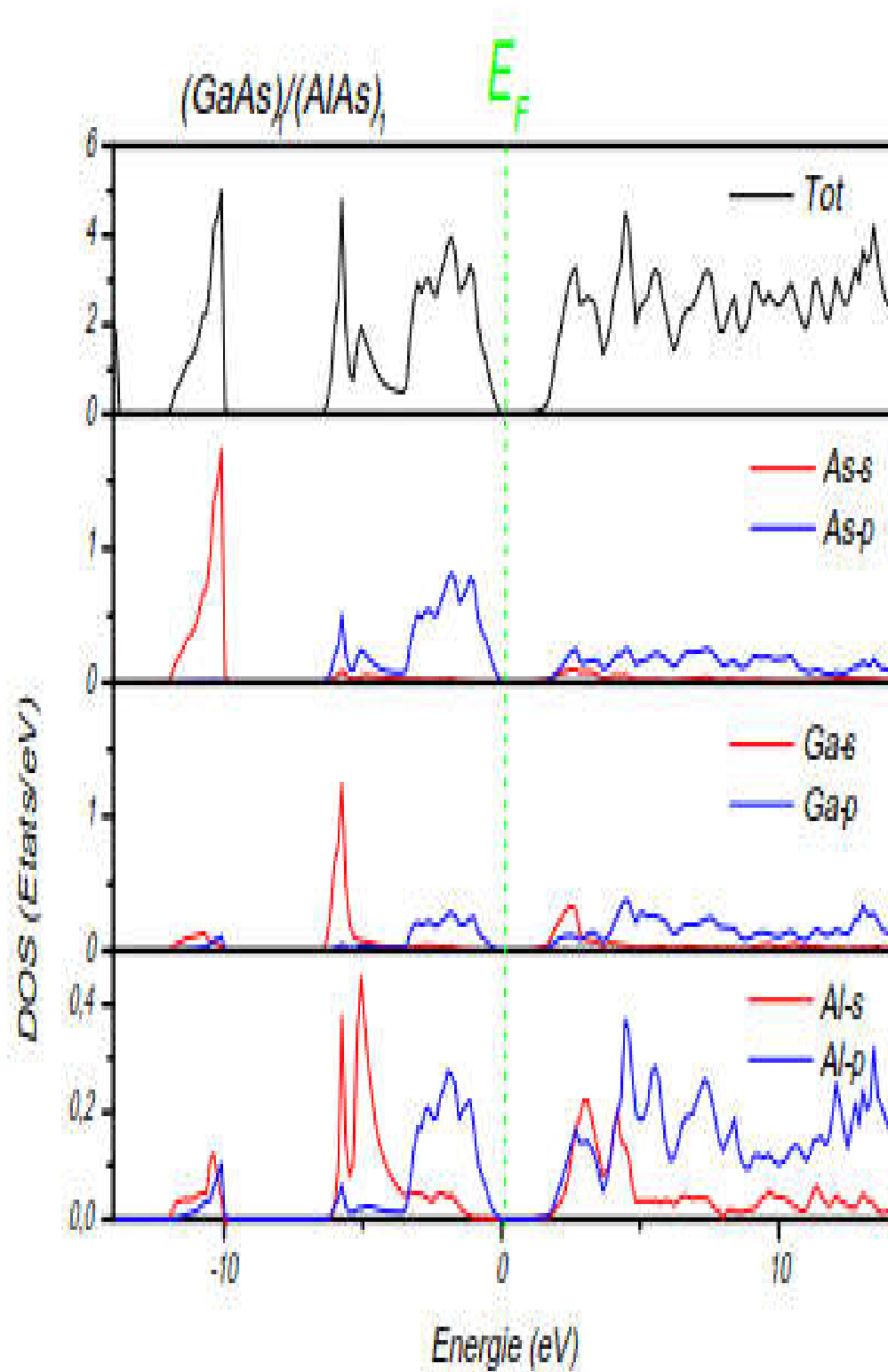


Figure II-8 : Densité d'états totale et partielle du binaire GaAs



FigureII-9 : Densité d'états totale et partielle du binaire AlAs

Figure II-10 : Densité d'états totale et partielle des super-réseaux (AlAs)<sub>1</sub>/(GaAs)<sub>1</sub>

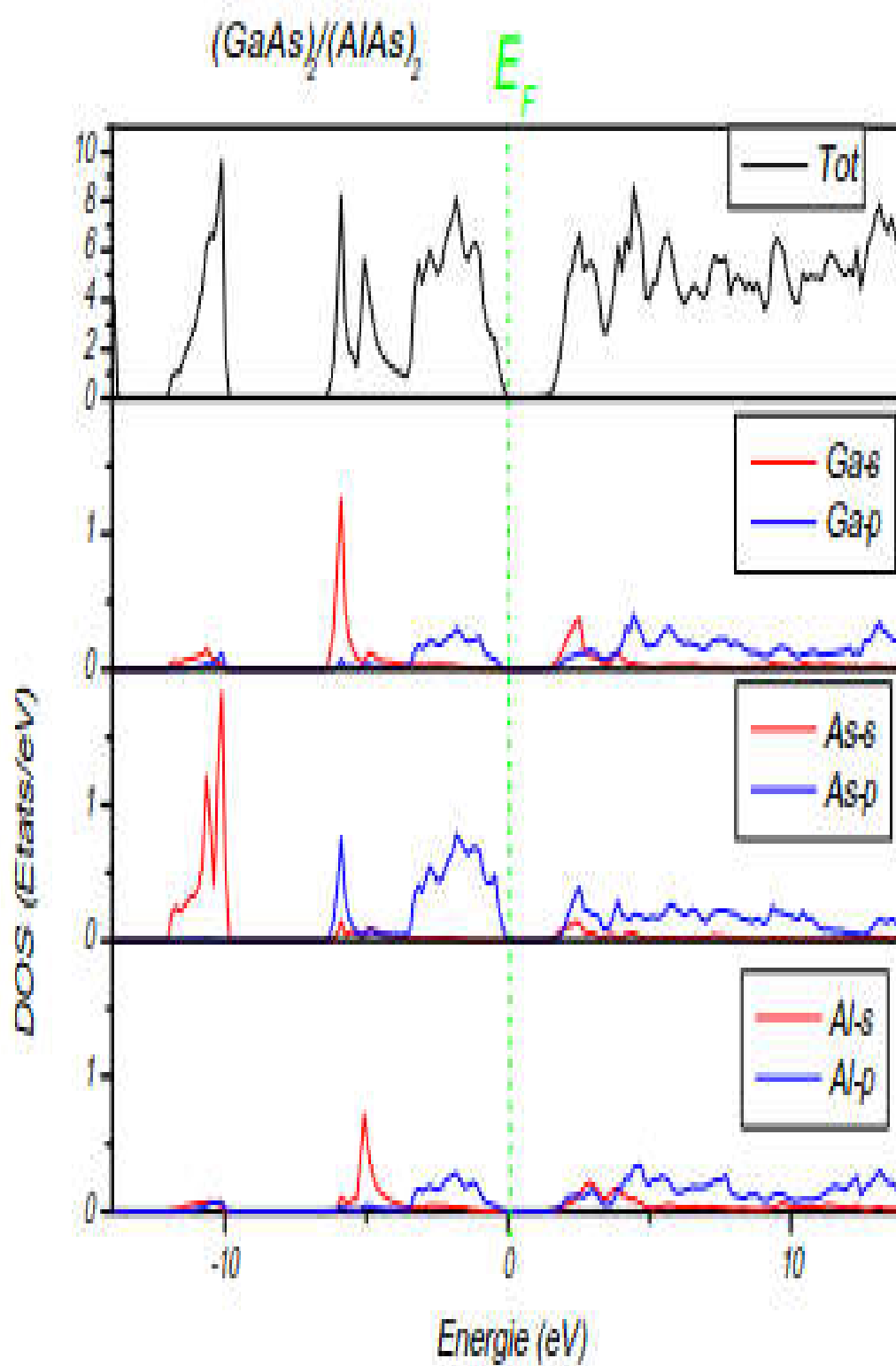


Figure II-11 : Densité d'états totale et partielle des super-réseaux  $(\text{AlAs})_2/(\text{GaAs})_2$

# Références bibliographiques

- [1]. J.F. Geisz et D.J. Friedman, III-N-V semiconductors for solar photovoltaic applications, *Semicond. Sci. and Technol.* 17, 769 (2002).
- [2]. Y. Zhang, A. Mascarenhas, S. K. Deb, H. P. Xin, et C. W. Tu, Heavily nitrogen-doped III-V semiconductors for high-efficiency solar cells, *Proceedings of 28th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2001, p. 1189. IEE.
- [03] G. Bauer, F. Kuchar and H. Heinrich, Towdimentional systems, heterostructures and superlattices, *Proceedings of the International Winter SchoolMauterndorf, Austria*, Springer Serie in solide state Sciences, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg), 53 (1984).
- [04] L. Esaki, *IEEE J. Quantum Electron* 22 (1986) 1611.
- [05] M. Merabet, S. Benalia, D. Rached, R. Khenata, A. Bouhemadou, S. Bin Omran, Ali H. Reshak, M. Rabah, *Superlattices and Microstructures* 49 (2011) 132.
- [06] M. Merabet, D. Rached, R. Khenata, S. Benalia, B. Abidri, N. Bettahar, S. Bin Omrane, *PhysicaB: Condensed Matter* 406 (2011) 2347.
- [07] R. Dingle, *Festkörperprobleme XV* 21 (1975).
- [08] V. Benaline Sheeba, C. Nirmala Louis, *Chem. Mate. Eng.* 1(4) (2013) 132-140.
- [09] E. Marega Jr, R.M. Oliveira, C. Ade Souza, H. Arakaki, P.P. González-Borrero, *Microelectronics Journal* 35 (2004) 41–43
- [10] S. Savrasov, D. Savrasov, *Phys. Rev. B* 46 (1992) 12181.
- [11] S.Y. Savrasov, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 6470.
- [12] J. P. Perdew, K. Burke, and Y. Wang, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 16533.
- [13] F. Birch, *J. Geophys. Res.* 83 (1978) 1257.
- [14] R. Ahmed, S. Javad, Hashemifar, H. Akbarzadeh, M. Ahmed and F. Aleem, “A Density-Functional Theory Study of Structural and Electronic Properties of III-Arsenide Binary Compounds,” *Computational Materials Science*, Vol. 39, No. 3, 2007, pp.
- [15] Birch, *J. Geophys. Res.* 83, 1257 (1978).

# **Conclusion générale**

Le travail présenté dans cette thèse est consacré au développement des propriétés structurales et électroniques des super-réseaux  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  pour les deux configurations ( $n = 1$  et  $2$ ) et leur matériaux massifs L'**arséniure de gallium** (GaAs) et L'**arséniure d'aluminium** (AlAs) qui ont un intérêt technologique important dans différents domaines tel que les Laser à cascade quantique, les effets tunnel e électroluminescence (Structure MIS) et les jonctions p-n polarisées en direct (les diodes).

Les calculs ont été réalisés au moyen de la méthode FP-LMTO (Full Potential Linear Muffin-Tin Orbital) basée sur la DFT est déterminée par l'approximation du gradient généralisé (GGA : Generalized Gradient Approximation) paramétrisée par Perdew, Burke et Ernzerhop.

Pour les deux binaires les propriétés structurales telles que les paramètres de maille ( $a_0$ ) et les modules des compressibilités et ses dérivés ( $B_0$  et  $B'$ ), sont calculées en utilisant la méthode (FP-LMTO) avec l'approches (GGA) pour la phase (zinc blende), les résultats trouvés sont en accord avec ceux avancés dans autres calculs.

Dans l'étude des propriétés électroniques, les valeurs des gaps d'énergie calculées par l'approches (GGA) et pour le premier binaires GaAs montre le comportement semi-métallique avec un Gap a voisine le zéro de type directe. Alors que l'arséniure d'aluminium (AlAs) est un semi-conducteur avec une énergie de bande interdite 1.49 eV de type indirect ( $\Gamma$ -X).

Concernant les super-réseaux, si on commence par les propriétés structurales, nous avons trouvé les paramètres des super-réseaux tel que le paramètre  $a_{2,2}$  est le double de la valeur de  $a_{1,1}$ .

Pour les propriétés électroniques des super-réseaux on a prédit les structures des bandes électroniques de ce super-réseau pour les deux configurations  $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$  et  $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$  en constatent clairement que les minimums des bandes de conduction et les maximums des bandes de valence trouvent au même point de haute symétrie ( $\Gamma$ ) donc ses matériaux auront des gaps directs au point ( $\Gamma$ ) est classes comme des semi-conducteur aux les conditions normales. Cette étude du premier principe fait partie un effort théorique pour explorer les différentes propriétés physiques des super-réseaux  $(\text{AlAs})_n/(\text{GaAs})_n$  et sera certainement très utile pour l'interprétation des futures données expérimentales.