



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT



MEMOIRE DE MASTER

Présenté par :

- ZAMI Fatima
- MECHAHER Zahia

Filière : PHYSIQUES

Spécialité : Nanostructures Semiconductrices

Intitulé

Etude des propriétés structurales et électroniques des matériaux massifs GaN et AlN et de leurs super réseaux $((\text{GaN})_n/(\text{AlN})_n)$ avec $(n=1 \text{ et } 2)$.

Devant le jury composé de :

| | | |
|----------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|
| Président | M ^r . DAHMANE FETHALLAH | MCA. C. Universitaire de Tissemsilt |
| Directeur de mémoire | M ^r . BENALIA SALAH EDDINE | Pr. C. Universitaire de Tissemsilt |
| Examineur | M ^r . ZERROUKI TAYEB | MAA. C. Universitaire de Tissemsilt |

Table des Matières :

| | |
|---|----|
| <i>Introduction générale</i> | 1 |
| Chapitre I : | |
| Concepts Théoriques sur les Super réseaux Semiconducteurs | |
| I-1 : Base de Données des Superréseaux..... | 5 |
| I-1-1 : Définition du Superréseaux..... | 5 |
| I-1-2 : Les Principaux paramètres Pris en Considération dans un Superréseaux..... | 6 |
| I-2 : Divers Types de Superréseaux | 7 |
| I-2-1 : Premier Type de Superréseaux | 7 |
| I-2-2 : Deuxième Type de Superréseaux..... | 7 |
| I-2-3 : Troisième Type de Superréseaux..... | 8 |
| I-3 : Diverses Applications des Superréseaux..... | 8 |
| I-3-1: Optoélectroniques..... | 8 |
| I-3-2 : Magnétiques..... | 9 |
| I-3-3 : Energétiques | 9 |
| I-4 : Les Hétérostructures Semiconductrices..... | 10 |
| I-4-1 : Puits Quantique..... | 10 |
| I-4-1-1 : Définition..... | 10 |
| I-4-1-2 : Divers Types de Puits Quantiques..... | 11 |
| I-4-2 : Différence entre Puits Quantique et Superréseaux..... | 15 |
| I-5 : Propriétés Physiques des Semiconducteurs Binaires..... | 17 |
| I-5-1 : Propriétés Structurales..... | 17 |
| I-5-2 : Propriétés Electroniques..... | 18 |
| Bibliographie du Premier Chapitre..... | 20 |

Chapitre II :

Méthodes de Calcul

| | |
|--|----|
| II-1 : Equation de Schrödinger d'une Particule à l'Etat Stationnaire..... | 22 |
| II-2 : Théorie de la Fonctionnelle de la Densité DFT..... | 24 |
| II-2-1 : Approximation de Born Oppenheimer..... | 24 |
| II-2-2 : Approximation de Hartree Fock..... | 25 |
| II-2-3 : Formalisme de la DFT..... | 26 |
| II-2-3-1 : Théorèmes de Hohenberg et Kohn..... | 26 |

| | | |
|---------------|--|----|
| II-2-3-2 : | Equations de Kohn et Sham..... | 27 |
| II-2-3-3 : | Théorie de la Densité Local LDA..... | 28 |
| II-3 : | La Méthode Utilisée FP LMTO..... | 29 |
| II-3-1 : | Sphères Muffins Tin..... | 30 |
| II-3-2 : | Densité de Charge..... | 31 |
| II-3-2-1: | Harmoniques Sphériques..... | 31 |
| II-3-3 : | Bande d'Energie..... | 32 |
| II-3-4 : | Bienfaits et Méfaits de la Méthode LMTO..... | 33 |
| | Bibliographie du Deuxième Chapitre..... | 34 |

Chapitre III :

Résultats et Interprétations

| | | |
|----------------|---|----|
| III-1 : | Détail de Calcul..... | 36 |
| III-2 : | Propriétés Structurales..... | 37 |
| III-2-1 : | Binaires <i>GaN</i> et <i>AlN</i> | 38 |
| III-2-1-1 : | Nitru de Gallium (<i>GaN</i>)..... | 38 |
| III-2-1-2 : | Nitru de Aluminium (<i>AlN</i>)..... | 39 |
| III-2-2 : | Super réseaux ((<i>GaN</i>) _n / <i>(AlN)</i> _n)..... | 40 |
| III-2-2-1 : | ((<i>GaN</i>) ₁ / <i>(AlN)</i> ₁)..... | 40 |
| III-2-2-2 : | ((<i>GaN</i>) ₂ / <i>(AlN)</i> ₂)..... | 41 |
| III-3 : | Propriétés Electroniques..... | 43 |
| III-3-1 | Structures de Bandes..... | 43 |
| III-3-1-1 : | Binaires <i>GaN</i> et <i>AlN</i> | 44 |
| III-3-1-1-1 | Nitru de Gallium (<i>GaN</i>)..... | 44 |
| III-3-1-1-2 | Nitru de Aluminium (<i>AlN</i>)..... | 46 |
| III-3-1-2 : | Super réseaux ((<i>GaN</i>) _n / <i>(AlN)</i> _n)..... | 48 |
| III-3-1-2-1 | ((<i>GaN</i>) ₁ / <i>(AlN)</i> ₁)..... | 48 |
| III-3-1-2-2 | ((<i>GaN</i>) ₂ / <i>(AlN)</i> ₂)..... | 49 |
| | Bibliographie du Troisième Chapitre..... | 51 |
| | Conclusion Générale | 54 |

Liste des Figures :

| Figure | Titre | Page |
|--------------------|--|------|
| <i>Chapitre I</i> | | |
| Figure I-1 | Diagramme schématique d'un superreseau montrant La formation des minibandes à partir des niveaux d'énergie du puits quantique unique correspondant..... | 4 |
| Figure I-2 | Représentation schématique d'un superréseau bidimensionnel.... | 5 |
| Figure I-3 | L'énergie de gap en fonction du paramètre de maille de quelques semiconducteurs III-V..... | 6 |
| Figure I-4 | Premier type de SR schématisé..... | 7 |
| Figure I-5 | Un SR Staggered..... | 8 |
| Figure I-6 | Un SR Misaligned..... | 8 |
| Figure I-7 | Couche d'un matériau semiconducteur B possédant un gap inférieur à celui du matériau semiconducteur A..... | 11 |
| Figure I-8 | Schéma d'une structure de puits quantique selon la nature de la discontinuité de bande interdite à l'interface puits barrière..... | 11 |
| Figure I-9 | Niveaux d'énergie et fonctions d'onde associés à un PQI..... | 12 |
| Figure I-10 | États confinés dans un puits quantique de largeur d.(a) Un puits quantique parfait avec des barrières infinies.(b) Un puits finie avec des barrières de hauteur V_0 . Les fonctions d'onde pour le $n = 1$ et $n = 2$ niveaux sont esquissées pour les deux types de puits | 13 |
| Figure I-11 | Potentiel symétrique unidimensionnel (V_z) dans la BV et la BC d'un SPQ..... | 14 |
| Figure I-12 | Potentiel symétrique unidimensionnel V_z dans la BV et la BC d'un DPQ..... | 14 |
| Figure I-13 | Potentiel unidimensionnel symétrique V_z dans la BV et la BC d'un MPQ ou un SR..... | 15 |
| Figure I-14 | Comparaison de comportement des puits quantiques infini, fini et un superréseau..... | 16 |
| Figure I-15 | La maille élémentaire de Zinc Blende..... | 17 |
| Figure I-16 | la structure wurtzite..... | 18 |

| | | |
|----------------------------|--|-----------|
| Figure I-17 | La première zone de Brillouin d'une structure cubique ZB plus les points et lignes de hautes symétrie..... | 19 |
| <i>Chapitre II</i> | | |
| Figure II-1 | Potentiel Muffin Tin..... | 31 |
| <i>Chapitre III</i> | | |
| Figure III-1 | La variation de l'énergie totale en fonction du volume de <i>GaN</i> en phase ZB..... | 38 |
| Figure III-2 | La variation de l'énergie totale en fonction du volume d' <i>AlN</i> en phase ZB..... | 39 |
| Figure III-3 | La variation de l'énergie totale en fonction du volume de $((GaN)_1/(AlN)_1)$ en phase ZB..... | 40 |
| Figure III-4 | La variation de l'énergie totale en fonction du volume de $((GaN)_2/(AlN)_2)$ en phase ZB..... | 41 |
| Figure III-5 | Structure de bande de <i>GaN</i> le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin en phase ZB..... | 44 |
| Figure III-6 | Structure de bande d' <i>AlN</i> le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin en phase ZB..... | 46 |
| Figure III-7 | Structure de bande de $((GaN)_1/(AlN)_1)$ le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin en phase ZB..... | 48 |
| Figure III-8 | Structure de bande de $((GaN)_2/(AlN)_2)$ le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin en phase ZB..... | 49 |

Liste des Tableaux :

| Tableau | Titre | Page |
|----------------------|---|-----------|
| <i>Chapitre I</i> | | |
| Tableau I-1 | Paramètre de maille et énergie de gap des éléments binaires II-VI.. | 6 |
| <i>Chapitre III</i> | | |
| Tableau III-1 | Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' de <i>GaN</i> | 39 |
| Tableau III-2 | Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' d' <i>AlN</i> | 40 |
| Tableau III-3 | Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' de $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$ | 41 |
| Tableau III-4 | Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' de $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ | 42 |
| Tableau III-5 | L'énergie de gap de <i>GaN</i> dans la phase ZB..... | 45 |
| Tableau III-6 | L'énergie de gap d' <i>AlN</i> dans la phase ZB..... | 47 |
| Tableau III-7 | L'énergie de gap de $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$ dans la phase ZB..... | 49 |
| Tableau III-8 | L'énergie de gap de $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ dans la phase ZB..... | 50 |

Introduction

Générale

Introduction Générale

Depuis les années 1970, les recherches sur le Nitrure de Gallium, le Nitrure d'Aluminium et leurs alliages ont trouvé un intérêt croissant jusqu'à ce que dans les années 1990, ils sont devenus les matériaux clés pour les applications d'optoélectroniques comme: les téléphones cellulaires, lecteurs mp3, l'éclairage à l'état solide, les lasers ou les transistors à effet de champ. Leurs possibilités de couvrir l'ultra violet et l'ensemble du spectre visible en raison de leurs courtes longueurs d'onde (comparables à la longueur d'onde de de Broglie) et Leurs stabilités physiques et chimiques exceptionnelles, en fait de ces matériaux, les matériaux de choix jusqu'à aujourd'hui. Depuis 1992, la première diode électroluminescente bleue par S.Nakamura et al en 1993[01], le premier laser bleu dans GaN a été réalisé par Nichia [01], beaucoup de progrès ont été accomplis et beaucoup de nouveaux défis se sont tournés vers le haut [01-09].

Dans notre travail, nous nous sommes concentrées sur les propriétés physiques des super réseaux $((GaN)_n/(AlN)_n)$, cristallisés dans la structure cubique (Zinc Blende). Le schéma ci- dessous illustre la structure du super réseaux et leurs constituants.

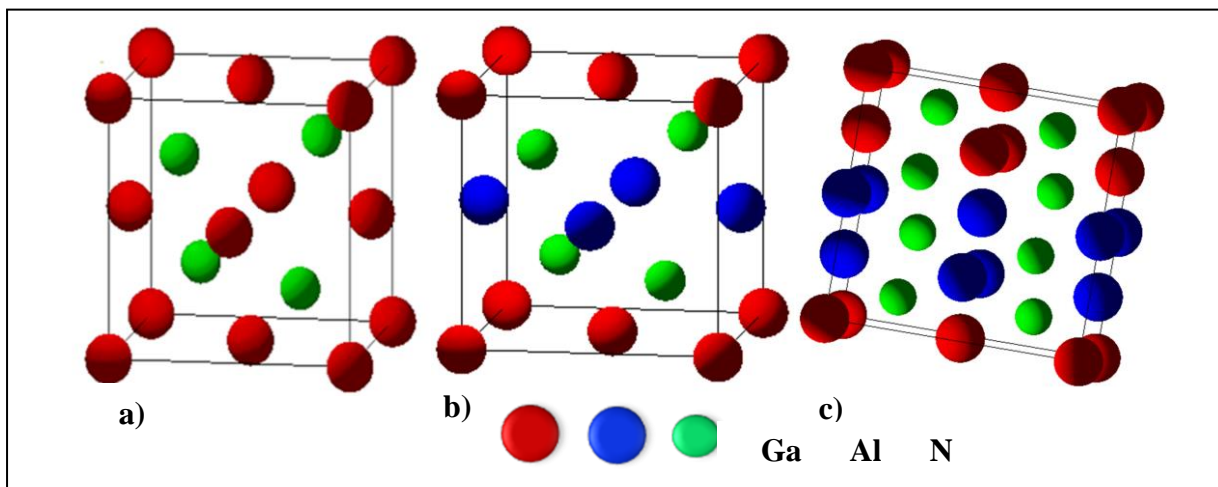


Figure 1 : Structure Zinc Blende pour a) GaN , b) $(GaN)_1/(AlN)_1$ et c) $((GaN)_2/(AlN)_2)$ respectivement.

La prédiction des propriétés électroniques et structurales de ces nouveaux matériaux par microordinateur est devenue simultanément la technique la plus efficace dans la recherche des sciences des matériaux. Dans ce stade, 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 précédentes des systèmes plus en plus complexes, la prédiction de nouveaux matériaux et elles ont parfois pu remplacer des expériences très chères ou même irréalisables en laboratoire.

Introduction Générale

Une de ces procédés est la méthode linéaire des orbitaux muffins tin (FP LMTO). Elle est caractérisée par l'exactitude, la précision, l'efficacité de traitement des orbitales (s, p, d et f) et la convergence de ses résultats. Ces nombreux avantages, nous ont motivés et encouragés à tester la puissance et l'efficacité de cette méthode.

L'objectif attendu à réaliser à la fin de ce mémoire est de déterminer quelques propriétés structurales et électroniques des super réseaux $((\text{GaN})_n/(\text{AlN})_n)$.

La présentation de notre manuscrit de mémoire va donc s'articuler autour de contenu suivant :

✓ Le premier chapitre est une brève théorique qui sera consacrée spécialement pour des notions fondamentales dans un super réseau : définitions, divers types, applications dominantes, base de construction et propriétés physiques.

✓ Le deuxième chapitre est particularisé pour présenter les techniques de calcul Utilisées lors de la détermination des propriétés structurales et électroniques telles que les théories de la fonctionnelle de la densité DFT et la densité locale LDA, jointes avec la méthode linéaire des orbitaux muffin tin (FP LMTO).

✓ Le dernier chapitre est défini pour fournir et discuter les résultats obtenus suite aux calculs effectués par la méthode (FP LMTO), en mettant en évidence les propriétés structurales et électroniques des binaires GaN et AlN et leurs super réseaux $((\text{GaN})_n/(\text{AlN})_n$ (n nombre de couches de 1 à 2).

Enfin, notre mémoire sera achevé par une conclusion générale qui englobe tous ce que nous l'énonçons auparavant.

Bibliographie de l'introduction générale :

- [01] S. Nakamura, G. Fasol. **The Blue Laser Diode**, Springer, Berlin (1997).
- [02] R. Songmuang, G. Katsaros, E. Monroy, P. Spathis, C. Bourgeral, M. Mongillo and S. DeFranceschi. **Quantum Transport in GaN/AlN Double Barrier Heterostructure Nanowires**. Grenoble, France.
- [06] Z Sitar. **Band Engineering of High Band Gap Semiconductors by superlattices**, Zurich, Switzerland, 533-537 (1993).
- [03] T. Hanada. **Oxide and Nitride Semiconductors : Basic Properties of ZnO, GaN, and Related Materials. 12**,1-19, Springer (2009).
- [04] V. Yu. Davydov, Yu. E. Kitaev, I. N. Goncharuk, and A. N. Smirnov . **Phonon Dispersion and Raman Scattering in Hexagonal GaN and AlN**, Phys . Rev B **58** N °19 (15 Nov 1998).
- [05] Mark Fox, Radu Ispasoiu. **Quantum Wells, Superlattices and Band Gap Engineering**.
- [07] Christian Mietze. **Cubic AlN/GaN Multi Quantum Wells for Unipolar Device Applications**. Paderborn University (28 Feb 2013).
- [08] Robert A. Rodgers. **Lo Plasmon Modes in Doped GaAs/Al_xGa_{1-x}As Superlattices** . Indiana University of Pennsylvania (Aug2011)
- [09] K.Mohammed Benali. **First Principle Study of Structural, Elastic and Electronic Properties of GaN and AlN Semiconductors Under Pressure Effect and Magnitism in AlN-Mn and GaN-Mn Sysrems**. Tlemcen (2004).

Chapitre I :

Concepts Théoriques sur les

Super Réseaux

Semiconductrices

Chapitre I : Concepts Théoriques sur les Superréseaux Semiconducteurs

L'utilisation répandue des dispositifs semiconducteurs en partant des transistors aux lasers semiconducteurs dans la technologie contemporaine a conduit au développement rapide des puits quantique « PQ » et des superréseaux « SR » en devenant plus passionnants et plus exigés dans l'électronique moderne.

Dans ce chapitre, nous rappelons un type très particulier d'une structure semiconductrice périodique, conventionnellement appelé un superréseau. Qui a été proposé pour la première fois par Isaki et Tsu en 1969-1970 [01,02] pour induire une conductance négative, à partir d'une hétérostructure semiconductrice plus utilisée dans les dispositifs de haute vitesse. Dans la même année, Blakeslee et Aliotta [01] ont synthétisé le premier super réseau ($GaAs/GaAs_{1-x}P_x$) en utilisant le dépôt chimique en phase vapeur (Chimical Vapour Deposition CVP). Plus tard, A. Cho (1971) et J.Woodall(1972) démontrèrent des structures similaires avec ($GaAs/GaAlAs$) par des techniques de croissance : l'Epitaxie par Jets Moléculaires (Molecular Beam Epitaxy MBE) et l'Epitaxie en Phase Liquide (liquid Phase Epitaxy LPE) respectivement. La figure I-1 montre la formation d'un superréseau.

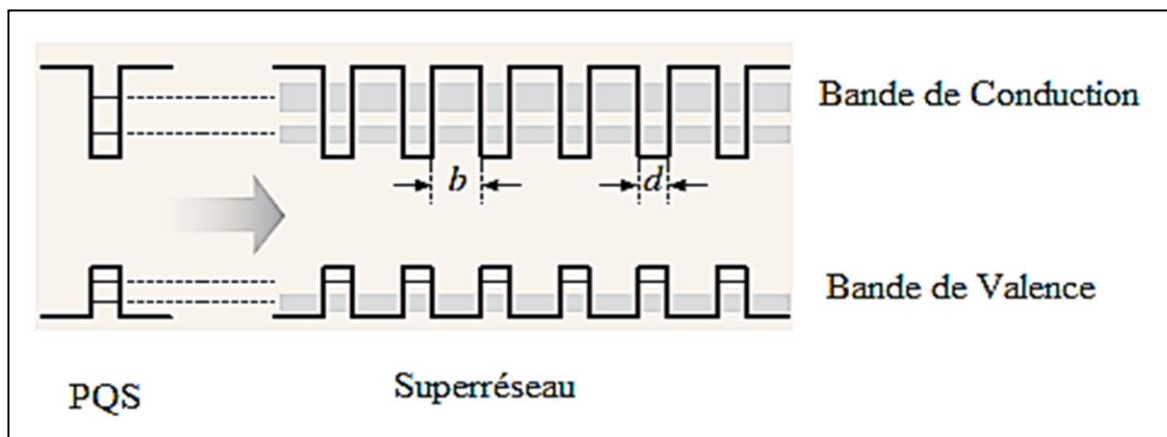


Figure I-1: Diagramme schématique d'un superréseau montrant la formation des minibandes à partir des niveaux d'énergie du puits quantique unique correspondant [02].

I-1 : Base de Données des Superréseaux :

I-1-1 : Définition du Superréseaux :

Les Superréseaux « SR » (ou superlattices SLs) sont des matériaux composés de deux types de semiconducteurs [03,04], un type qui agit comme un puits quantique et l'autre comme une barrière quantique (voir la figure I-2), sont déposés en alternance les uns aux autres pour former une structure périodique dans la direction de croissance et induire un potentiel , de telle sorte que toutes les couches de matériau puits ont bien une largeur L_w , celles du matériau barrière ont une largeur L_b et celles de super-réseau ont une période $d = L_w + L_b$ (les deux matériaux peuvent présenter une largeur identique ou différente) [05].

Le développement technique permet de contrôler l'épaisseur des couches avec une précision pouvant atteindre une monocouche atomique, ce qui permet d'adapter des structures périodiques artificielles qui présentent des caractéristiques semblables à des cristaux conventionnels [06].

Le potentiel périodique (produit par la variation de la composition d'alliage et la discontinuité dans la bande de conduction « BC » ou de valence « BV » [01,06]) superposé sur la structure de la bande de cristal provoque la formation d'états de Bloch et la structure de bande d'énergie dans la bande de conduction « BC » du cristal. Ces bandes artificielles sont appelées (minibandes), elles pondent dans l'origine de la plupart des propriétés intéressantes des superréseaux.

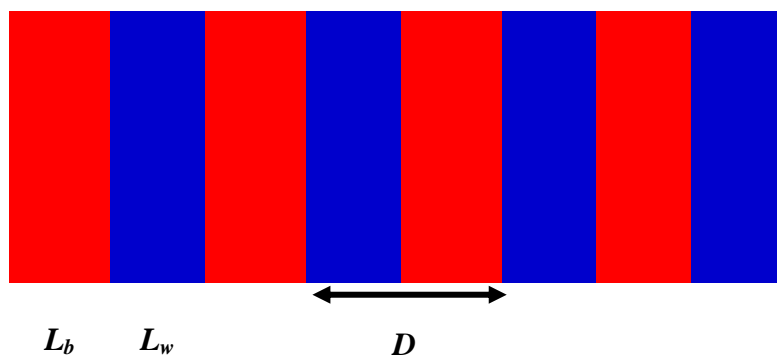


Figure I-2 : Représentation schématique d'un superréseau bidimensionnel [05].

I-1-2 : Les Principaux paramètres Pris en Considération dans un Superréseau :

Afin d'atteindre des dispositifs optoélectroniques assurés à partir des superréseaux, il faut bien choisir des matériaux équitables aux besoins. En influant directement sur deux paramètres principaux :

- **Constante de Réseau a** : doit être voisin, dans le cas des semiconducteurs massifs *AlN* et *GaN*. Le désaccord de maille est d'environ 2.7%, donc, il est faible.
- **Gap énergétique E_g** : doit être comparable. Le gap des deux matériaux *GaN* et *AlN* est direct.

Le tableau I-1 et la figure I-3 montrent l'identité des énergies de bandes interdites et des paramètres de maille pour quelques semiconducteurs II-VI et III-V.

Tableau I-1: Paramètre de maille et énergie de gap des éléments binaires II-VI [13].

| Matériaux | E_g (eV) | A (Å) |
|-------------|------------|---------|
| <i>CdTe</i> | 1,606 | 6,4810 |
| <i>ZnTe</i> | 2,391 | 6,1037 |
| <i>MgTe</i> | 3,6 | 6,420 |
| <i>MnTe</i> | 3.198 | 6,337 |

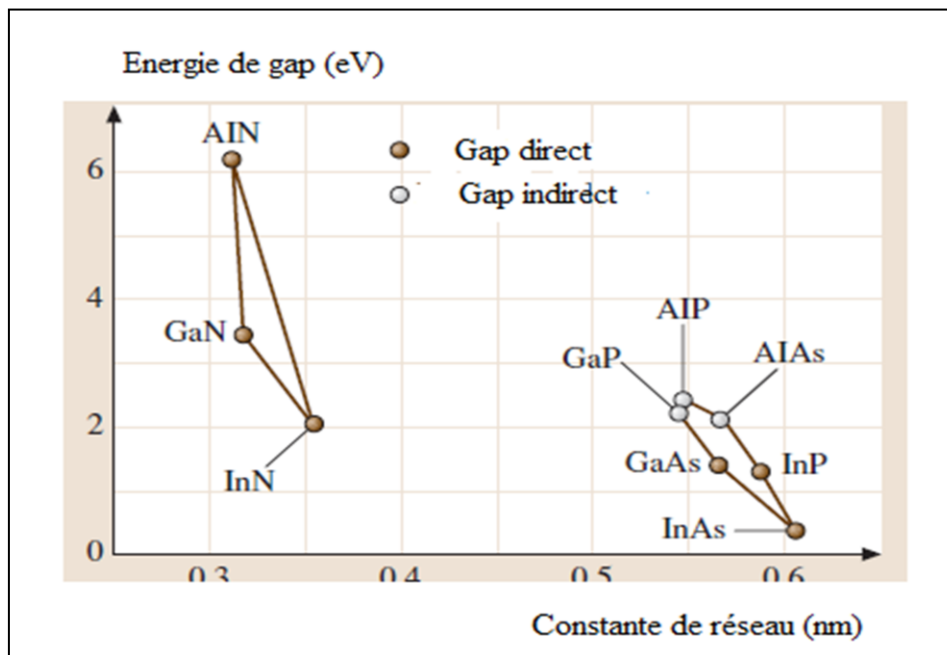


Figure I-3: L'énergie de gap en fonction du paramètre de maille de quelques semiconducteurs III-V [02].

I-2 : Divers Types de Superréseaux :

I-2-1 : Premier Type de Superréseau :

Dans un superréseau de deux matériaux, les profils de potentiel peuvent s'aligner jusqu'à la « BC » et la « BV » du puits, ils sont localisés dans la même couche. Une telle configuration est appelée Straddling [07,08], elle conduit à la formation d'un exciton de type I (les électrons et les trous se situent dans la même couche, reliés par une interaction coulombienne et se déplacent comme une seule entité à travers le matériau). Le super réseau ($Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$) du groupe III-V est un des exemples significatifs. La figure I-4 illustre ce type.

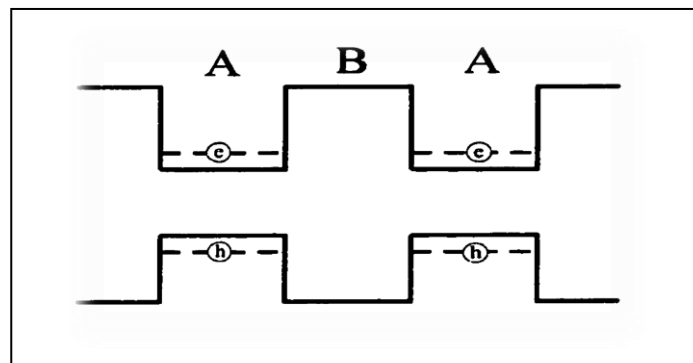


Figure I-4: Premier type de SR schématisé [08].

I-2-2 : Deuxième Type de Superréseau :

Un superréseau de type II est celui dans lequel la couche de la « BV » de puits sert comme une couche de barrière de la « BC ». Il a été initialement proposé en 1977 par S.Halasz, Tsu, et Isaki [08]. Ce type contient deux configurations : la première est appelée staggering [07,08], où les électrons se trouvent dans une couche différente de celle des trous (voir la figure I-5), la deuxième est nommée Misaligned [07,08], où, les électrons sont spatialement séparés des trous et le bord de la « BV » d'une couche est supérieure à la limite de la « BC » de l'autre. Le super réseau ($InAs/GaSb$) du groupe IV-IV en est un exemple. La figure I-6 illustre ce type.

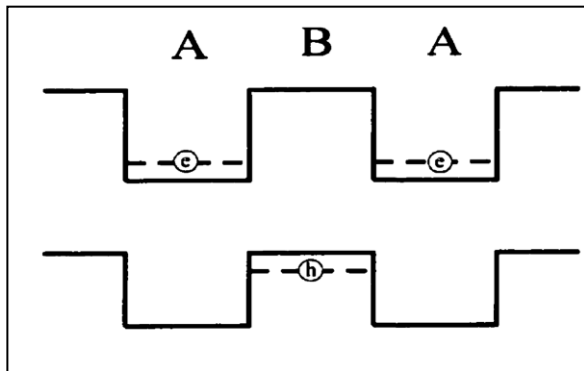


Figure I-5: Un SR Staggered [08].

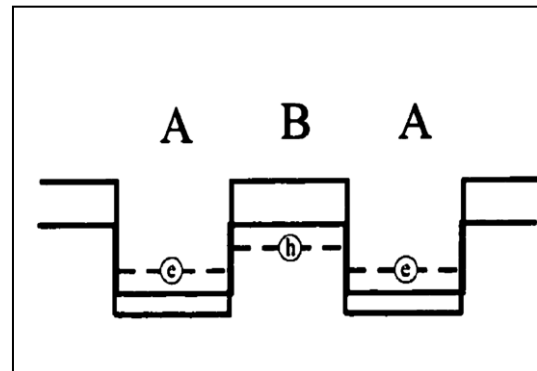


Figure I-6: Un SR Misaligned [08].

I-2-3 : Troisième Type de Superréseau :

Ce type d'alignement de bande ne se trouve que dans la littérature dans certains semiconducteurs II-VI tels que *HgTe* et *CdTe*, où il existe une inversion des bandes de particules légères dans *HgTe* par rapport à celle de *CdTe*. L'écart en énergie des sommets des bandes de trous lourds est estimé nul.

La taxonomie de type I et II, a été historiquement utilisée pour distinguer les super réseaux. Cependant, ces catégories sont simultanément appliquées systématiquement pour coupler les structures à puits quantique.

Evidemment, ces dernières structures vont s'accroître en provoquant plus de complexité, par exemple, un super réseau avec une période de quatre couches ou une simple couche composée de trois semiconducteurs, de tels matériaux exotiques défient les classifications de type I / type I, et doivent être étudiés cas par cas [08].

I-3 : Diverses Applications des Superréseaux :

I-3-1 : Optoélectroniques :

- *Fabrication des Modulateurs Optiques*

L'objectif de leurs utilisations est la conversion des signaux électriques en signaux optiques, plus important en communication à fibre optique [08]. Ils fonctionnent à des vitesses très élevées. Pour produire les modulateurs optiques, il faut que leurs structures possèdent une faible discontinuité près de la «BV» (plus petite que 60-100 MeV), cela augmente le coefficient d'atténuation et minimise les pertes. La «BC» doit avoir une discontinuité très élevée [09].

- *Fabrication des Diodes Électroluminescentes DEL*

Les « DEL » bleues sont maintenant fabriqués à partir des hétérostructures de puits quantiques à base de **GaN**. La structure « PQ » (**ZnCd/MgSe**) a été observée dans le rouge, vert et bleu (la région courte de longueur d'onde du visible), elle dépend de la largeur et de la composition des couches [08]. Cette particularité est bien observée dans les matériaux semiconducteurs II-VI en raison de leur gap direct et leur énergie de bande interdite adaptée [17].

I-3-2 : Magnétiques :

- *Fabrication des Multicouches Magnétiques*

Elles ont une très large magnétorésistance GMR (GMR veut dire le changement de la résistance d'un conducteur lorsqu'il est mis dans un champ magnétique externe). La largeur de chaque couche est de l'ordre de nanomètre, par exemple : le system FeCrFe comporte trois couches nanométriques. La découverte de la magnétorésistance géante ouvrira grandement la porte devant de nouvelles possibilités scientifiques et techniques en influant directement sur le stockage des informations, la détection magnétique. Cela fut un facteur d'impact plus élevé dans la fabrication des superréseaux [04].

- *Fabrication des semiconducteurs magnétiques dilués DMS*

En général, les DMS sont des matériaux semiconducteurs dont les ions constitutifs sont remplacés en partie par des ions magnétiques. La plupart des matériaux DMS ont été premièrement étudiés dans les années 1980. Ils se composent des matériaux $A^{II}B^{VI}$ avec la substitution de manganèse pour une fraction des ions A^{II} . Quelques exemples : $Zn_{1-x}Mn_xTe$, $Hg_{1-x}Mn_xTe$, $Cd_{1-x}Mn_xSe$ et $Cd_{1-x}Mn_xTe$ [15].

I-3-3 : Energétiques :

- *Fabrication des cellules solaires*

Les cellules solaires à base de super réseau ont une caractéristique très importante, leur capacité à absorber des photons de la lumière d'une façon intense [04]. Elles offrent une plus grande puissance de sortie sous un éclairage intensif que celle produite par les cellules solaires conventionnelles fabriquées à partir des matériaux massifs correspondants [08].

Dans la partie précédente du premier chapitre, on a pris une vision générale en essayant de citer les plus importantes informations théoriques concernant les superréseaux en parlant de leurs naissances, définitions, types et des applications dominantes. Dans ce qui suit, on va spécifier les choses en limitant notre étude aux hétérostructures à puits quantique qui servent de base de construction des superréseaux.

I-4 : Les Hétérostructures Semiconductrices :

Les puits quantiques «PQ», fils quantiques «FQ» et points quantiques «BQ» sont des structures semiconductrices à dimensionnalité réduite. Elles forment des systèmes très attrayants pour l'étude fondamentale des phénomènes physiques à l'échelle quantique et offrent une multitude de possibilités d'applications, notamment dans le domaine de l'optoélectronique [10,11].

Le développement continu des techniques de croissance des couches minces rend aujourd'hui possible la fabrication de «PQ» ultraminces, c'est-à-dire, avec une épaisseur de puits aussi petite qu'une monocouche (quelques Angströms). À cette échelle, le puits se confond pratiquement avec l'interface qui va jouer un rôle de plus en plus important dans la détermination des propriétés optiques et électroniques d'hétérostructure.

I-4-1 : Puits Quantique :

I-4-1-1 : Définition

Un puits quantique «PQ» est un type particulier des hétérostructures dans lequel une couche mince (mur) est entourée de deux couches (barrière) [12]. C'est le produit obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semiconducteur A entre deux couches d'un autre matériau semiconducteur B (représentation d'un sandwich [08]). Ce dernier a un gap d'énergie supérieur à celui du matériau A (voir la figure I-7). En fait, les états autorisés dans cette structure correspondent à des ondes stationnaires dans la direction perpendiculaire aux couches.

La discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron et trou) dans le puits quantique. Ce dernier est obtenu lorsque l'épaisseur de la couche est de l'ordre de la longueur d'onde de De Broglie [07,08].

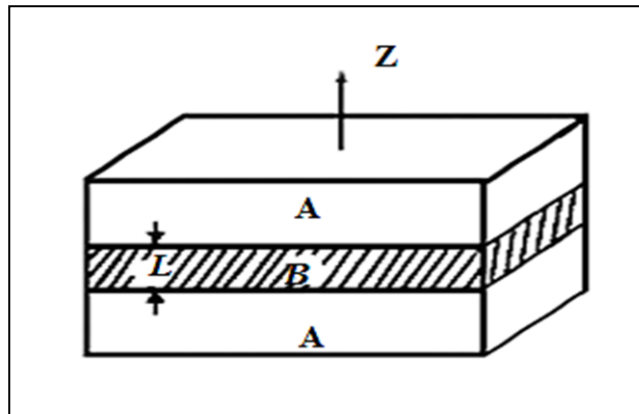


Figure I-7: Couche d'un matériau semiconducteur B possédant un gap inférieur à celui du matériau semiconducteur A [10].

I-4-1-2 : Divers Types de Puits Quantiques :

Selon la nature de la discontinuité des bandes interdites à l'interface puits-barrière (décrite dans la figure I-8), on distingue trois types de puits quantiques :

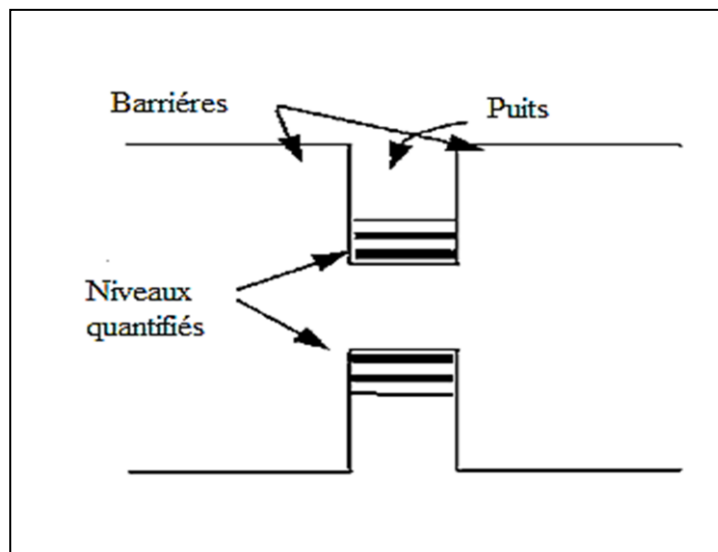


Figure I-8: Schéma d'une structure de puits quantique selon la nature de la discontinuité de bande interdite à l'interface puits-barrière [13].

- **Puits Quantique de Type I**

Dans ce type, les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

- **Puits Quantique de Type II**

Dans ce type, les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. L'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais dépend également des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure.

- **Puits Quantique de Type III**

Dans ce type, le bas de la «BC» se trouve en dessous du haut de la «BV». Cette situation appelée aussi une configuration semimétallique, offre une grande souplesse dans le choix de la longueur d'onde d'émission, l'énergie du photon émis n'est alors fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches.

Les types de puits quantiques ne se limitent pas à ce nombre. On distingue par ailleurs, selon la profondeur du puits ou du potentiel, d'autres types tels que :

- **Puits Quantique Infini PQI**

Le puits de potentiel infiniment profond et unidimensionnel est le potentiel de confinement le plus simple à résoudre en mécanique quantique (la figure I-9 le décrit). L'équation de Schrödinger indépendante du temps résume l'analogie de la mécanique ondulatoire avec la formulation de l'Hamiltonien de la mécanique classique. Classiquement, l'énergie totale d'un tel système est égale à la somme des énergies cinétique et potentielle. En mécanique quantique, l'énergie est égale à la valeur moyenne d'un opérateur linéaire (Hamiltonien)[14].

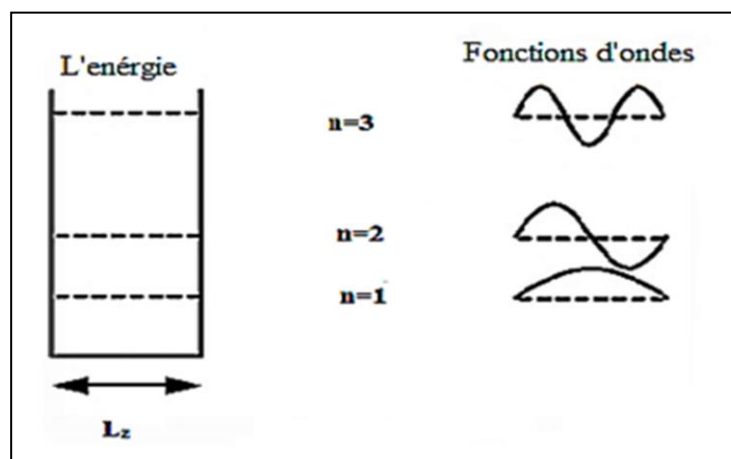


Figure I-9: Niveaux d'énergie et fonctions d'onde associés à un PQI [12].

- **Puits Quantique Fini PQF**

Le potentiel de confinement infiniment profond à bien servi de plate-forme pour le développement de la physique des systèmes à deux dimensions. Cependant, le PQF est composé de couches alternées des semiconducteurs dissemblables. La figure I-10 donne la différence énergétique entre un «PQF» et un «PQI» [14].

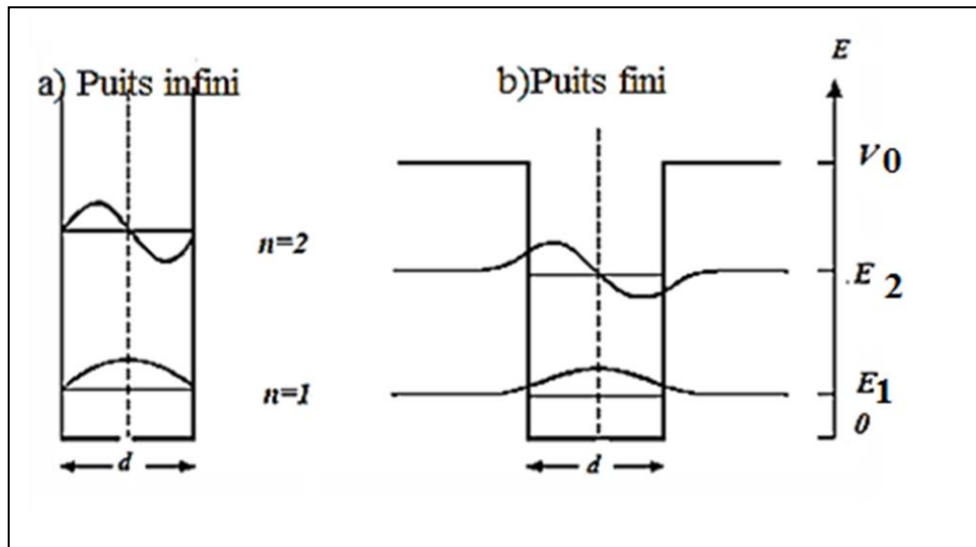


Figure I-10: États confinés dans un puits quantique de largeur d .

(a) Un puits quantique parfait avec des barrières infinies.

(b) Un puits fini avec des barrières de hauteur V_0 .

Les fonctions d'onde pour le $n=1$ et $n=2$ niveaux sont esquissées pour les deux types de puits [02].

Selon le nombre de puits et de barrières mis en jeu, les puits quantiques peuvent être classés comme suit :

- **Puits Quantique Singulier PQS**

Il se compose seulement, d'un unique puits quantique et de deux barrières de potentiel. Cette hétérostructure est principalement de type I où les électrons et les trous sont confinés dans la même couche [16]. La figure I-11 schématise ce genre de puits.

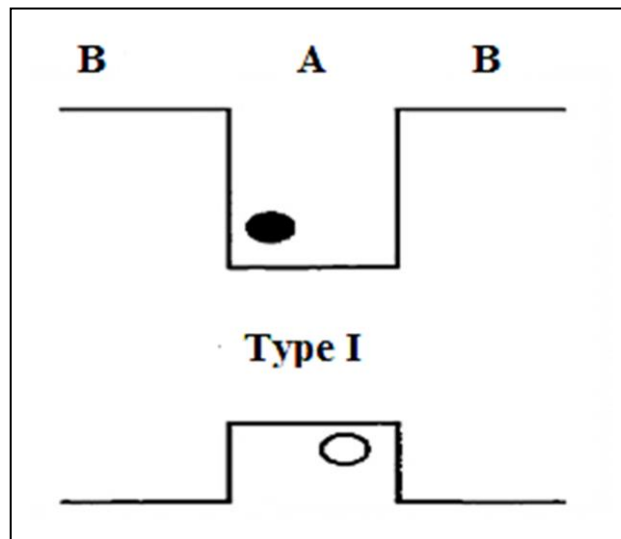


Figure I-11: Potentiel symétrique unidimensionnel (V_z) dans la BV et la BC d'un SPQ [14].

- **Double Puits Quantique DPQ**

Il est formé à partir de deux puits et trois barrières. La largeur de la barrière centrale insérée entre les deux puits représente le point de force de ce genre, décrit dans la figure II-12. Si la largeur du puits est inférieure à la longueur d'onde de De Broglie, les deux «PQ» sont couplés et donc dépendants l'un de l'autre. Les porteurs ne sont pas complètement confinés dans les puits, car ils ont une probabilité non nulle de traverser la barrière par effet tunnel [16].

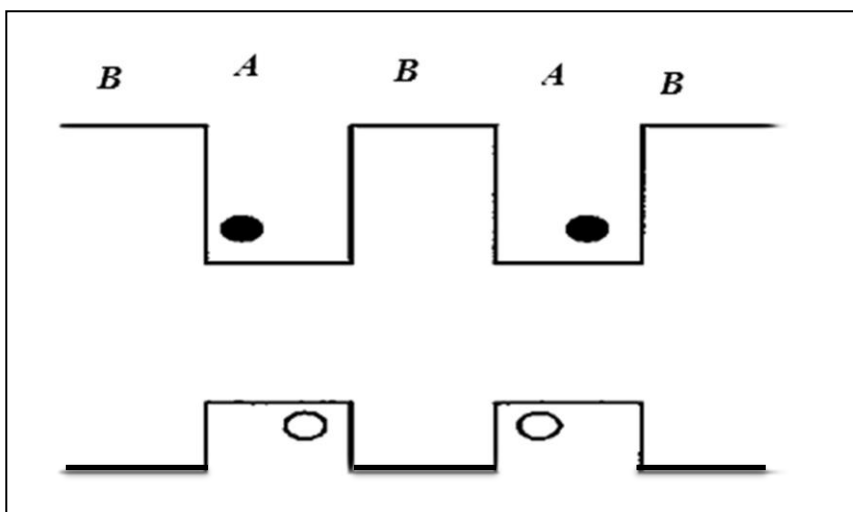


Figure I-12: Potentiel symétrique unidimensionnel V_z dans la BV et la BC d'un DPQ [14].

- **Multi Puits Quantique MPQ**

Il est constitué d'une succession alternée des couches de deux semiconducteurs, construit à partir de n puits quantiques séparés par $(n+1)$ barrières. Ce genre est à la base de la construction des super réseaux (voir la figure I-13) s'il vérifie les conditions suivantes :

- Les barrières doivent être convenablement minces pour coupler fortement les puits et agrandir les niveaux confinés en bandes d'énergie.
- Les largeurs de barrières et de puits doivent réaliser une périodicité prototype.
- Les semiconducteurs massifs doivent être structurellement similaires [16].

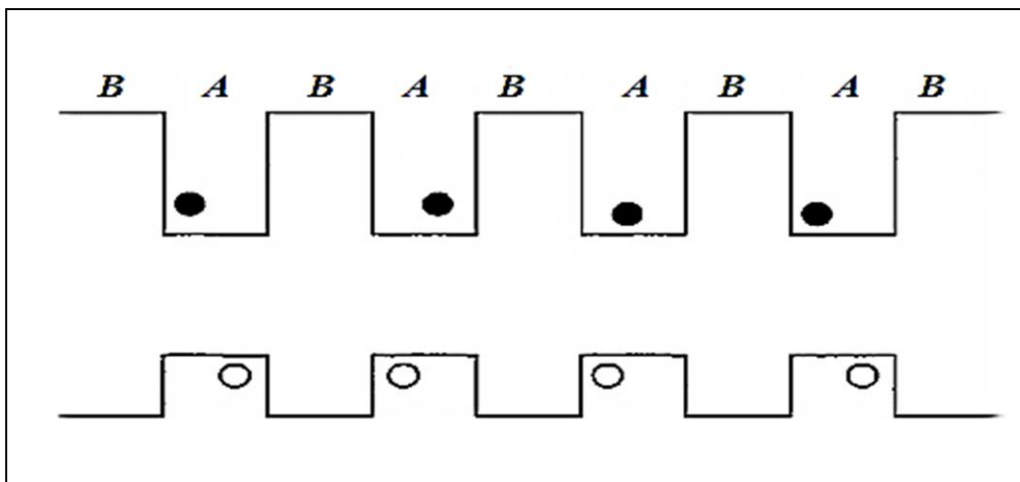


Figure I-13: Potentiel unidimensionnel symétrique V_z dans la BV et la BC d'un MPQ ou un SR [14].

I-4-2 : Différence entre Puits Quantique et Superréseau :

La différence entre un puits quantique et un superréseau peut être facilement observée dans la figure I- 14. La plus simple définition cristallographique d'un superréseau est un «réseau de réseaux». Par conséquent, toute séquence régulière des couches mur et barrière serait un superréseau. Une définition plus utile ici est la définition électronique dans laquelle, nous appelons une telle structure régulière un superréseau seulement s'il y a une pénétration significative de la fonction d'onde entre les puits adjacents. Autrement, la forme de la structure multicouche est essentiellement la même comme un ensemble de puits indépendants, il serait plus utile, dans ce cas, de l'appeler structure à multiple puits quantique «MPQ». S'il y a une pénétration significative de la fonction d'onde entre les puits, nous verrons des phénomènes tels que (minibandes), la structure est alors décrite comme un superréseau. Les

Chapitre I : Concepts Théoriques sur les Superréseaux Semiconducteurs

(minibandes) surviennent lorsque les puits quantiques sont joints d'une façon régulière, à l'image des bandes d'énergie qui surviennent dans les matériaux cristallins.

Généralement, pour les couches de puits et de barrière d'une épaisseur d'environ 50 \AA , tel que le système *GaAs / AlGaAs*, avec une concentration typique d'*Al* d'environ 30% dans les barrières, la structure sera probablement mieux décrite comme un multiple puits quantique [12].

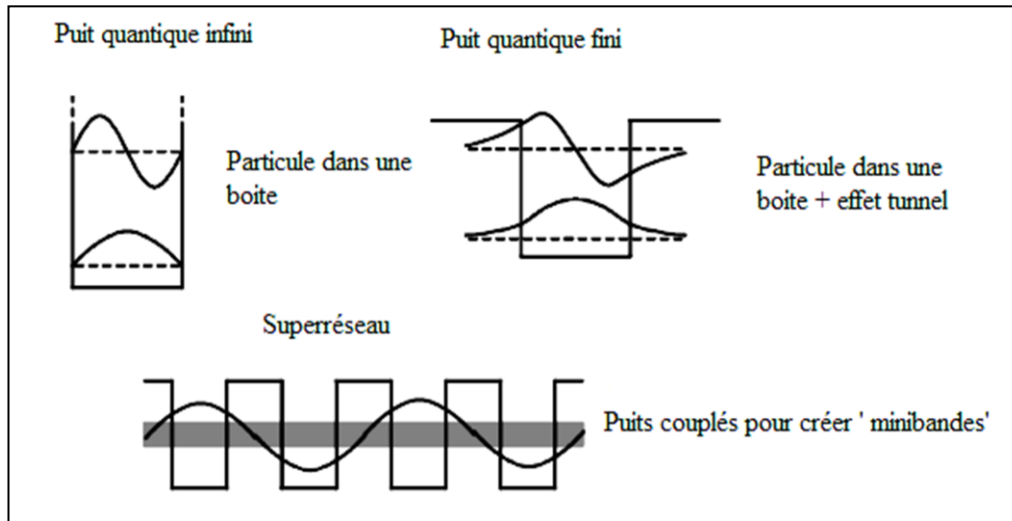


Figure I-14: Comparaison de comportement des puits quantiques infini, fini et un superréseau [12].

Dans ce qui précède, on a abordé essentiellement les hétérostructures à dimensionnalité réduite en spécifiant le cas d'une seule dimension représentée par un puits quantique, en citant ses différents types et en mentionnant ses caractéristiques principales. Ces dernières, feront l'objectif d'une étude ultérieure qui s'intéresse principalement aux propriétés physiques des super réseaux basés sur les semiconducteurs III-V.

Dans ce qui suit, on évoquera les propriétés électroniques et structurales des semiconducteurs binaires qui sont à la base de nos superréseaux.

I-5 : Propriétés Physiques des Semiconducteurs Binaires :

I-5-1 : Propriétés Structurales :

A présent, on va décrire brièvement les deux types les plus pertinents de structures dans lesquels la majorité des matériaux semiconducteurs se cristallisent, il est très fréquent d'obtenir à la fois les structures cubiques (de Zinc blende) et hexagonales (de wurtzite) en fonction des conditions de croissance [18].

- **Zinc Blende ZB (Sphalérite)**

La structure «ZB» a deux sous réseaux cubiques faces centrées «cfc», l'un d'eux est formé par des cations et est déplacé d'un quart $1/4$ de la diagonale du cube le long de la direction $[111]$, l'autre est formé par des anions. La dimension de la maille élémentaire est définie en terme d'une constante de réseau a . la structure ZB contient quatre molécules du composé II-VI par exemple [18]. Cette structure est représentée dans la figure I-15.

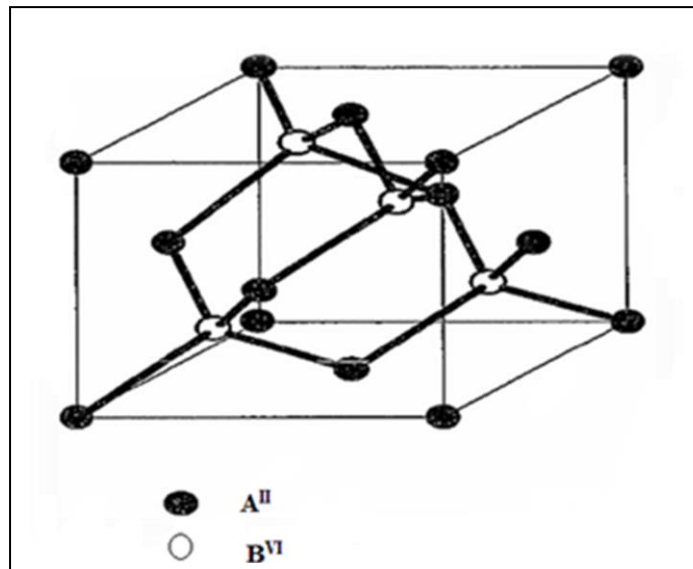


Figure I-15: La maille élémentaire de Zinc Blende [19].

- **Wurtzite WZ (Zinicite)**

La structure wurtzite présente des caractéristiques similaires à celle du «ZB», mais dans ce cas on a deux réseaux hexagonaux compacts «hcp» décalés l'un par rapport à l'autre de $3/8$ [16] au lieu de $1/4$ dans les «cfc» [18]. Cette structure est schématisée dans la figure I-16.

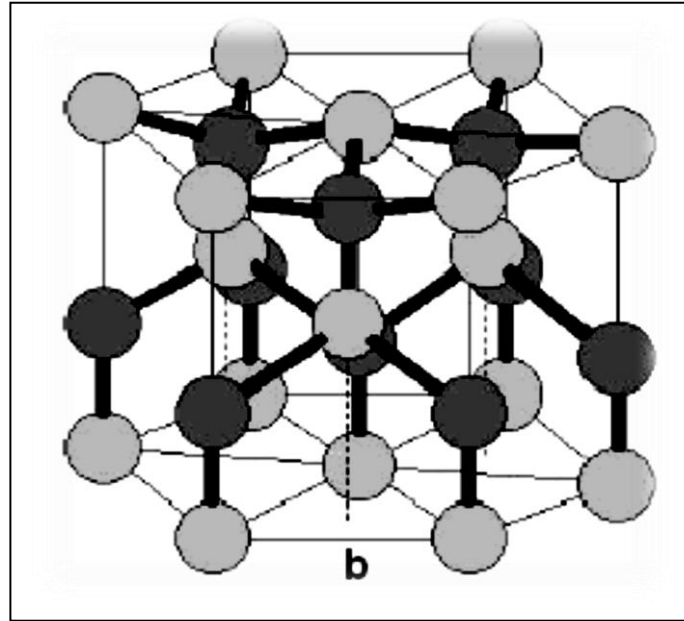


Figure I-16: la structure wurtzite [20].

I-5-2 : Propriétés Electroniques :

- **Gap Direct et Gap Indirect**

Les extremums de la structure de bande des semiconducteurs II-VI sont situés au centre de la zone de Brillouin (voir la figure I-17). Les semiconducteurs II-VI ont une bande de conduction «BC» qui est due à l'orbitale s de l'atome de la colonne II et une bande de valence «BV» qui est due à l'orbitale p de l'atome de la colonne VI. Dans l'espace réciproque, si le maximum de la «BV» et le minimum de la «BC» correspondent à la même valeur de k (vecteur d'onde), on dit que le semiconducteur est à gap direct. Si au contraire, ils correspondent à des valeurs de k différentes, on dit que le semiconducteur est à gap indirect. La distinction entre semiconducteurs, en tenant compte du gap et de la structure correspondante, est importante notamment pour des applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons[16].

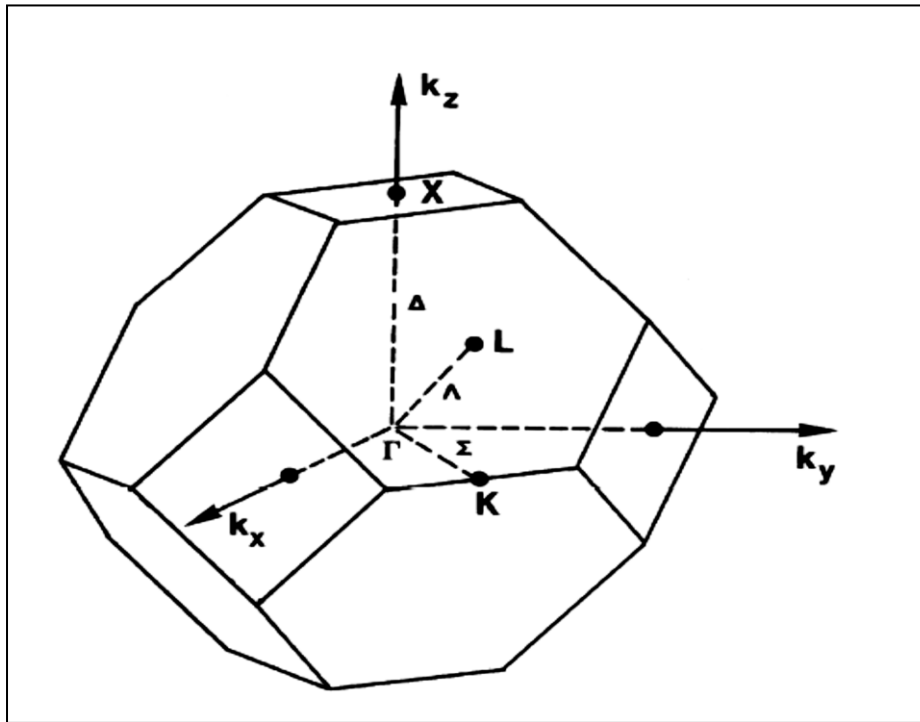


Figure I-17: La première zone de Brillouin d'une structure cubique ZB plus les points et lignes de hautes symétrie [21].

La grande diversité des puits quantiques et des superréseaux, soit dans leurs compositions physico-chimiques, soit dans leurs structures, propriétés et applications, permet d'élaborer de nouveaux matériaux dont leurs propriétés peuvent être contrôlées selon le besoin, en agissant sur les différents facteurs qui contribuent à leur fabrication. Ces deux configurations, de par leur conception et leurs propriétés très précieuses, auront une place énorme dans la technologie futuriste.

Bibliographie du Premier Chapitre:

- [01] P.Bhattacharya. **Properties of III-V Quantum Wells and Superlattices**. Michigan University, USA (Jul1996).
- [02] Mark Fox, Radu Ispasoiu. **Quantum Wells, Superlattices and Band Gap Engineering**.
- [03] Robert A. Rodgers. **LO-Plasmon Modes in Doped GaAs/ Al_xGa_{1-x}As Superlattices**. Indiana University of Pennsylvania (Aug 2011).
- [04] Zakaria.M. Abd El-Fattah. **Low Dimensional Systems and Nanostructures Superlattices and Vicinal Surfaces** (2008/2009).
- [05] Jean. M. Lachaine, M.Sc .**Optically-Exited Excitonic States in Semiconductors Superlattices**. Lakehead University, Canada (Aug 7th, 2002).
- [06] **Semiconductors Superlattices Background**.
- [07] Christian Mietze. **Cubic AlN/GaN Multi Quantum Wells for Unipolar Device Applications**. Paderborn Université (28 Feb 2013).
- [08] Tanwin Chang, Ph.D. **The Quantification of Hétérointerfacial Quality for the Study of the Optical Properties of Type II GaAs/AlAs Superlattices**, Chicago university, USA.
- [09] Yip Raymond, Yeu Fai . **Growth, Characterization and Design of InP-Based Strained Layer Multiple Quantum wells for Optical Modulator Devices**. Montréal Université (Sep 1997).
- [10] Ali Lanacer. **Etude des Propriétés Optiques de Puits Quantiques Contraints Ultra-Minces d'InAs/InP**. Université de Montréal, Canada (28 Juin 2006).
- [11] D. Bimberg, M. Grundmann and N. N. Ledentsov. **Quantum Dots Hétérostructures** Ed John Wiley et Sons Chichester (1999).
- [12] David A. B. Miller. **Optical Physics of Quantum Wells**. Rm. 4B-401, AT et Bell Laboratories, Holmdel, NJ07733-3030, USA.
- [13] Selmane Djamel. **Modélisation et Optimisation des Lasers à Puits Quantiques à base de Nitrures et de Matériaux II-VI**. Université de Hassiba BenBouali Chlef, Algérie (26 Avr 2009).
- [14] Paul Harrison. **Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures**. Leeds University, Uk, 2nd Ed (2005).

- [15] Lura Stumpe, Ph.D. **Magnetic Structure Factor for MnTe/ZnTe semiconductors Superlattices**. Missouri University, Columbia (Aug 2003).
- [16] Boucharef Mohamed. **Etude des Propriétés Structurales et Electroniques des Hétérostructures Semiconductrices**. Université de Sidi Bel Abbes (2015/2016).
- [17] Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials. **Wide Band Gap II-VI Semiconductors: Growth and Properties**. Ed Kasap.S, Capper.P (2007).
- [18] Isaac Hernandez Calderon .**Optical Properties and Electronic Structures of Wide Band Gap II-VI Semiconductors**. CINVESTAV-IPN, Mexico.
- [19] Ning Dai, M.S ,Ph.D. **Magneto-Optical Investigation of Diluted Magnetic Semiconductor Hétérostructures: Spin Superlattices and Single Barriers**. University of Notre Dame, Indiana (Sep 1993).
- [20] Riad Boulkroune. **Élaboration et Caractérisation de Films de Polystyrène Dopés Par des Nanocristaux du Semiconducteur ZnS**. Université de Mentouri, Constantine (2008).
- [21] Henry Mathieu. Hervé Fanet. **Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques**. Dunod 6ème Ed, Paris (2009).

Chapitre II :

Méthodes de Calcul

Chapitre II : Méthodes de Calcul

Depuis les antiquités. La description d'un système de N Particules en interactions (ou problème à N corps) n'admet pas des solutions analytiques. Et afin de résoudre l'équation de Schrödinger et calculer les propriétés électroniques et structurales des systèmes plus complexes. Des méthodes ab initio (premier principe) sont devenues aujourd'hui un outil de base. Elles sont aussi utilisées pour prédire des nouveaux matériaux, grâce à leur capacité de remplacer des expériences très coûteuses et irréalisables en laboratoire. Les études ab initio ont donné des résultats fiables en les comparant avec des mesures expérimentales. Parmi ces méthodes, on spécifie la méthode linéaire des orbitales muffin-tin «FP LMTO» [01-08], qui est une des plus utilisées, actuellement, en additionnant la théorie de la fonctionnelle de la densité «DFT».

Dans ce chapitre, nous allons développer les techniques de calcul qui nous ont permis de mener l'étude structurale et électronique des semiconducteurs, nous commencerons par décrire brièvement les différentes approximations, qui servent comme une base de construction de la méthode FP LMTO, qui nous va l'offrir une grande partie de ce chapitre.

II-1 : Equation de Schrödinger d'une Particule à l'Etat Stationnaire :

On considère un solide formé de noyaux et d'électrons provenant des atomes qui le constituent. Signalons les coordonnées des électrons par r_1, r_2, \dots et par R_1, R_2, \dots celles des noyaux. L'état stationnaire des particules est décrit par l'équation de Schrödinger :

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

Où H est l'Hamiltonien total du cristal, Ψ sa fonction d'onde (vecteur propre) et E son énergie (valeur propre). La fonction d'onde du cristal dépend des coordonnées de toutes les particules qui le composent.

$$\Psi(r_1, r_2, \dots; R_1, R_2, \dots) = \Psi(r_i, R_\alpha) \quad (\text{II.2})$$

Où r_i représente les coordonnées généralisées des électrons et R_α les coordonnées des noyaux.

Chapitre II : Méthodes de Calcul

L'Hamiltonien exact du cristal résulte de la présence de toutes les énergies électrostatiques d'interaction: répulsion ou attraction selon la charge des particules (noyaux, électrons) :

$$H = T_e + T_n + U_e + U_n + U_{en} + V \quad (\text{II.3})$$

1) l'énergie cinétique des électrons T_e :

$$T_e = \sum_i T_i = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) \quad (\text{II.4})$$

Où m est la masse de l'électron ; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$: h étant la constante de Planck ; $\Delta_i = \nabla_i^2$:

étant l'opérateur de Laplace pour le i -ième électron.

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

2) l'énergie cinétique des noyaux T_n :

$$T_n = \sum_\alpha T_\alpha = \sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_\alpha \right) \quad (\text{II.5})$$

ou M_α étant la masse du noyau et $\Delta_\alpha = \frac{\partial^2}{\partial X_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z_\alpha^2}$

3) L'énergie d'interaction des électrons (deux par deux) U_e :

$$U_e = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} U_{ij} \quad (\text{II.6})$$

4) L'énergie d'interaction des noyaux (deux par deux) U_n :

$$U_n = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{4\pi\epsilon_0 |R_\alpha - R_\beta|} e^2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} U_{\alpha\beta} \quad (\text{II.7})$$

$Z_\alpha Z_\beta$ Sont respectivement les charges des noyaux α, β .

5) L'énergie d'interaction entre noyaux et électrons U_{en} :

$$U_{en} = \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{4\pi\epsilon_0 |r_i - R_\alpha|} e^2 = \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha} U_{i\alpha} \quad (\text{II.8})$$

Chapitre II : Méthodes de Calcul

6) L'énergie de toutes les particules dans un champ appliqué V :

$$V = V(r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) \quad (\text{II.9})$$

Dans 1cm^3 d'un solide cristallin on trouve près de 5.10^{22} atomes, ce qui mène à un nombre important de variables de l'ordre de 10^{24} . Selon l'expression employée par P.A.M. Dirac en 1929 [09,10] "tout progrès dans ces connaissances dépend essentiellement de l'élaboration de techniques d'approximation aussi précises que possible". Cela nous impose de diriger vers le concept des approximations.

II-2 : Théorie de la Fonctionnelle de la Densité DFT:

II-2-1 : Approximation de Born Oppenheimer :

La première approximation a été apporté pour la résolution des problèmes de nombreux corps, est l'approximation de Born Oppenheimer, appelée aussi approximation adiabatique [11], ce qui simplifiera la solution de l'équation de Schrödinger en séparant les mouvements nucléaires et électroniques. Puisque les noyaux sont beaucoup plus lourds que les électrons (comme la masse des électrons est très faible devant celle des noyaux $\frac{m_e}{m_n} = \frac{1}{1830}$), les noyaux se déplacent plus lentement que les électrons, donc les électrons réagissent de façon quasi instantanée de la configuration nucléaire de charge.

La distribution électronique dans un système à plusieurs corps ne dépend pas des vitesses nucléaires, mais de leurs positions. L'approximation de Born Oppenheimer permet ainsi aux deux parties (nucléaire et électronique) du problème à résoudre indépendamment, Donc un Hamiltonien excluant le mouvement nucléaire peut être établi, Qui peut être encore simplifié par la théorie de la fonctionnelle de la densité.

L'Hamiltonien du cristal peut alors être scindé en une partie électronique

$H_e (H_e = T_e + U_e + U_{en} + U_n)$ et une partie nucléaire $H_n (H_n = T_n + E(R))$, ce qui permet de présenter la fonction d'onde du cristal $\Psi(r, R)$ sous la forme d'un produit de la fonction d'onde des noyaux $\chi(R)$ et celle des électrons $\Psi_e(r, R)$:

$$\Psi(r, R) = \Psi_e(r, R) * \chi(R) \quad (\text{II.10})$$

Chapitre II : Méthodes de Calcul

L'équation de Schrödinger est résolue en fixant les positions des noyaux. Alors le système d'équations à résoudre devient :

$$[T_e + U_e + U_{en} + U_n] \Psi_e(r, R) = E(R) \Psi_e(r, R) \quad (\text{II.11})$$

$$[T_n + E(R)] \chi(R) = E \chi(R) \quad (\text{II.12})$$

$E(R)$ est la fonctionnelle d'énergie électronique, elle définit aussi la surface d'énergie potentielle des noyaux, dite de Born Oppenheimer.

II-2-2 : Approximation de Hartree Fock :

En 1928, Hartree [12] a proposé une approximation, dans laquelle chaque électron se déplace indépendamment des autres électrons dans le champ nucléaire externe et l'interaction entre tous les autres électrons et l'électron donné, peut être remplacé par l'action d'un champ électrostatique induit par la densité de charge moyenne sur les états de ces électrons. En faisant appel à la notion du champ auto cohérent (self consistent) ici, chaque électron est attribué une fonction séparée Φ_i , soit une orbitale, tandis que la fonction d'onde complète d'un système d'électrons est représentée par le produit de toutes les orbitales.

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \Phi_1 \Phi_2 \dots \Phi_i \quad (\text{II.13})$$

et l'équation d'un seul électron pour l'orbital Φ_i satisfait :

$$H_i \Phi_i(r) = \varepsilon_i \Phi_i(r) \quad (\text{II.14})$$

$$H_i = -\nabla^2 + V_c(r) + V_i(r) \quad (\text{II.15})$$

Ici, ∇^2 est l'opérateur d'énergie cinétique, $V_c(r)$ est l'énergie potentielle d'un électron au point r , résultant de l'interaction avec les noyaux et la densité totale de la charge de tous les électrons du système donné. Pour compenser l'auto interaction autorisée dans $V_c(r)$, l'expression suivante a été introduite:

$$V_i(r) = -n_i \int 2 \frac{\Phi_i^*(r') \Phi_i(r)}{|r' - r|} dr' \quad (\text{II.16})$$

Où n_i est le nombre des électrons dans l'orbitale i .

Cependant, l'approximation d' Hartree ne satisfait pas le principe de Pauli, la fonction d'onde totale d'un système doit être antisymétrique par rapport à l'interchangeabilité des paires d'électrons, tandis que les fonctions d'onde dans (II.13) sont complètement symétriques. La méthode Hartree Fock prend en compte le

Chapitre II : Méthodes de Calcul

principe de Pauli pour approcher la fonction d'onde totale à plusieurs électrons par le déterminant de Slater :

$$\left[-\nabla^2 + V_c(r)\right]\Phi_i(r) - \sum_j n_j \Phi_j(r) \int 2 \frac{\Phi_j^*(r)\Phi_i(r')}{|r'-r|} dr' = \varepsilon_i \Phi_i(r) \quad (\text{II.17})$$

Lorsque nous remplaçons cette fonction d'onde à plusieurs électrons dans l'équation de Schrödinger, et en utilisant le principe variationnel de Ritz,

$$\delta \left[\frac{\int \Psi^* (H - E) \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} \right] = 0 \quad (\text{II.18})$$

on obtient l'équation de Hartree Fock :

$$\left[-\nabla^2 + V_c(r)\right]\Phi_i(r) - \sum_j n_j \Phi_j(r) \int 2 \frac{\Phi_j^*(r)\Phi_i(r')}{|r'-r|} dr' = \varepsilon_i \Phi_i(r) \quad (\text{II.19})$$

À l'heure actuelle, la méthode Hartree Fock est la meilleure méthode pour un seul électron. Elle a également été la plus efficace pour le calcul de la structure électronique des systèmes à plusieurs particules finies. Cependant, leur application aux systèmes macroscopiques à plusieurs électrons présente des difficultés, elle n'est plus valable.

II-2-3 : Formalisme de la DFT :

Le but primordial de la DFT est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique par une densité électronique en tant que quantité de base pour les calculs, et donner exactement l'énergie totale du système. La densité électronique est intéressante, car elle ne dépend que des 3 coordonnées spatiales.

La DFT donne majoritairement des résultats très approuvables avec l'expérimentation grâce à son aspect prédictif qui lui confère une force additionnelle. Elle est basée sur plusieurs théorèmes, on verra citer les plus importants parmi eux :

II-2-3-1 : Théorèmes de Hohenberg et Kohn :

La DFT basée sur les théorèmes de Hohenberg et Kohn en 1964[13] montrant que:

- **Toutes les propriétés de l'état fondamental d'un gaz d'électrons en interaction peuvent être décrites par une certaine fonctionnelle de la densité électronique $\rho(r)$, qui va changer ,si le potentiel externe $V_{\text{ext}}(r)$ change [14] :**

$$E = E[\rho(r)] = \int V_{\text{ext}}(r)\rho(r)dr + F[\rho(r)] \quad (\text{II.20})$$

Chapitre II : Méthodes de Calcul

Le terme $\int V_{ext}(r)\rho(r)dr$ représente l'interaction noyaux électrons. Cela signifie que, si on connaît la densité électronique de l'état fondamental, toutes les propriétés du système peuvent être complètement déterminées.

$F[\rho(r)]$ Est la fonctionnelle de Hohenberg et Kohn. C'est une fonction universelle de la densité électronique $\rho(r)$ (elle ne dépend pas du potentiel externe qui agit sur le système), qui contient les contributions cinétiques et coulombiennes à l'énergie. Elle est donnée par :

$$F[\rho] = T[\rho(r)] + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(r')\rho(r)}{|r'-r|} d^3r' + E_{xc}[\rho(r)] \quad (\text{II.21})$$

$T[\rho(r)]$ est l'énergie cinétique des électrons ; $\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(r')\rho(r)}{|r'-r|} d^3r'$: le terme électrostatique de Hartree ; $E_{xc}[\rho(r)]$ l'énergie d'échange et de corrélation , apparaît comme la différence entre la vraie énergie cinétique et celle d'un gaz d'électrons sans interaction d'une part, et la différence entre la vraie énergie d'interaction et celle de Hartree d'autre part.

➤ **La densité exacte de l'état fondamental minimise la fonctionnelle de l'énergie totale $E[\rho]$ (Principe variationnel)[15,16]:**

$$E_0 = \min E[\rho(r)] \quad (\text{II.22})$$

La valeur minimale de $E[\rho(r)]$ est l'énergie de l'état fondamental, qui apparaît comme une fonctionnelle de la densité. Pour tout potentiel extérieur, la densité qui minimise ce fonctionnel est la densité exacte de l'état fondamental [17].

Les deux théorèmes proposés par Hohenberg et Kohn permettent de déplacer le problème posé par la résolution d'une équation de Schrödinger multiélectronique. En effet, la méthode DFT nous enseigne que si la forme de la fonctionnelle est connue, il est relativement facile, pour un potentiel externe donné, de déterminer l'énergie de l'état fondamental. En posant le problème sur la formulation de la fonctionnelle $F[\rho(r)]$.

II-2-3-2 : Equations de Kohn et Sham :

Kohn et Sham [18] ont rejeté toute la complexité du problème à N corps dans E_{xc} .Ils ont écrit la densité électronique comme étant l'ensemble des densités des particules indépendantes. L'équation de Schrödinger d'une seule particule est résolue

Chapitre II : Méthodes de Calcul

par le champ auto cohérent de la densité exacte. Ces équations sont rédigées au-dessous :

$$\{T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r)\} \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (\text{II.23})$$

Où Ψ_i : Les orbitales de la particule ; ε_i : Valeurs propres correspondantes ; T : l'opérateur de l'énergie cinétique ; V_{ei} : Potentiel de Coulomb dû au noyau atomique ; V_H : Potentiel de Hartree et V_{xc} : Potentiel d'échange et de corrélation.

La densité est donnée par l'ensemble des orbitaux permis :

$$\rho(r) = \sum_{occup} \Psi_i^*(r) \Psi_i(r) \quad (\text{II.24})$$

La dépendance entre V_H, V_{xc} et ρ est donnée par :

$$V_H(r) = e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r' - r|} d^3r' \quad (\text{II.25})$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\partial E_{xc}[\rho]}{\partial \rho(r)} \quad (\text{II.26})$$

Pour une seule particule : La densité de charge, l'Hamiltonien de Kohn et Sham et le réseau ont la même périodicité, ça permet au théorème de Bloch de soutenir la DFT, car la densité dépendante du potentiel couple implicitement les orbitales de (KS) et les moments de Bloch.

II-2-3-3 : Théorie de la Densité Local LDA :

L'approximation la plus fréquente de la fonctionnelle d'échange et de corrélation est le LDA, où E_{xc} est l'énergie d'échange et de corrélation d'un gaz électronique homogène de densité $\rho(r)$.

$$E_{xc}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dr \quad (\text{II.27})$$

Où $g_0(|r - r'|, \lambda, \rho(r))$ est la fonction de corrélation paire d'un système d'électrons homogène.

L'approximation de la densité électronique locale est:

$$E_{xc}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho) dr \quad (\text{II.28})$$

Ici, ε_{xc} est la contribution de l'échange et de corrélation dans l'énergie totale (par électron) d'un gaz homogène d'électrons en interaction avec la densité $\rho(r)$. Cette approximation est assez bonne quand $\rho(r)$ varie lentement [19]. L'expression d'interpolation pour ε_{xc} a été donnée par Hedin et Lundqvist [20].

II-3 : La Méthode Utilisée FP LMTO :

Dans le cas des matériaux cristallins à haute symétrie et de forte compacité. Des approximations calculatoires sont couramment fiables, plus précises et plus efficaces à appliquer. Ces approches permettent de minimiser le coût en temps machine et humain. Parmi eux : l'onde sphérique augmentée «ASW», l'onde plane linéairement augmentée «LAPW» [21] et le muffin tin linéairement orbitale «LMTO», qui ont été également utilisées pour l'étude des matériaux spécifiquement leurs propriétés physicochimiques.

LMTO utilise un ensemble d'orbitales qui forment un ensemble de base complète pour un potentiel muffin tin. Le potentiel muffin tin est constitué de deux parties : Potentiel sphériquement symétrique à l'intérieur des zones sphériques centrées sur les sites atomiques et des potentiels constants dans la région interstitielle.

$$V(r - R_l) = \left\{ \begin{array}{l} V(|r - R_l|) \dots si \dots |r - R_l| \leq S_m \\ v_{mt} \dots \dots \dots \text{autre part} \end{array} \right\} \quad (\text{II.29})$$

Où S_m est le rayon de muffin tin et v_{mt} est un constant.

Les méthodes utilisant un tel potentiel, sans aucune approximation sont appelés méthodes de potentiel plein (full potential). La raison pour laquelle le potentiel muffin tin est utile pour construire un ensemble de base, est que les termes non sphériques à l'intérieur des sphères sont petits et le potentiel de la région interstitielle varie en douceur.

Les fonctions de la région interstitielle doivent être continuellement et différemment aux solutions des potentiels sphériques à l'intérieur des sphères, dans lequel l'équation radiale de Schrödinger peut être résolue numériquement.

Les fonctions de Hankel [22,23] sont utilisées dans presque toutes les versions de potentiels complets de LMTO et il est légèrement choisi négatif $\kappa^2 \approx 0$. C'est parce que, dans la zone interstitielle le potentiel varie lentement. L'énergie cinétique $\kappa^2 - v_{mt}$ est approchement constante ou nulle. Un κ indépendant ainsi que la linéarisation des fonctions d'onde à l'intérieur des sphères, vont nous permettre de construire un ensemble de base d'énergie indépendante. Par le principe variationnel, nous avons seulement besoin de résoudre un problème de diagonalisation standard au lieu d'une équation séculaire non linéaire.

Chapitre II : Méthodes de Calcul

Un compte rendu complet de la mise en œuvre FP LMTO serait trop technique pour représenter ici. Nous décrivons uniquement quelques-unes des caractéristiques principales et les paramètres de convergence du procédé. L'approche de base de toutes les méthodes de FP LMTO est de diviser la densité de charge, les fonctions d'onde et les potentiels dans une partie lisse définie dans tout l'espace et la différence entre les parties variantes rapidement d'une expansion harmonique sphérique des fonctions lisses à l'intérieur des sphères[24-28].

II-3-1 : Sphères Muffins Tin :

Dans les sphères muffin tin, les bases, la densité des électrons et le potentiel, sont des combinaisons linéaires d'ondes sphériques correspondantes à la fonction d'enveloppe de la sphère muffin tin. La fonction d'enveloppe peut être étendue dans une série de fonctions sphériques de Bessel.

Dans cette approche, le cristal est divisé en sphères non chevauchées autour des sites atomiques, où la densité et le potentiel varient rapidement, et dans la région interstitielle entre les sphères, la densité et le potentiel varient lentement. Dans l'interstitiel, la fonction de base, la densité des électrons et le potentiel sont développées en série de Fourier.

Une des questions les plus importantes est le choix des rayons muffin-tin. En supposant que toutes les extensions sont prises à la convergence, la densité de charge et le potentiel dépendent des rayons muffin tin que par la dépendance des fonctions de base sur les rayons. En supposant que l'Hamiltonien est le même à l'intérieur et à l'extérieur des sphères, les rayons muffin tin sont des paramètres variationnels et le choix optimal minimise l'énergie totale. Si la base est suffisamment grande, l'énergie est insensible au choix des rayons [29].

Le potentiel de muffin tin (illustré dans la figure II.1) est pris pour arborer un ion isolé à l'intérieur d'une sphère de rayon r_0 autour de chaque nœud du réseau, et est pris égal à zéro ailleurs

(r_0 étant choisi préféablement petit afin que les sphères ne se recouvrent pas). Le potentiel de muffin-tin peut être absolument défini pour tout r par :

$$\begin{aligned} U(r) &= V(|r - R|), & \text{lorseque } |r - R| < r_0 & \quad (\text{région de coeur ou atomique}) \\ &= V(r_0) = 0, & \text{lorseque } |r - R| > r_0 & \quad (\text{région interstitielle}) \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

Chapitre II : Méthodes de Calcul

$V(r)$ s'annule, si son argument dépasse r_0 , $U(r)$ peut être écrite clairement comme :

$$U(r) = \sum_R V(|r - R|) \quad (\text{II.31})$$

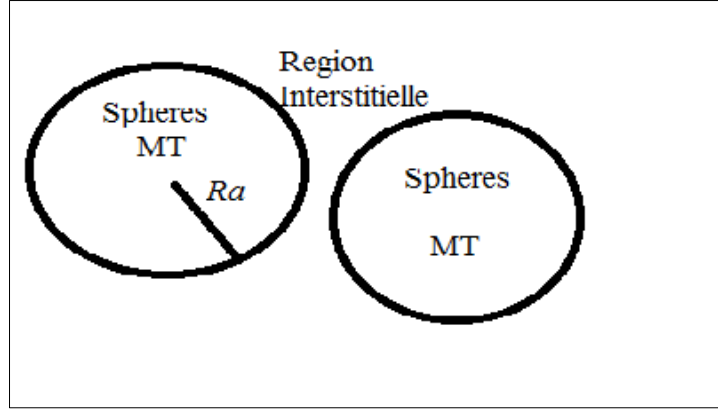


Figure II-1 : Potentiel Muffin Tin.

II-3-2 : Densité de Charge :

Un tel matériau cristallin a une densité de charge, qui est égal à la somme de deux contributions :

- la densité de charge totale à l'intérieur de la sphère MT, étant donnée comme un développement d'harmoniques sphériques.

$$\rho_\tau(r_\tau) = \sum_{L^n} \rho_{L^n} (r_\tau) i^{L^n} Y_{L^n}(\hat{r}_\tau) \quad (\text{II.32})$$

- la densité de charge à l'extérieur de la sphère MT, en suivant la même démarche.

En comptant l'intégrale de la zone de Brillouin $\tilde{T}_{L'K'LK}^{\tau(i)}$. Par l'utilisation du principe variationnel. Pour calculer la densité de charge :

$$\tilde{T}_{L'K'LK}^{\tau(i)} = \sum_{K\lambda} 2 f_{K\lambda} A_{L'K'\tau}^{K\lambda*} B_{LK\tau}^{K\lambda} \quad (\text{II.33})$$

II-3-2-1: Harmoniques Sphériques :

L'harmonique sphérique Y est une fonction propre de la partie angulaire de l'équation de Laplace qui est définie comme suit :

$$Y_{lm}(\hat{r}) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \alpha_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (\text{II.34})$$

qui est orthonormalisée dans une sphère S :

$$\int_S Y_{l'm'}^*(\hat{r}) Y_{lm}(\hat{r}) d\hat{r} = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (\text{II.35})$$

Où P_l^m sont des polynômes de Legendre augmentés, tandis que α_{lm} sont des coefficients de normalisation, la superposition de deux harmoniques sphériques est donnée par :

$$Y_L^*(\hat{r}) Y_L(\hat{r}) = \int_{L''} C_{LL}^{L''} Y_{L''}(\hat{r}) \quad (\text{II.36})$$

$$\text{Où } C_{LL}^{L''} = \int_S Y_L(\hat{r}) Y_{L''}(\hat{r}) Y_L^*(\hat{r}) d\hat{r} \quad (\text{II.37})$$

sont des coefficients de Gaunt. Ils sont égaux à zéro [30].

II-3-3 : Bande d'Énergie :

La théorie des bandes d'énergie est dépende de la résolution de l'équation de Schrödinger d'un seul électron dans le cas où le potentiel effectif a une symétrie de translation d'un réseau cristallin périodique (Théorème de Bloch) :

$$V(r + R) = V(r) \quad (\text{II.38})$$

Où R est le vecteur de translation du réseau qui est défini comme suit:

$$R = m_1 a_1 + m_2 a_2 + m_3 a_3 \quad (\text{II.39})$$

Les vecteurs $\{a_i\}$ sont des vecteurs de l'espace réel du réseau de Bravais qui couvrent la cellule cristalline et $\{m_i\}$ sont des nombres entiers.

Dans ce cas, les fonctions propres $\Psi_j(K)$ et les valeurs propres $\varepsilon_j(K)$ sont fonctions d'un vecteur K , dans l'espace réciproque, et on peut caractériser tous les états d'électrons par des vecteurs K situés à l'intérieur de la zone dite de Brillouin, plus l'indice de bande j , définis de telle sorte que $\varepsilon_j(K) \leq \varepsilon_{j+1}(K)$. Les valeurs propres $\varepsilon_j(K)$ constituent la structure de bande d'énergie. Celle-ci est l'une des caractéristiques physiques les plus fondamentaux d'un cristal, car elle décrit la liaison atomique et fournit une explication des propriétés de transport électronique des solides [31].

II-3-4 : Bienfaits et Méfaits de la Méthode LMTO :

La méthode LMTO sert à rendre facile le formalisme compliqué et la programmation élégante, due aux fonctions de Hankel augmentées, qui sont à la base de la méthode LMTO. Parmi les avantages les plus importantes :

- Les fonctions LMTO doivent être semblables aux véritables fonctions d'onde du cristal, qui deviennent une somme finie des fonctions LMTO. Si le potentiel cristallin est sous la forme muffin tin (sphérique à l'intérieur des sphères et constant à l'extérieur).
- La demi minimisation de la taille de base peut sauvegarder un sept-huitième du temps machine, la réduction de la mémoire demandée lors de calcul des grands systèmes et les calculs deviendront rapides et plus précis.
- La simplicité analytique des fonctions de Hankel solide (Les fonctions enveloppes), aide à bien performer les étapes à suivre et génère de propriétés utiles, telles que l'énergie qui caractérise la localisation de la fonction $\varepsilon = -k^2$.
- Le choix d'ensemble de base (atome orienté) pour chaque atome du tableau périodique, permet d'interpréter simplement et avec stabilité les résultats numériques et d'inclure un nouveau type d'atome.
- En élevant un électron du cœur, les énergies du niveau liaison cœur peuvent être directement calculées comme une différence de l'énergie totale.

La complexité de l'approche doit être soulignée comme un inconvénient principal et qui provoque deux effets nécessaires :

- Le nombre de paramètres considérable doit être choisi raisonnablement. Ceci débute par la division de l'espace (les rayons de la sphère atomique sont définis) et le choix de l'ensemble de base. Puis, un des paramètres de convergence (tels que la densité de charge) doit être indiqué.
- La difficulté de faire des modifications. Par exemple, l'évaluation matricielle de la valeur de l'opérateur du gradient $i\nabla$ entre deux fonctions d'onde.

Dans ce qui dépasse, nous avons abordé les diverses techniques de calcul utilisées dans notre manuscrit de mémoire, en particulier, les méthodes ab initio qui sont devenues aujourd'hui un outil de base pour le calcul des propriétés électroniques et structurales des systèmes plus complexes. En limitant notre étude sur la méthode FP LMTO basée sur la DFT. Notant que les résultats obtenus seront fournir dans le chapitre qui joint.

Bibliographie du Deuxième Chapitre :

- [01] O.K. Andersen, Solid State Commun. **13**, 133 (1973).
- [02] O.K. Andersen and R.G. Wolley, Mol. Phys. **26**, 905 (1973).
- [03] O. K. Andersen, Phys. Rev. B **12**, 3060 (1975).
- [04] A.R. William, J. Kübler, and C.D. Gelatt, Phys. Rev. B **19**, 6094 (1979).
- [05] H.L. Skriver. **The LMTO Method**. Springer Verlag, Berlin (1984).
- [06] O.K. Andersen and O. Jepsen, Phys. Rev. Lett. **53**, 2571 (1984).
- [07] O.K. Andersen, O. Jepsen, and D. Glötzl. **In Highlights of Condensed Matter Theory**, Ed by F. Bassani, F. Fumi, and M. P. Tosi , North Holland, New York (1985).
- [08] W.R.L Lambrecht and O.K. Andersen, Phys. Rev. B **34**, 2439 (1986).
- [09] BENALIA Salah Eddine. **Étude des Propriétés Structurales, Électroniques et Optiques des Skutterudites Remplis $\text{CeTr}_4\text{P}_{12}$ (Tr = Fe, Ru, Os) par la Méthode du Premier Principe (FP LMTO)**, Université DJILLALI Liabes de Sidi Bel Abbes (30 Sep 2009).
- [10] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (Londres), **123**, 714 (1929).
- [11] M.Born, J.R. Oppenheimer, Ann. Phys. **87**, 457 (1927).
- [12] D .R. Hartree. Proc. Cambridge Philos. Soc.**24**, 89 (1928).
- [13] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B **864**, 136 (1964).
- [14] P. Hohenberg and W. Kohn. **Inhomogeneous Electron Gas**. Phys. Rev. B **136**, 864 (1964).
- [15] W. Kohn and L. J. Sham. **Self Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects**. Phys. Rev. A **140**, 1133 (1956).
- [16] P.Fulde .**Electron Correlations in Molecules and Solids**.Springer,Verlag (1991).
- [17] D. Single, H. Krakauer, and C. S. Wang. Phys. B **34**, 8391 (1986).
- [18] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A 1133 (1965).
- [19] D. M. Ceperley and B. J. Alder. Phys. Rev. Lett, **45**, 566 (1980).
- [20] 7. L. Hedin and B. I. Lundqvist, **Explicit Local Exchange Correlation Potentials**. *J. Phys.* **C4**, 2064 (1971).
- [21] Anderson, O .K. Phys. Rev.B **12**, 3060 (1975).
- [22] M. Methfessel, PhD thesis, Katholiek Universiteit Nijmegen (1986).
- [23] E. Bott, Diplomarbeit, Technical University Darmstadt (1997); E. Bott,

Chapitre II : Méthodes de Calcul

- M. Methfessel, W. Krabs, and P. C. Smidt, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982).
- [24] M.Methfessel,phys. Rev. B **38** (1988).
- [25] M.Methfessel,M. van Schilfgaarde,and R .A.Casali. **In Electronic Structure and Physical Properties of Solides ; the uses of the LMTO Method**. Ed by Hugues Dreyssé , Springer lecture notes, Workshop Mont saint Odille, France, 1998, 114-147, Springer, Berlin (2000).
- [26] D.L.Price and B.R.Cooper,Phys.Rev. B **39**,4959 (1989).
- [27] K.H.Weyrich,Phys.Rev. B **37**,10269-10282 (1988).
- [28] S.Yu.Savrasov and D.Yu. Savrasov. Phys. Rev. B **46** ,12181-12195 (1992).
- [29] MERABET Mostefa. **Etude des Propriétés Structurales, Electroniques et Optiques des Super réseaux (GaP)_n/(AlP)_n et (BP)_n/(BAs)_n par la Méthode du Premier Principe (FP LMTO)**. Université DJILLALI liabes Sidi Bel Abbes (2012 /2013).
- [30] BOUCHAREF Mohamed. **Etude des Propriétés Structurales et Electroniques des Hétérostructures Semiconductrices**. Université DJILLALI Liabes de Sidi Bel Abbes (2015/2016).
- [31] J. M. Wills, O. Eriksson, M. Alouani, and D. L. Price. **Full Potential LMTO Total Energy and Force Calculation, Electronic Structure and Physics Properties of Solids**. Ed Hugues Dreyssé, Springer Verlag, Berlin, 148-167(2000).

Chapitre III :

Résultats et Interprétations

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Dans ce chapitre, nous étalerons et discuterons les propriétés structurales et électroniques des composés binaires *GaN* et *AlN* et de leurs super réseaux (*(GaN)_n/(AlN)_n*) pour les deux configurations ($n = 1$ et 2) dans la phase zinc blende, en utilisant la méthode linéaire des orbitaux muffins tin (FP LMTO) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et l'approximation de la densité locale (LDA).

III-1 : Détail de Calcul :

Pour étudier les propriétés structurales et électroniques de nos matériaux nous avons effectué la présente étude, dans laquelle, nous utilisons le code LmtArt [01] pour les calculs du potentiel total des orbitales muffin tin linéaire (FP LMTO). La méthode FP LMTO est basée sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) [02,05]. L'énergie d'échange et de corrélation a été choisie pour être celle de l'approximation locale de densité (LDA) de Perdew Wang [06]. La densité de charge est représentée à l'intérieur des sphères muffin tin (MTS) par des harmoniques sphériques jusqu'à $l_{\max} = 6$. L'intégration des points k sur la zone de Brillouin est effectuée sur la grille (6, 6, 6) par la méthode améliorée du tétraèdre [07].

III-2 : Propriétés Structurales :

L'étude des propriétés structurales constitue l'étape la plus importante, elle peut être considérée comme le fondement pour explorer d'autres propriétés (électroniques, optiques, élastiques, ...). qui dépendent du paramètre cristallin optimisé. Elle consiste à déterminer le paramètre du réseau à l'équilibre a_0 , le module de compressibilité B_0 et son dérivé B'_0 , c'est la raison pour laquelle nous avons effectué un calcul auto cohérent de l'énergie totale E_0 pour définir les valeurs du paramètre du réseau prises au voisinage du paramètre expérimental. Les paramètres d'équilibre sont obtenus en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction du volume V_0 par l'équation d'état proposée par Birch [08]:

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

Noter que

E_0 : est L'énergie d'équilibre,

V_0 : est Le volume d'équilibre,

N : représente l'ordre d'ajustement. Pour un ajustement du second ordre ($N = 2$).

B_0 : est Le module de compressibilité, il est optimisé au point minimal de la courbe $E(V)$, il mesure la résistance d'un matériau solide à une variation du volume et estime aussi leur réponse élastique à une pression hydrodynamique externe.

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

B'_0 : est La dérivée du module de compressibilité, la valeur de B'_0 est examinée habituellement entre 3 et 5. Elle est déterminée par l'équation suivante :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (\text{III.3})$$

Les paramètres d'équilibre sont déterminés en réduisant au minimum l'énergie tout en maintenant le volume fixe à la valeur expérimentale observée. Les valeurs optimisées s'avèrent en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles.

Les figures de III-1 à III-4 étalent les variations des énergies en fonction de volumes des différents matériaux binaires massifs et super réseaux.

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Les tableaux (III-1, III-2, III-3 et III-4) résument les propriétés structurales obtenues pour les quatre matériaux (GaN , AlN , $((GaN)_1/(AlN)_1)$ et $((GaN)_2/(AlN)_2)$).

III-2-1 : Les Binaires GaN et AlN :

III-2-1-1 : Nitrure de Gallium (GaN)

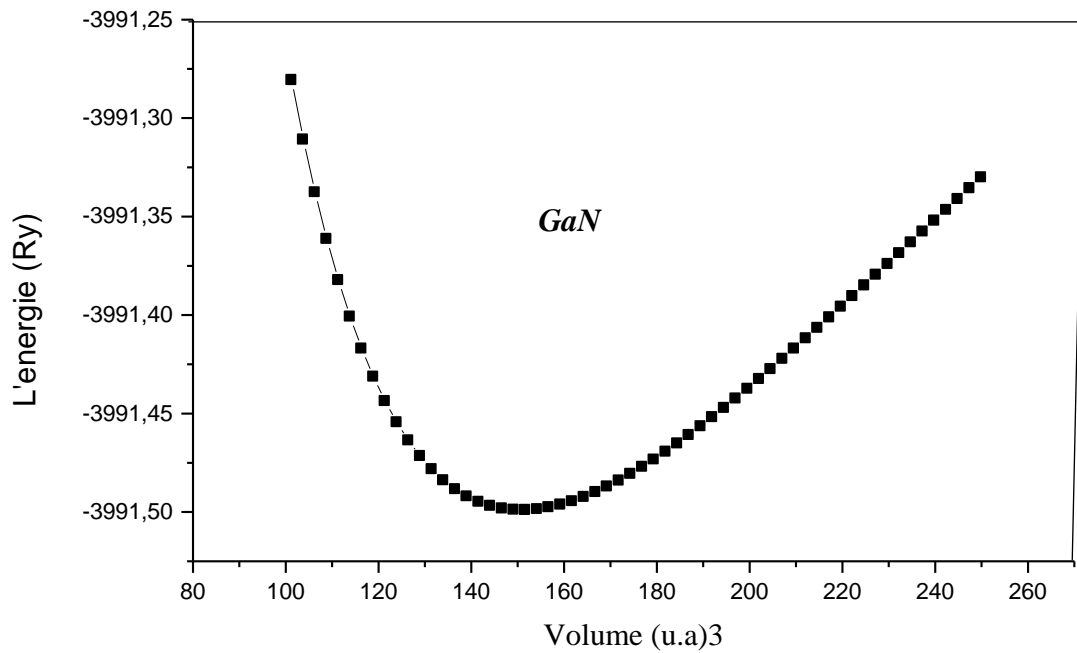


Figure III-1 : La variation de l'énergie totale en fonction du volume de GaN en phase ZB.

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-1 : Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' de *GaN*.

| <i>GaN</i> | a_0 (u.a) | B_0 (GPa) | B_0' | Références |
|-----------------------|---------------------|------------------|----------------|---------------|
| Nos propres résultats | 8.45 | 191.27302 | 4.44833 | |
| Calculs théoriques | 8.506 | 203.66850 | 4.04280 | [09,26] |
| | 8.361, 8.563, 8.415 | 205.30 | 4.29 | [17,26,27] |
| | 8.434 | 185 | 4.5 | [26] |
| Calculs expérimentaux | 8.506 | 185 | 4.5 | [10-18,28,29] |
| | 8.434 | | | [18] |
| | 8.563 | | | [18-20] |
| | 8.415 | | | [18,21,22] |
| | 8.544 | | | [23-25] |

III-2-1-2 : Nitrure d'Aluminium (*AlN*)

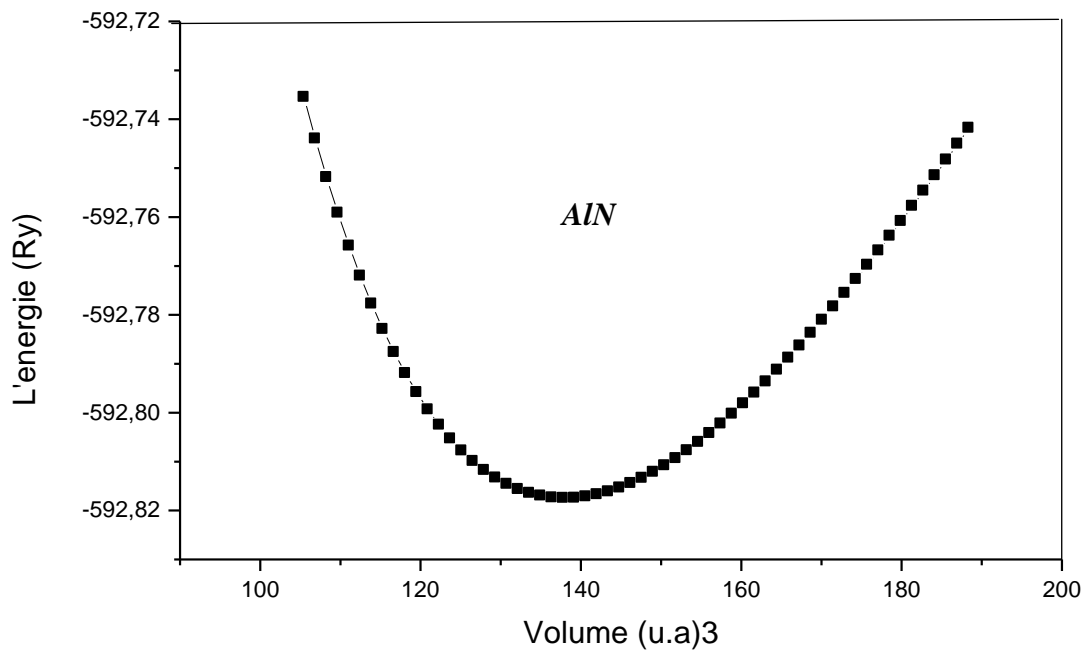


Figure III-2 : La variation de l'énergie totale en fonction du volume d'*AlN* en phase ZB.

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-2 : Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' d'*AlN*.

| <i>AlN</i> | a_0 (u.a) | B_0 (GPa) | B_0' | Références |
|-----------------------|--------------------|------------------|---------------|------------------|
| Nos propres résultats | 8.20 | 202.74058 | 3.9214 | |
| Calculs Théoriques | 8.279,8.316, 8.223 | 213.4157 | 4.0767 | [09,26] |
| | 8.316 | | | [09,17] |
| | 8.204,8.130, 8.302 | | | [17] |
| Calculs expérimentaux | 8.316 | 190 | 3.2 | [11, 18, 28, 30] |
| | 8.204 | 213 | | [20] |
| | 8.279 | | | [12-18,23-25] |
| | 8.130,8.302 | | | [18] |

III-2-2 : Super réseaux $((GaN)_n/(AlN)_n)$:

III-2-2-1 : $((GaN)_1/(AlN)_1)$:

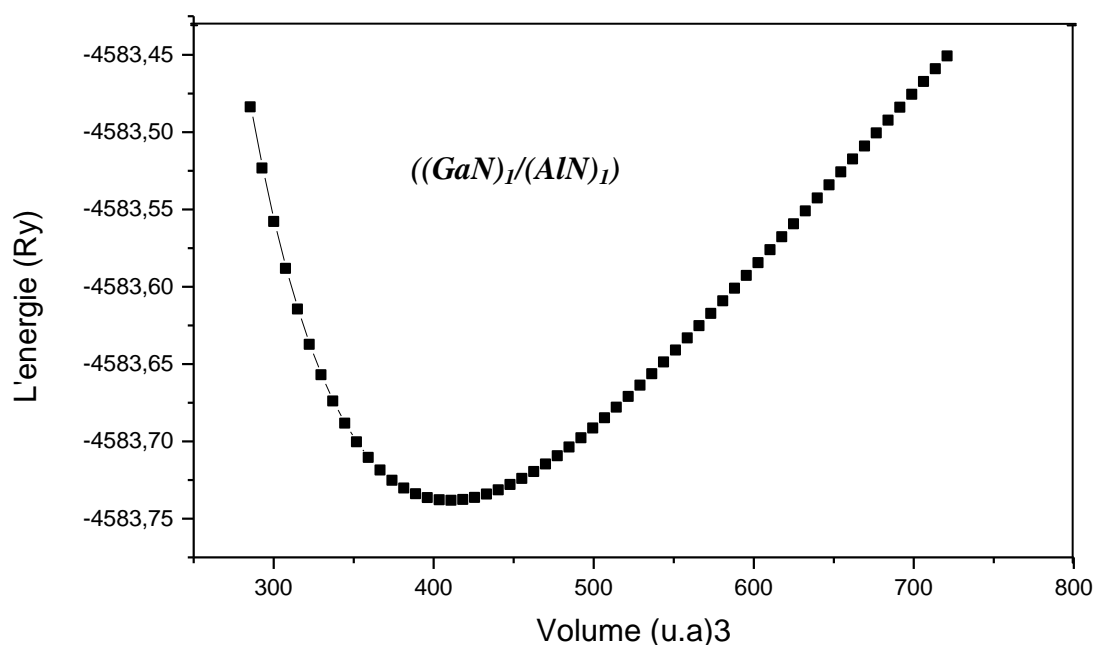


Figure III-3 : La variation de l'énergie totale en fonction du volume de $((GaN)_1/(AlN)_1)$ dans la phase ZB .

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-3 : Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B'_0 de $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$.

| $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$ | a_0 (u.a) | B_0 (GPa) | B'_0 |
|-----------------------------------|-------------|------------------|----------------|
| Nos propres résultats | 9.36 | 101.59082 | 4.52404 |

III-2-2-2 : $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$:

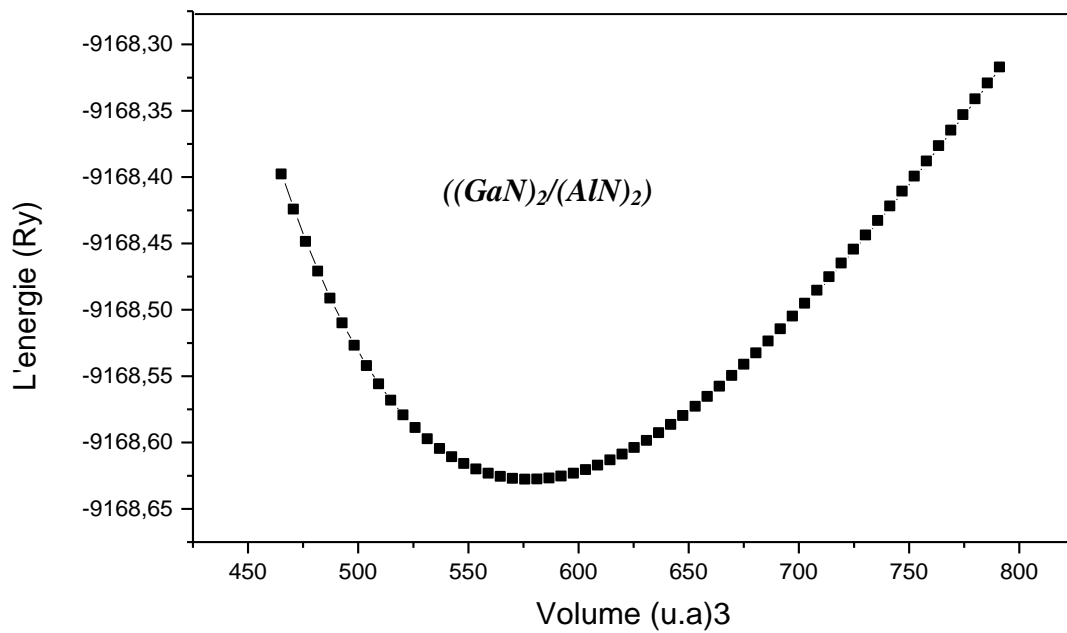


Figure III-4 : La variation de l'énergie totale en fonction du volume de $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ dans la phase ZB .

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-4 : Le paramètre du réseau a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B'_0 de $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$.

| $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ | a_0 (u.a) | B_0 (GPa) | B'_0 |
|-----------------------------------|--------------|------------------|----------------|
| Nos propres résultats | 16.66 | 206.85714 | 4.52271 |

D'après les figures et les tableaux ci-dessus, on constate que :

- Les paramètres d'équilibre a_0 calculés par LDA sont sous estimés par rapport aux valeurs expérimentales et théoriques correspondantes pour les deux binaires *GaN* et *AlN*, ils sont respectivement à moins de 0.58% et 0.84%.
- Pour les super réseaux $(\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1$ et $(\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2$, une proportionnalité est remarquée entre la valeur du paramètre de maille et le nombre de couches. Ces résultats peuvent prétendre être une prédiction pour de futurs travaux.
- Les valeurs du module de compressibilité et ses dérivées (B_0 et B'_0) des binaires sont relativement proches des résultats théoriques et expérimentaux disponibles.
- Les valeurs de (B_0 et B'_0) (101.59082 GPa et 4.52404) et (206.85714 GPa et 4.52271) des deux super réseaux $(\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1$ et $(\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2$ reflètent une dureté croissante en fonction du nombre de couches. Ces résultats peuvent, également servir de prédiction pour de futurs travaux.

III-3 : Propriétés Electroniques :

III-3-1 : Structures de Bandes :

La connaissance de la structure de bande d'un semiconducteur est un paramètre fondamental pour la réalisation de nouveaux dispositifs et la distinction entre les matériaux existants. Un des points les plus importants dans cette structure est la valeur de l'énergie séparant le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction E_g (elle correspond à l'énergie nécessaire pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction) [33].

Les structures de bandes le long des directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin dans l'espace réciproque, donnent les énergies permises d'un électron en fonction du vecteur d'onde K . Elles sont déterminées en ajustant les paramètres de maille d'équilibre dans le calcul.

Les figures III-5, III-6, III-7 et III-8 démontrent les variations des énergies en fonction de vecteurs d'onde des matériaux binaires massifs et super réseaux:

Les tableaux III-5, III-6, III-7 et III-8 récapitulent les propriétés électroniques obtenues pour les quatre matériaux (GaN , AlN , $((GaN)_1/(AlN)_1)$ et $((GaN)_2/(AlN)_2)$).

III-3-1-1 : Binaires *GaN* et *AlN* :

III-3-1-1-1 : Nitrure de Gallium (*GaN*)

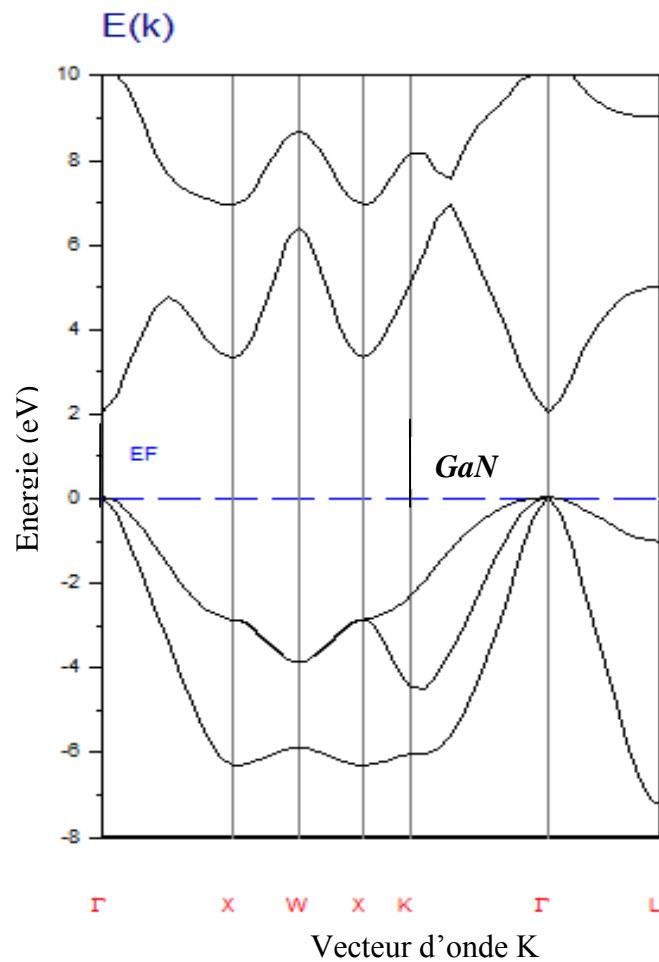


Figure III-5 : Structure de bande de *GaN* le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin dans la phase ZB.

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-5 : L'énergie de gap de *GaN* dans la phase ZB.

| <i>GaN</i> | E_g (eV) | Références |
|-----------------------|---------------|------------|
| Nos propres résultats | 2.1 | |
| Calculs expérimentaux | 3.23, 3.50 | [25] |
| | 3.299 | [29] |
| | 3.25–3.50 | [31] |
| | 3.272 | [32,33] |
| Calculs théoriques | 3.39 | [14] |
| | 3.2 | [17] |
| | 3.299,1.93073 | [26] |
| | 1.922 | [27] |

III-3-1-1-2 : Nitrure d'Aluminium (*AlN*)

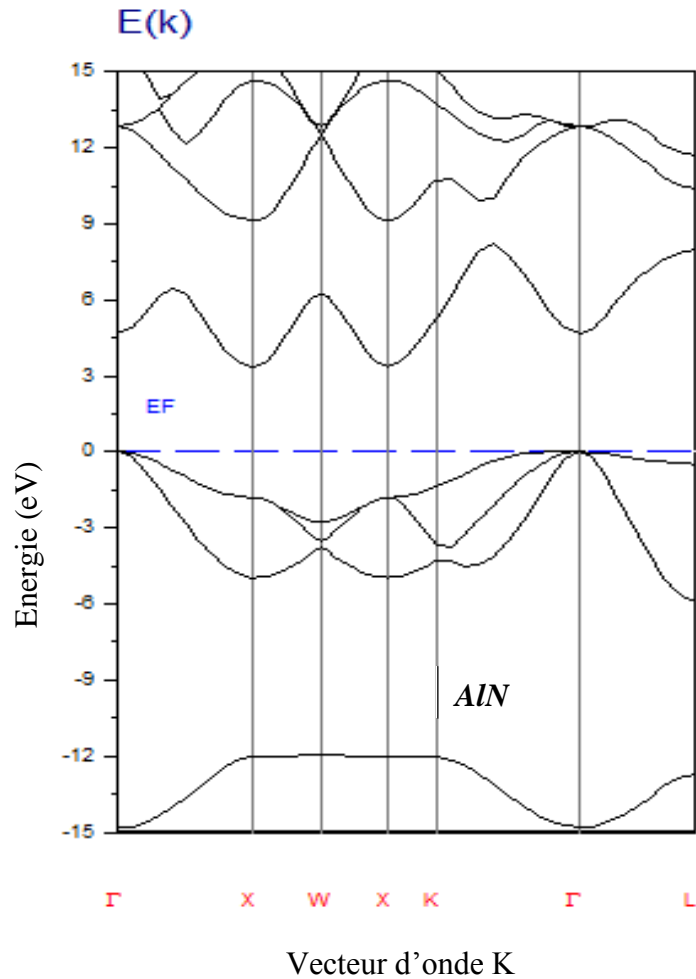


Figure III-6 : Structure de bande d'*AlN* le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin dans la phase ZB.

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-6 : L'énergie de gap d'*AlN* dans la phase ZB.

| <i>AlN</i> | E_g (eV) | Références |
|-----------------------|--------------|------------|
| Nos propres résultats | 3.6 | |
| Calculs expérimentaux | 6.28 | [14] |
| | 5.15 | [25] |
| | 4.9 | [29] |
| | 6.10–6.25 | [31] |
| | 5.34 | [33,34] |
| Calculs théoriques | 4.9, 3.23998 | [26] |
| | 3.304 | [35] |

III-3-1-2 : Super réseaux $((GaN)_n/(AlN)_n)$:

III-3-1-2-1 : $((GaN)_l/(AlN)_l)$

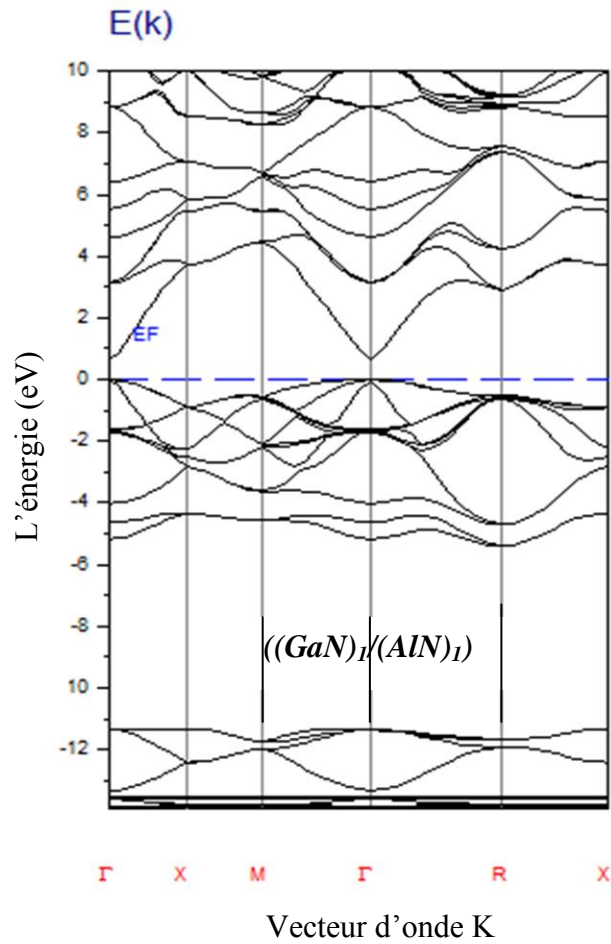


Figure III-7 : Structure de bande de $((GaN)_l/(AlN)_l)$ le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin dans la phase ZB.

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-7 : L'énergie de gap de $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$ dans la phase ZB.

| $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$ | E_g (eV) | Nature de Gap |
|-----------------------------------|-------------|---------------|
| Nos propres résultats | 0.64 | Direct |

III-3-1-2-2 : $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$

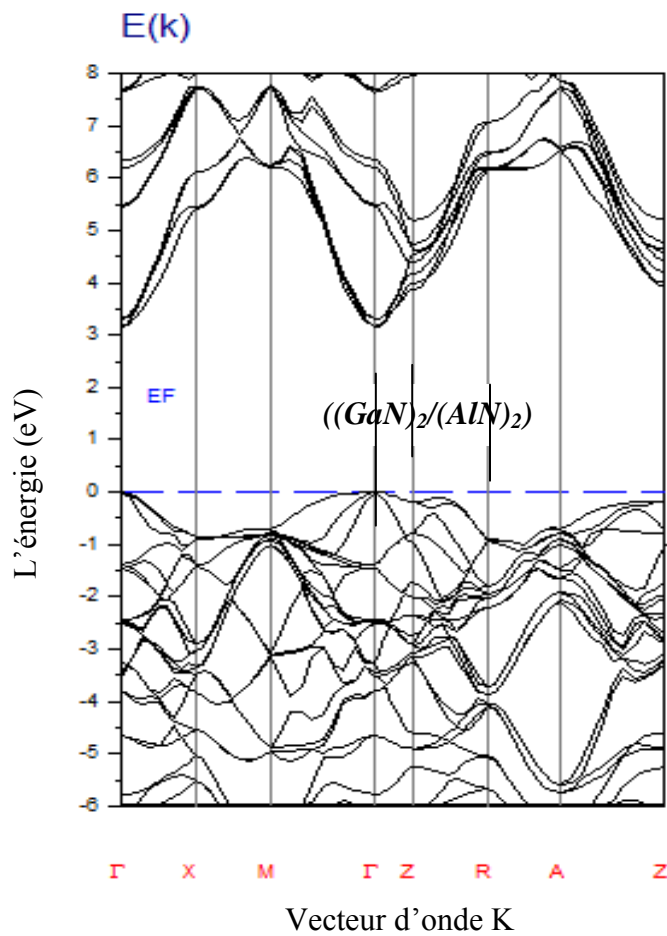


Figure III-8 : Structure de bande de $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin dans la phase ZB.

Chapitre III : Résultats et Interprétations

Tableau III-8 : L'énergie de gap de $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ dans la phase ZB.

| $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ | E_g (eV) | Nature de Gap |
|-----------------------------------|-------------|---------------|
| Nos propres résultats | 3.03 | Direct |

D'après les résultats obtenus dans les figures et les tableaux précédents, nous pouvons voir que.

➤ Le binaire **GaN** possède un gap direct au point Γ alors qu'AlN possède un gap indirect aux points (Γ -X), leurs valeurs respectives sont **2.1** et **3.6** (eV). Ils sont classés comme des semiconducteurs dans les conditions normales. Le calcul au moyen de LDA sous-estime les énergies de gap par rapport aux résultats expérimentaux.

➤ Par ailleurs, les super réseaux $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$ et $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$ possèdent des gaps directs point (Γ), leurs valeurs sont respectivement **0.64** et **3.03** (eV). Ils sont classés comme des semiconducteurs dans les conditions normales.

➤ Une croissance de la valeur du gap en fonction du nombre de couches pour les deux super réseaux.

Au voisinage de point (Γ), la bande de conduction est unique alors que la bande de valence se subdivise en trois bandes nommées HH, LH et CH (Heavy Holes, Light Holes et Crystalline Field) successivement [35,36].

➤ La longueur d'onde et la fréquence (λ et ν) des deux super réseaux ont été Calculées d'après la relation $E_g = h\nu$, leurs valeurs sont ($0.409 \mu\text{m}$ et $7.33 \cdot 10^{14}$ Hz) et ($1.93 \mu\text{m}$ et $1.55 \cdot 10^{14}$ Hz) successivement. Ces matériaux se situent dans le domaine intermédiaire entre la lumière visible et l'infrarouge du spectre électromagnétique.

➤ Les résultats des propriétés électroniques obtenues pour les super réseaux peuvent être considérés comme prédiction aux futurs travaux.

Bibliographie du Troisième Chapitre :

- [01] <http://physics.njit.edu/~savrasov>.
- [02] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B **864**, 136 (1964).
- [03] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A 1133 (1965).
- [04] S. Savrasov and D. Savrasov, Phys. Rev. B **46**, 12181 (1992).
- [05] S. Y. Savrasov Phys. Rev. B **54**, 16470 (1996).
- [06] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. **B 46**, 12947 (1992).
- [07] P. Blochl, O. Jepsen, and O.K. Andersen, Phys. Rev. B **49**, 16223 (1994).
- [08] F. Birch, J. Geo phys. Res. **83**, 1257 (1978).
- [09] SEFIANE Naima. **Simulation et Optimisation d'une Diode Laser Bleue à Base de GaN Cubique**. Université Abou Bakr BELKAÏD Tlemcen (Déc. 2013).
- [10] Strite, S, Ruan, J, Li, Z, Salvador, A, Chen, H, Smith, D.J, Choyke, W.J, and Morkoç, H. **An Investigation of the Properties of Cubic GaN Grown on GaAs by Reactive Ion Molecular Beam Epitaxy**. J. Vac. Sci Technol, B **9**, n°1, 1924-1929 (1991).
- [11] Lei, T, Moustakas, T.D, Graham, R.J, He, Y, and Berkowitz, S.J. **Epitaxial Growth and Characterisation of Zinc Blende Gallium Nitride on (001) Silicon**. J. Appl Phys, **71**, n°10, 4933-4943 (1992).
- [12] I. Vurgaftman, J. R. Meyer. **Band Parameters for Nitrogen Containing Semiconductors**. J. Appl. Phys. **94**, 3675 (2003).
- [13] Fabrice Enjalbert. **Etude des Hétérostructures Semi conductrices III Nitrures et Application au Laser UV pompé par Cathode à Micropointes**. Université Joseph Fourier , Grenoble I (28 Jan 2005).
- [14] LAGARDE Delphine. **Dynamique de Spin dans des Structures Semiconductrices à base de ZnO et de GaN**. Université de Toulouse, France (19 sep 2008).
- [15] Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Doğan, V. Avrutin, S. J. Cho, and H. Morkoç. **A Comprehensive Review of ZnO Materials and Devices**. J. Appl. Phys, **98**, 041301 (2005).
- [16] A. Ashra_ and C. Jagadish. Review of zinc blende ZnO ; **Stability of Metastable ZnO Phase**. J. Appl. Phys, **102**, 071101 (2007).
- [17] MECHGOUG Amina. **Simulation d'un Transistor AlGaN/InGaN/GaN à Effet de Champ (HEMT)**. Université Med Khider, Biskra (2013/2014).

Chapitre III : Résultats et Interprétations

- [18] Martinez_Guerrero, Esteban. **Elaboration en Epitaxie par Jets Moléculaires des Nitrures d'Eléments III en Phase Cubique**, Institut nationale des sciences appliquées Lyon (2002).
- [19] Xu, D.P, Wang, Y.T, Yang, H, Li, S.F, Zhao, D.G, Fu, Y, Zhang, S.M, Wu, R.H, Jia, Q.J, Zheng, W.L, and Jiang, X.M. **Anomalous Strains in Cubic Phase GaN Films Grown on GaAs (001) by Metalorganic Chemical Vapour Deposition**. J. Appl. Phys, **88**, n°6, 3762-3764 (2000).
- [20] Powell, R.C, Lee, N.E, Kim, Y.W, and Green, J. **Heteroepitaxial Wurtzite and Zinc Blende Structure GaN Grown by Reactive Ion Molecular Beam Epitaxy: Growth kinetics, Microstructure, and Properties**. J. Appl. Phys. **73**, n°1, 189-204 (1993).
- [21] Okumura. H, Hamaguchi. H, Koizumi, T, Balakrishnan, K, Ishida, Y, Arita, M, Chichibu, S.Nakanishi, H, Nagatomo, T, and Yoshida, S. **Growth of Cubic III Nitrides by Gas Source MBE Using Atomic Nitrogen Plasma: GaN, AlGaN and AlN**. Journal of Crystal Growth. **189/190**, 390-394 (1998).
- [22] Pugh, S.K, Dugdale, D.J, Brand, S, and Abram, R.A. **Electronic Structure Calculations on Nitride Semiconductors**. Semiconductor Science And Technology. Jan, 1999, **14**, n°1, 23-31. **Band gap and k.P parameters for GaAlN and GaInN Alloys**. J. Appl. Phys, **86**, n°7, 3768-3772 (1999).
- [23] I. Petrov, E. Mojab, R. C. Powell, J. E. Greene, L. Hultman, and J.E. Sundgren, Appl. Phys. Lett. **60**, 2491 (1992).
- [24] M. Mizuta, S. Fujieda, Y. Matsumoto, and T. Kawamura, Jpn. J. Appl. Phys. **25** Part 2, L945 (1986).
- [25] Christian Mietze. **Cubic AlN/GaN Multi Quantum Wells for Unipolar Device Applications**. Paderborn Université (28 Feb 2013).
- [26] BOUTELDJA Nouredine. **Etude Ab initio des Propriétés Electroniques de GaN, AlN et InN ; Effets de Polarisation**. Université d'Oran (2014).
- [27] B. Daoudil, M.Sehil, A. Boukraa, H.Abid. **FP LAPW Calculations of Ground State Properties for AlN, Ga N and InN Compounds**.J. Nanoelectronics and Materials (2008).
- [28] J.H.Edgard. **Properties of Group III Nitrides** ,Electronic Materials Information Service (EMIS) Data reviews Series, Institution of Electrical Engineers (IEE), London (1994).
- [29] I.Vurgaftmana,J.R.Meyer,L.R.Ram Mohan. **Band parameters for III-V compound**

Chapitre III : Résultats et Interprétations

- semiconductors and their alloys**, J.Appl. Phys.**89**.N°11(2001).
- [30] C.Y.Yeh,Z.W.Lu,S.Froyen, and Zunger ,Physical.Review B**46**,10086 (1992).
- [31] Alan Owens, A. Peacock. **Compound semiconductor radiation detectors**.Elsevier, A **531**,18–37 (11 June 2004).
- [32] SAMMAR Souria. **Elaboration et Caracterisation des Materiaux Magnetiques Nanocristallins**. Université de Badji Mokhtar, Annaba (2011).
- [33] Stéphane FANGET. **Matériaux et Hétérostructures à base de Nitrures d'Eléments III en Phase Cubique et Hexagonale pour l'Optoélectronique**. l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, France (19 Déc2002).
- [34] Menniger, J. Jahn, U. Brandt, O. Yang, H. and Ploog, K. **Identification of Optical Transitions in Cubic and Hexagonal GaN by Spatially Resolved Cathodoluminescence**. Phys. Rev, B**53**, n°4,1881-1885 (1996).
- [35] K.Mohammed Benali. **First Principle Study of Structural, Elastic and Electronic Properties of GaN and AlN Semiconductors Under Pressure Effect and Magnitism in AlN-Mn and GaN-Mn Sysrems**.Tlemcen (2004).
- [36] Chahira Hajlaoui. **Etude des Propriet és Structurales et Electroniques des Nanofil Semiconducteurs III-V**. INSA de Rennes, France (05juin 2014).

Conclusion

Générale

Conclusion Générale

Dans ce manuscrit de mémoire. Nous avons adopté la méthode FP LMTO, parce qu'elle est très précise surtout dans sa version PLW et également parce que le code source qui est mis librement à la disposition des chercheurs (dans notre cas est le logiciel mindlab[®] de S.Y. Savrasov) est écrit d'une manière très pédagogique et systématique, ce qui permet aux étudiants de dépasser le stade d'utilisateurs aux fondateurs.

L'enchaînement de notre travail débute par le calcul des propriétés structurales et électroniques des matériaux massifs **GaN** et **AlN** qui désignent les composants de base des super réseaux **(GaN)_n/(AlN)_n** en phase zinc blende , on conclut que :

Pour les deux binaires :

- Les propriétés structurales telles que les paramètres de maille (a_0), les modules des compressibilités et ses dérivés (B_0 et B_0') obtenues en utilisant l'approche LDA, sont en accord avec ceux évaluées expérimentalement et théoriquement.
- Les propriétés électroniques telles que les valeurs de gaps d'énergie et leurs natures possèdent des transitions directes et indirectes. Ils sont classés comme des semiconducteurs.

Pour les super réseaux :

- Les propriétés structurales : Le paramètre de maille (a_{22}) est inférieur à $2(a_{11})$, ce qui n'est pas habituel, cela est dû à l'utilisation de LDA qui sous-estime usuellement les calculs. Aucune comparaison n'a lieu faute de travaux théoriques et expérimentaux.
- Les propriétés électroniques : Nous avons prédit les structures des bandes électroniques des super réseaux pour les deux configurations (1-1 et 2-2), qui à notre connaissance n'ont pas été signalé antérieurement ni expérimentalement ni théoriquement. Alors nous estimons théoriquement, qu'il y a une possibilité de transition directe, et une proportionnalité extrinsèque entre le nombre de couches, le paramètre de maille et l'énergie de gap dans ces matériaux. Donc ils se comportent comme des semiconducteurs.

Conclusion Générale

Enfin, on peut dire que les matériaux précédents offrent des perspectives attirantes dans le secteur des dispositifs optoélectroniques, à titre d'exemple: les détecteurs des rayons X (solar blind X ray detectors), ces derniers sont insensibles aux radiations UV et au rayonnement visible. Ils sont basés sur les composés de group III-Nitride, particulièrement l'AlN qu'a une large bande interdite et un rayonnement dur, par ailleurs, le GaN qui offre une mobilité et vitesse élevées*.

[01]* Alan Owens, A. Peacock. **Compound Semiconductor Radiation Detectors**. Elsevier, A
531,18–37 (11 Jun 2004).

ملخص

في هذا العمل، وبالاعتماد على المبدأ الأول، قمنا بعرض نتائج دراسة الخواص البنيوية و الإلكترونية للمركبات الثنائية GaN و AlN وشبكاتها الممتازة $((GaN)_n/(AlN)_n)$ للتشكيلتين ($n = 1, 2$) في طور التبلور (Zinc Blende).

وتستند طريقة الحساب على اساس (FP LMTO). مرفقة بنظرية كثافة الدالة (DFT) و تقريب الكثافة المحلية (LDA).

الخواص البنيوية للمركبات الثنائية GaN و AlN موافقة للمعطيات التجريبية والنظرية المتوافرة. فيما يخص شبكاتها الممتازة $((GaN)_n/(AlN)_n)$ فخواصها مجرد توقعات لدراسات مستقبلية.

و قد قمنا ايضا بحساب الخواص الإلكترونية للثنائيات GaN و AlN حيث تبين ان لهم عصابة طاقوية مانعة مباشرة و غير مباشرة على الترتيب. اما بخصوص شبكاتها الممتازة $((GaN)_1/(AlN)_1)$ و $((GaN)_2/(AlN)_2)$ فلهم عصابة طاقوية مانعة مباشرة على الترتيب.

تجدر الإشارة إلى أن قيمة العصابة الطاقوية المانعة المباشرة تتزايد بازدياد قيمة الطبقة n . وان نوع العصابة الطاقوية للشبكات الممتازة له أهمية كبيرة في عمليات الانتقال الضوئي خاصة عند تصميم الليزر ذو الأبار الطاقوية المكتملة.

الكلمات المفتاحية:

المبدأ الأول، الخواص البنيوية و الإلكترونية، الشبكة الممتازة، Zinc Blende, FP LMTO, DFT, LDA.

Résumé

Dans ce travail, nous avons exposé les résultats d'étude de Premier Principe des propriétés structurales et électroniques pour les composés binaires ***GaN et AlN*** et leurs superréseaux (***(GaN)_n/(AlN)_n***) pour les deux configurations (n = 1 et 2) dans la phase zinc blende.

La technique de calcul est basée sur la méthode Linéaire des Orbitaux Muffins Tin (FP LMTO), accompagnée par la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) et l'Approximation de la Densité Locale (LDA).

Les propriétés structurales des composés binaires ***GaN et AlN*** sont en bon accord avec les données expérimentales et théoriques disponibles. Pour les superréseaux (***(GaN)_n/(AlN)_n***), le calcul de leurs propriétés structurales peut prétendre être une prédiction pour des travaux futuristes .

Nous avons pareillement effectué le calcul des propriétés électroniques pour les composés binaires ***GaN et AlN***. Par conséquent, ils possèdent des gaps direct et indirect respectivement. Concernant les superréseaux (***(GaN)₁/(AlN)₁ et (GaN)₂/(AlN)₂***).Leurs gap sont direct.

Il convient de noter que la valeur de gap augmente avec l'augmentation de nombre de couches n, et que le caractère de la bande interdite des superréseaux, est d'une grande importance pour les transitions optiques, en particulier pour les lasers à puits quantiques.

Mots Clés:

Premier Principe, Propriétés structurales et électronique, Superréseaux, Zinc Blende, FP LMTO, DFT, LDA.

Abstract

In this work, We present the results of the first principal study of the structural and electronic properties of binary *GaN* and *AlN* compounds and their $((\text{GaN})_n/(\text{AlN})_n)$ superlattices for the two configurations ($n = 1, 2$) in Zinc blende phase.

The computational method is based on the full potential linear muffin tin orbitals method (FP LMTO). Accompanied with the Density Functional Theory (DFT) and the Local Density Approximation (LDA).

The calculated structural properties of *GaN* and *AlN* compounds are in good agreement with available experimental and theoretical data. For the Superlattices $((\text{GaN})_n/(\text{AlN})_n)$, the calculation of their structural properties can claim to be a prediction for futuristic work.

We have also carried out the calculation of the electronic properties for the binary *GaN* and *AlN* compounds. Therefore, they have direct and indirect gaps respectively. Concerning superlattices $((\text{GaN})_1/(\text{AlN})_1)$ and $((\text{GaN})_2/(\text{AlN})_2)$. Their gaps are direct.

It should be noted that the gap value increases with increasing in the number of layers n . and that the character of the band gap of the superlattices is of great importance for optical transitions, especially for quantum well lasers.

Keywords:

First Principal, Structural and Electronic Properties, Superlattices, Zinc blende, FP LMTO DFT, LDA.