



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



thèse **DE MASTER**

Présenté par :

- LAHLOUH Amina
- CHERNANE Hayat

Filière : PHYSIQUES

Spécialité : Nanostructures Semi-conductrices

Intitulé

Étude des Propriétés Structurales et Électroniques d'une nanostructure semi-conductrice à puits quantiques (un super-réseau III-V) $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$ (n=1 et 2)

Devant le jury composé de :

Président	M ^r . BOUMIA Lakhdar	MAA. C. Universitaire de Tissemsilt
Directeur de thèse	M ^r . MERABET Mostefa	MCA. C. Universitaire de Tissemsilt
Examineur	M ^r . HADJ ZOUBIR Miloud	MAA. C. Universitaire de Tissemsilt

Année universitaire : 2015/2016

TABLE DES MATIERES

Introduction générale.....	01
----------------------------	----

Chapitre I :

généralités sur les semi-conducteurs III-V et les hétérostructures

I.1. Introduction.....	06
I.2. Définition de semi-conducteurs	08
I. 2.1. Les différents types de semi-conducteur.....	08
I. 2.1.1. les semi-conducteurs IV	08
I.2.1.2. les semi-conducteurs II-VI	08
I. 2.1.3. les semi-conducteurs III-V	09
I. 3. Les nanostructures semi-conductrices à base de semiconducteurs III-V.....	10
I. 4. Les Hétérojonction à base de semiconducteurs III-V	10
I.5. Les hétérostructures à base de semiconducteurs III-V.....	10
I.6. Les Puits quantiques à base de semiconducteurs III-V.....	11
I.6.1. Puits quantique de type I.....	12
I.6.2. Puits quantiques de type II.....	12
I.7. Structure multi-Puits quantiques.....	13
I.7.1. Multi-puis quantiques non couplés (ou indépendants)	14
I.7.2. Multi-Puits quantiques couplés (ou dépendants).....	15
I.8. Un super-réseau.....	15
I.8.1. Super-réseaux III-V.....	16
I.8.2. Les avantages liés aux super-réseaux.....	17
I.8.3. Les Applications de super-réseaux III-V	17
I.8.3.1. La résistance différentielle négative.....	17
I.8.3.2. Les lasers à puits quantiques.....	18

Chapitre II : Méthodes de calcul

II.1. Introduction.....	20
II.2. Hamiltonien exact du cristal.....	21
II.2.1.1. Approximation de Born-Oppenheimer.....	21
II.2.2. Approximation de Hartree	22
II.2.1.2. Approximation de Hartree-Fock.....	22
II.3. Théorie fonctionnelle de la densité DFT.....	23
II.3.1. Equations de Kohn et Sham.....	25
II.4. Approximation pour le terme d'échange et de corrélation (XC).....	26
II.4.1. L'approximation de la densité locale (LDA).....	26
II.4.2. L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	26
II.5. La méthode utilisé "Full Potential Linear Muffin Tin Orbital" FP-LMTO.....	27
II.6. Instruction de base.....	28
II.7. Fonctions de base.....	29
II.8. Avantages et inconvénients de la méthode LMTO.....	30

Chapitre III : Résultats et discussions

III – 1 – Introduction.....	33
III. 2. Propriétés des matériaux massifs	35
III.2.1. Les propriétés structurales	35
III.2.2. Propriétés électroniques	38
III.3. Super-réseaux	41
III.3.1. Les propriétés structurales	41
III.3.2. Propriétés électroniques	44
III.3.2.1. Structures de bande.....	44
Conclusion générale	48
Références	50

LISTE DES FIGURES

Figure I.1: les bandes de valence et de conduction(isolant, semi-conducteur, conducteur).....	6
Figure I.2: (a) Représentation schématisée d'un puits quantique et du potentiel résultant. (b) Structure de bande d'un puits quantique GaAs/Al _x Ga _{1-x} As et trace des fonctions d'onde des deux premiers états confinés pour les électrons et les trous lourds. (c) Allure des relations de dispersion du puits quantique (b), en fonction du vecteur d'onde k dans le plan des couches.....	11
Figure I.3 : Profil de potentiel dans un puits quantique de type I et un puits quantique de type II[11]......	12
Figure I.4 : Profil de bande pour un multipuits quantique (ou super-réseau). Les niveaux d'énergie des états d'électron et de trous sont indiqués par les traits pointillés. Les notations Δ_c et Δ_v représentent l'offset de conduction et l'offset de valence.....	13
Figure I.5: structure périodique à multi-puits quantiques non couplés de type I.....	14
Figure I.6: Structure à multi-puits quantiques couplés de type I ($L = L_1 + L_2$: période du Super-réseau).....	15
Figure I.7 : (a) Représentation schématisée d'un super-réseau de puits quantiques. (b) Structure de bande d'un super-réseau de type I. (c) Structure de bande d'un super-réseau de type II.....	16

Figure III.1: Structure cristalline zinc blende, les cercles pleins sont occupés par un type d'atome et les cercles vides par un autre. Les liaisons tétraédriques entre premiers voisins sont représentées	34
Figure III.2: La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le GaAs	36
Figure III.3: La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le AlAs	37
Figure III.4: Structure de bande électronique du GaAs dans la phase Zinc-blende.....	39
Figure III.5: Structure de bande électronique du AlAs dans la phase Zinc-blende.....	39
Figure III.6: La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})$	42
Figure III.7: La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$	43
Figure III.8: Structure de bande du super-réseau $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ le long des directions de hautes symétrie dans la zone de Brillouin.....	45
Figure III.9 : Structure de bande du super-réseau $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$ le long des directions de hautes symétrie dans la zone de Brillouin.....	46

LISTE DES TABLEAUX

<i>Tableau.I.1:</i> présente les différents types de semi-conducteur.....	8
<i>Tableau.I.2 :</i> Paramètres caractéristiques pour les principaux composés IIIV. m* masse effective des électrons ; a0 paramètre de maille du cristal.....	9
<i>Tableau III.1 :</i> Le paramètre du réseau a, le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' de <i>GaAs</i> , dans la structure B3.....	37
<i>Tableau III.2 :</i> Le paramètre du réseau a, le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' de <i>AlAs</i> , dans la structure B3.....	38
<i>Tableau III.3 :</i> Les énergies de bandes du <i>AlP</i> et <i>GaP</i> en (eV) dans la structure zinc- blende.....	40
<i>Tableau III.4 :</i> Les énergies de bandes du <i>AlP</i> et <i>GaP</i> en (eV) dans la structure zinc-blende.....	40
<i>Tableau III.5 :</i> Le paramètre du réseau a, le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B_0' des trois configurations (1, 1), (2, 2) du <i>GaAs/AlAs</i>	43
<i>Tableau III.6 :</i> L'énergie de bande de configuration (1, 1), du super-réseau <i>(GaAs)_n/</i> <i>(AlAs)_n</i>	46
<i>Tableau III.7 :</i> L' énergie de bande de configuration (2, 2), du super-réseau <i>(GaAs)_n/</i> <i>(AlAs)_n</i>	47

Introduction générale :

Au début du 20^{ème} siècle, les rencontres avec les phénomènes physiques pour lesquels la mécanique newtonienne ne pourrait pas probablement fournir à une explication proportionnée, incités l'arrivée de la mécanique quantique. en effet, cette dernière avait joué un rôle indispensable dans le monde moderne de physique, elle y compris notre arrangement des caractéristiques des semi-conducteurs, vers le 20^{ème} siècle en retard, évidemment la mécanique quantique a augmenté sa rôle, ses principes a été utilisée dans la conception des structures originales du semi-conducteur qui présentent le transport sans précédent et les propriétés optiques. les techniques avancées de la croissance et de la micro-fabrication en couche mince ont fabriqué la technologie pour les structures conçues de quantum.

Le concept de super réseau est apparu en 1969. Le principe est simple : en déposant successivement, par couches, des semi-conducteurs différents, on obtient une structure "sandwich" dans laquelle les porteurs acquièrent des comportements bidimensionnels. L'étude de tels systèmes est devenue un sujet "chaud" depuis que la réalisation d'échantillons fiables a été possible grâce à l'épitaxie par les jets moléculaires ou à l'épitaxie en phase vapeur de composés organométalliques. Les études expérimentales ce sont alors multipliées (transport, absorption optique, luminescence, photoconductivité, diffusion Raman, effet Hall quantique) et de nouveaux composants ont vu le jour (lasers à puits quantiques, transistors bipolaires à hétérojonction, transistors à effet de champ à modulation de dopage.)

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [1] sur les couches minces semi-conductrices, grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices a bien avancé. une quinzaine d'années plus tard, ces hétérostructures ont commencé à être utilisées pour l'émission et la détection de rayonnement infrarouge. Le puits quantique, brique de base de ces dispositifs, permet alors un contrôle des propriétés optiques via des propriétés géométriques, ce qui constitue une véritable révolution.

Les super-réseaux tendus semi-conducteurs (SLs) sont les matériaux potentiels pour des applications dans des télécommunications optiques impliquant la commutation, l'amplification et le traitement des signaux. En particulier les hétérostructures et le SLs de semi-conducteur d'III-V ont attiré beaucoup d'intérêt principalement dû à la possibilité de travailler des lacunes de bande et réunissent structures [2],[3],[4],[5],[6] par la variation des paramètres simples comme la période de super-réseau, la direction de croissance et le matériel de substrat.

L'objectif de ce travail de thèse est étude des propriétés structurales et électroniques d'une nanostructure semi conducteur à puits quantique (super-réseau (GaAs, AlAs))

La présentation de ce travail va donc s'articuler autour des chapitres suivants :

le premier chapitre, nous présentons les notions fondamentales liées aux Matériaux semi-conducteurs III-V ainsi que les structures à puits quantiques.

Le deuxième chapitre, présentation succincte de la méthode de calcul utilisée dans ce travail

le troisième chapitre, traite les résultats de nos calculs et leurs interprétations. Il est subdivisé en deux parties, la première est consacrée à l'étude des propriétés Structurales et électroniques du semi-conducteur binaire **GaAs** et **AlAs** à et la deuxième à l'étude des propriétés Structurales et électroniques de leur super-réseau . Nous terminons ce travail avec une conclusion générale.

Généralités sur les nanostructures à puits quantiques

I.1.Introduction :

Pendant très long temps les scientifiques croyaient que vis-à-vis de la conduction électrique les matériaux se subdivisaient en deux classes : conducteurs et diélectriques (isolants). cependant, vers 1830 on a découvert des matériaux dont les propriétés ne permettaient de les classer dans aucune de ces catégories. A l'état pur, ces matériaux étaient à la fois de mauvais conducteurs et de mauvais isolants : or leurs propriétés électriques, notamment la résistivité, variaient très sensiblement sous nuance des facteurs extérieurs de l'environnement (température, pression...), de la présence des impuretés, de la lumière, etc. ... En occupant une place intermédiaire entre les conducteurs et les isolants, ces matériaux ont les appelés (semi-conducteurs) .

Les trios type de matériaux contiennent une bande basse En énergie appelée bande de valence et une bande haute d'énergie appelée bande de conduction .la différence entre les trios types de matériaux est la distance qui sépare la bande de valence de la bande de conduction on ce qu'on appelle la bande interdite ou (bande gap) . [7]

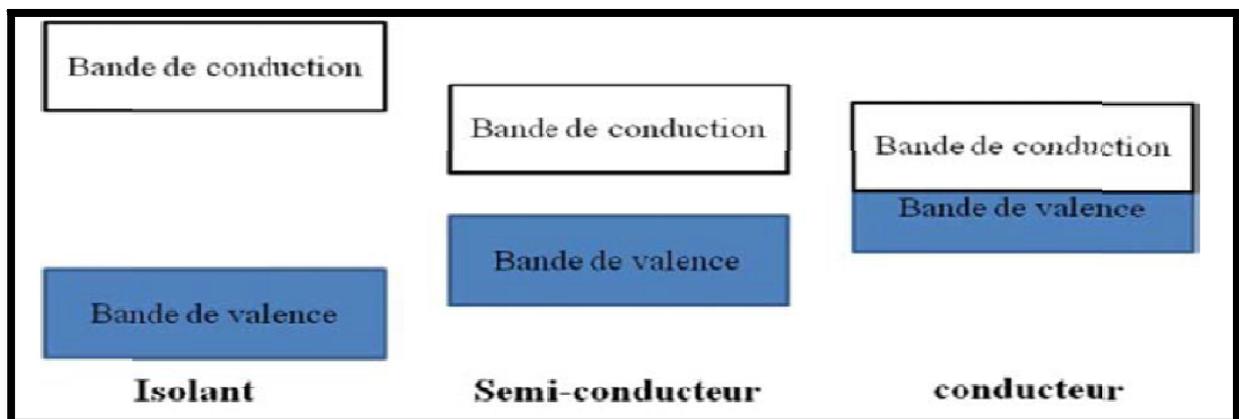


Figure.I.1:les bandes de valence et de conduction(isolant, semi-conducteur, conducteur).

Depuis l'invention du transistor en 1947 [8], les semi-conducteurs forment la classe de matériaux les plus étudiés en physique du solide. Le développement continu des différentes composantes de la microélectronique a soulevé de nombreux problèmes en ce qui concerne la physique des hétérojonctions, des interfaces et des couches minces. L'étude de ces dernières offre un intérêt tout particulier car elles peuvent présenter des effets dimensionnels

inobservables dans le semi-conducteur massif. Ces effets communément appelés effets quantiques se manifestent sous certaines conditions par une quantification des états d'énergie qui provoque des modifications des paramètres macroscopiques du matériau (résistivité, propriétés optiques...) en fonction de l'épaisseur de la couche mince. Ceci ouvre la porte à des concepts tout à fait nouveaux dont la mise en œuvre débouche sur la réalisation d'une nouvelle classe de composants. Il est donc devenu essentiel de comprendre les mécanismes de formation de ces structures pour maîtriser au mieux la technologie des composants réalisés à l'heure où les nanotechnologies ouvrent de nouvelles voies.

I.2. Définition de semi-conducteurs :

Les semi-conducteurs sont des corps solides dont la conductivité électrique se situe entre celle des métaux et celle des isolants. Ils sont isolants s'ils sont purs et au zéro absolu, et leurs conductivité électrique augmente avec la température, et elle est sensible aux impuretés ou aux différents types de défauts [9].

I.2.1 Les différents types de semi-conducteurs :

Les semi-conducteurs de types IV, III-V et II-VI sont caractérisés par une coordination tétraédrique, chaque atome de volume établit des liaisons purement covalentes ou partiellement ioniques avec ses quatre premiers voisins, chaque liaison étant saturée par deux électrons. La symétrie de translation du cristal regroupe ces états en bandes d'énergie, les combinaisons liantes sont saturées et donnent naissance à la bande de valence entièrement occupée, les combinaisons anti liantes sont totalement vides, elles donnent naissance à la bande de conduction. Le sommet de la première et le bas de la seconde sont séparés par le gap du matériau.

I.2.1.1 les semi-conducteurs IV :

Sont des matériaux formés par des éléments de la quatrième colonne de la classification périodique.

I.2.1.2 les semi-conducteurs II-VI :

Sont des matériaux formés par des éléments de deuxième colonne et des éléments de sixième colonne de la classification périodique.

Colonne		Semi-conducteur
IV		Ge,Si
III-V	Binaire	GaAs,GaP ,GaSb,InAs,InP,InSb
	Ternaire	$Al_x Ga_{1-x} As, GaAs_y P_{1-y}$
	quaternaire	$Al_x Ga_{1-x} As_y P_{1-y}$
II-VI	Binaire	CdS,HgTe,CdTe,ZnTe,ZnS
	Ternaire	$Cd_x Hg_{1-x}$

Tableau.I.1: présente les différents types de semi-conducteur

I.2.1.3 les semi-conducteurs III-V :

Les matériaux semiconducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la 3eme colonne et d'un élément de la 5eme colonne de la classification périodique. Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure des bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants, et à structure de bande interdite. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphore de gallium GaP entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [10], qui demande des semiconducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [11]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à caractère métallique. On considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb), ou d'indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes.

Le **tableau (I.2)** résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V :

Composé III-V	m^*/m_0	$a_0(\text{Å})$	Structure de la Bande interdite
AlAs		5,661	Indirecte
AlSb	0,12	6,138	
GaP	0,82	5,449	
GaAs	0,063	5,653	Directe
GaSb		6,095	
InP	0,08	5,868	

Tableau.I.2.

Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V.

m^* masse effective des électrons ; a_0 paramètre de maille du cristal.

I.3. Les nanostructures semi-conductrices à base de semiconducteurs III-V :

Au cours des vingt dernières années, les chercheurs ont appris à structurer la matière à l'échelle du nanomètre, en particulier pour les besoins de la microélectronique. Rappelons qu'un nanomètre, c'est un milliardième de mètre, c'est-à-dire cinquante mille fois plus petit que le diamètre d'un cheveu. On parle donc ici d'une échelle extrêmement petite, de l'ordre de quelques distances interatomiques au sein des molécules ou des corps solides. A l'échelle du nanomètre, les propriétés physiques sont très différentes de celles qui sont observables dans notre monde macroscopique et sont gouvernées, pour l'essentiel, par la mécanique quantique. Nous allons montrer ici qu'il est particulièrement intéressant de fabriquer des objets de taille nanométrique à partir de matériaux semi-conducteurs. Ces « nanostructures semiconductrices » nous ouvrent des perspectives d'application originales et importantes, grâce à leurs propriétés très particulières.

I.4. Les Hétérojonction à base de semiconducteurs III-V :

Le terme hétérojonction désigne la jonction entre deux semi-conducteurs de gap différents. Il s'agit d'une jonction épitaxiale, c'est-à-dire, obtenue par croissance directe d'un cristal semi-conducteur sur un plan réticulaire de surface d'un autre cristal. Une telle croissance ne peut se faire que si les constantes de réseau des deux S-C sont suffisamment proches, de manière à éviter la présence de défauts (par exemple Dislocations) à la jonction. Une hétérojonction peut, par exemple, être réalisée en faisant croître un cristal de AlAs sur du GaAs car leurs constantes de réseau sont toutes les deux de l'ordre de 5.65 \AA .

I.5. Les hétérostructures à base de semiconducteurs III-V:

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [12] sur les couches minces semi-conductrices, grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices a bien avancé.

Les puits quantiques sont les premières structures réalisées. En 1978, pour la première fois la technique de dopage sélectif a été appliquée dans les hétérojonctions $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ par Dingle et Störmer [13]. Les multipuits quantiques et l'hétérojonction à dopage modulé font l'objet de nombreuses études dans la physique mésoscopique. Une hétérostructure est une jonction formée par la juxtaposition de deux matériaux de natures différentes.

Les hétérostructures semiconducteur-semiconducteur sont généralement des hétéroépitaxies car les deux semiconducteurs mis en présence ont la même structure

cristallographique (cubique faces centrées la plupart du temps) et un relatif accord de maille. Quand les deux semi-conducteurs ont une conductivité du même type, l'hétérostructure est dite isotype. Dans le cas contraire elle est anisotype.

De nombreux composants à hétérostructure ont aujourd'hui produit industriellement, la plupart étant des composants *GaAs/GaAlAs* : diode laser à double hétérostructure, transistors bipolaires hétérojonction, diode laser à puits quantiques... [14].

I.6. Les Puits quantiques à base de semi-conducteurs III-V:

Considérons une hétérostructure constituée d'une couche de semi-conducteur SC1 entre deux couches de semi-conducteur SC2 tel que $E_{g2} > E_{g1}$. Au niveau des interfaces on aura des discontinuités de gap impliquant l'existence d'un puits quantique. La différence de gap $[\Delta E_g = E_{g2} - E_{g1}]$ est distribuée entre les deux bandes de conduction et de valence, en donnant à l'un des semi-conducteurs le comportement de puits vis avis des porteurs des charges pour lesquelles l'autre forme la barrière.

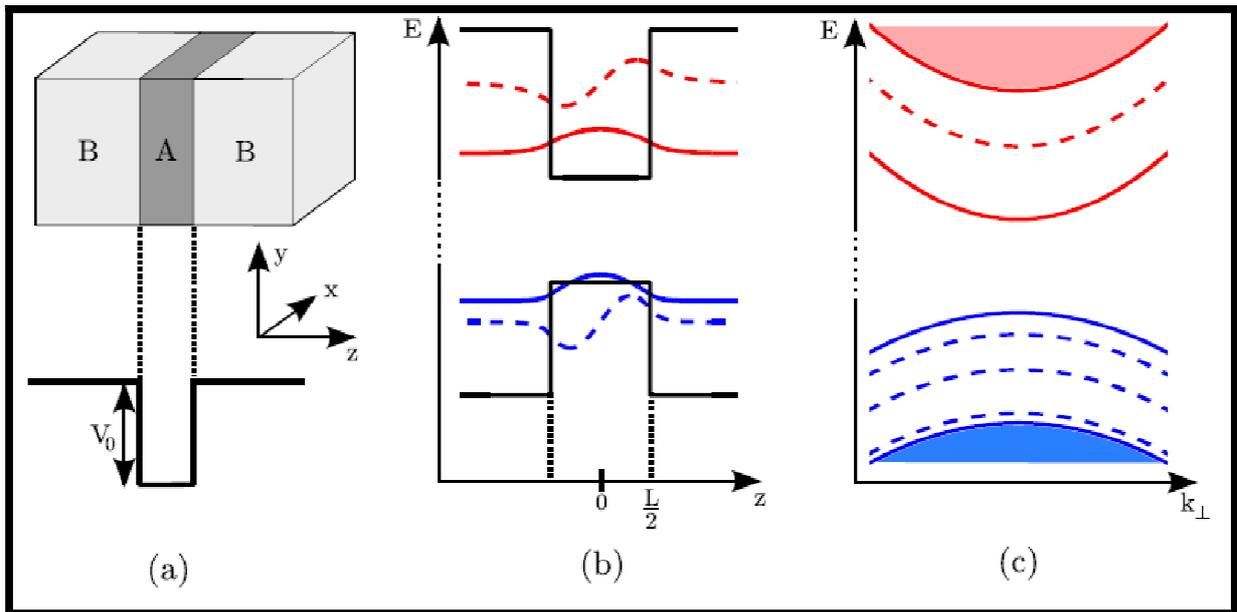


Figure . I .2 :

- (a) Représentation schématique d'un puits quantique et du potentiel résultant.
- (b) Structure de bande d'un puits quantique *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* et trace des fonctions d'onde des deux premiers états confinés pour les électrons et les trous lourds.
- (c) Allure des relations de dispersion du puits quantique (b), en fonction du vecteur d'onde k dans le plan des couches.

Un puits quantique (**PQ**) est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur **B** entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur **A**. Ce dernier a un gap d'énergie supérieur à celui du matériau **A**(figure 1.2.a). 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 [15].

I.6.1.Puits quantique de type I :

où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. La recombinaison des charges (électrons et trous) sera importante grâce à la position des extrema de bande de conduction et de bande de valence comme nous montre la figure (1.3).

I.6.2.Puits quantiques de type II :

où les électrons et les trous sont confinés séparément dans les deux matériaux puits et barrière respectivement. La séparation des extrema de bande de conduction et de bande de valence conduit à une faible probabilité de recombinaison des porteurs de charge comme nous montre la figure (1.3)

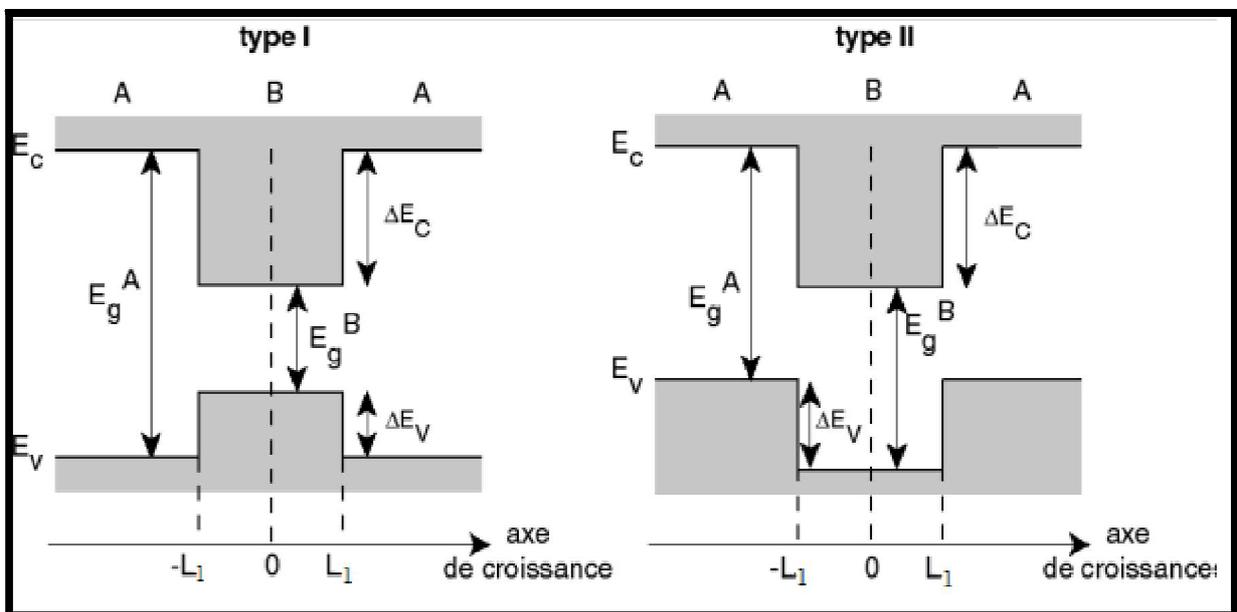


Figure .I.3:

Profil de potentiel dans un puits quantique de type I et un puits quantique de type II [16].

I.7. Structure multi-Puits quantiques :

Considérons une structure résultant de la juxtaposition d'une série de couches alternées d'un semiconducteur SC1 et un semiconducteur SC2, formant ainsi une succession de puits quantiques dont le diagramme énergétique est représenté sur la fig. 1.4 Si les couches du semi-conducteur SC2 sont relativement épaisses de façon à ce que la probabilité pour qu'un électron passe d'un puits à un autre par effet tunnel à travers la barrière soit faible, les puits sont indépendants les uns des autres. Dans chacun des puits la structure de sous-bandes d'énergie est analogue à celle du puits unique, et le mouvement des électrons est bidimensionnel, cette série de puits quantique indépendant porte le nom de structure à multipuits quantiques.

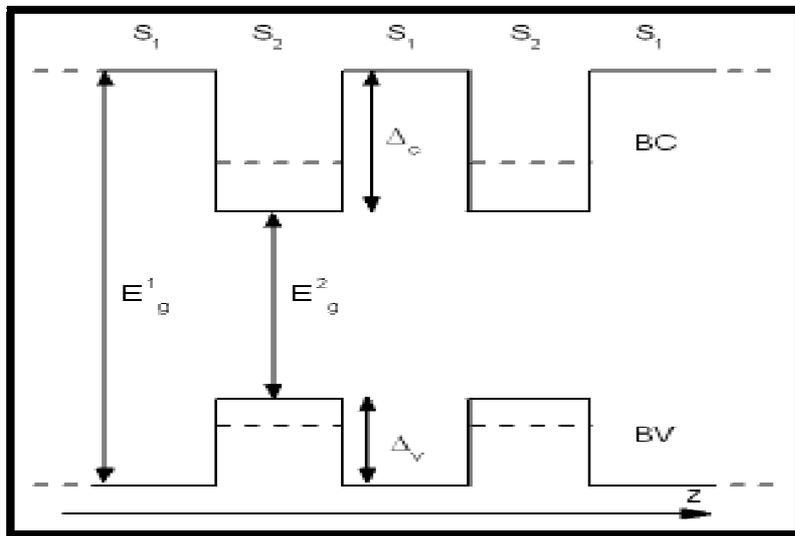


Figure.I.4: Profil de bande pour un multipuits quantique (ou super-réseau). Les niveaux d'énergies des états d'électron et de trous sont indiqués par les traits pointillés. Les notations Δ_c et Δ_v représentent l'offset de conduction et l'offset de valence.

I.7.1. Multi-puits quantiques non couplés (ou indépendants) :

Si l'épaisseur L_1 du SC1 est très faible ($\sim 100\text{\AA}$), les réflexions successives de l'électron entre les deux barrières constituées par le SC2 font que les ondes stationnaires de l'électron ne puissent s'établir que pour certaines valeurs discrètes de la composante du mouvement suivant la direction Z normale au plan de la couche, de ce fait, il en résulte une quantification des états électroniques en sous bandes dans chacun des puits, dont le nombre dépend de la profondeur du puits et de l'épaisseur L_1 de SC1.

Si L_1 augmente, les valeurs possibles des énergies quantifiées seront de plus en plus rapprochées jusqu'à se fondre en un continuum, et l'aspect quantique disparaît progressivement.

Si L_2 de SC2 augmente, (environ $> 200\text{\AA}$), les ondes évanescentes en $Z > Z_1 + L_1$ et $Z < Z_1$ s'annulent exponentiellement.

Ceci implique que la possibilité pour qu'un électron transite d'un puits vers un autre puits par effet tunnel est moins probable, dans cette situation, on dit que les puits sont indépendants non couplés (figure (I.6)) et dans chacun des puits la structure de sous bande est identique à celle d'un puits isolé, le mouvement des électrons dans la structure est bidirectionnel, c'est à dire parallèle aux interfaces.

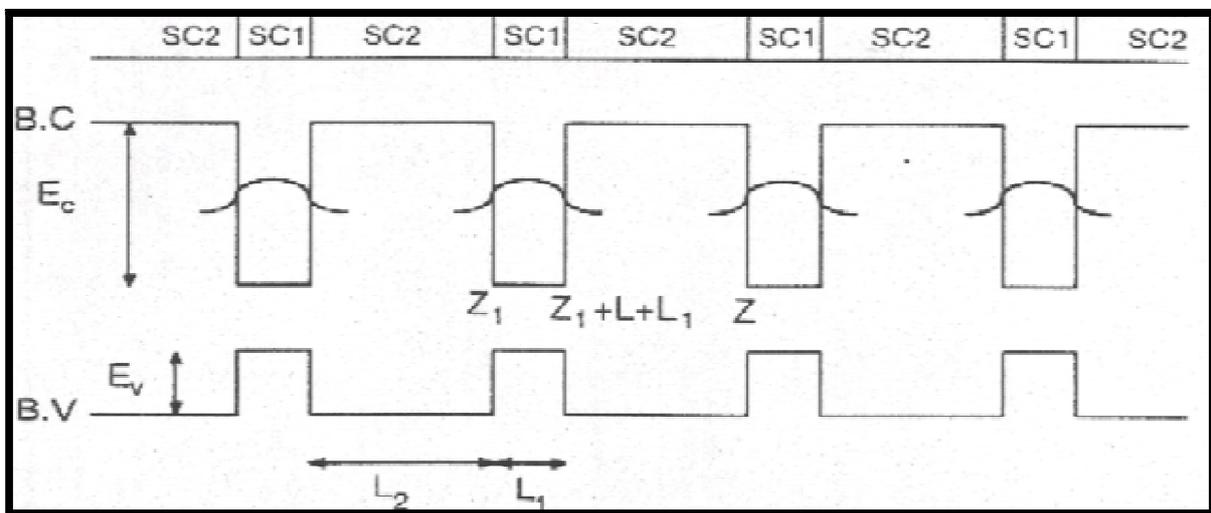


Figure I.5 : structure périodique à multi-puits quantiques non couplés de type 1.

I.7.2. Multi-Puits quantiques couplés (ou dépendants):

Si on fait diminuer l'épaisseur L_2 de SC2, les fonctions d'ondes sont différentes de 0 en $Z \gg Z_2$, et le couplage des états associés dans chacun des puits se manifeste et la probabilité de passage de l'électron du puits 1 vers le puits 2 par effet tunnel est non nulle, la réciproque est vraie. Dans cette situation le mouvement des électrons est ramené à 3 dimensions au lieu de deux comme dans le cas du MPQ non couplés. Le passage des électrons entre les puits quantiques par effet tunnel donne naissance à une nouvelle structure se qu'on l'appelle le super-réseau.

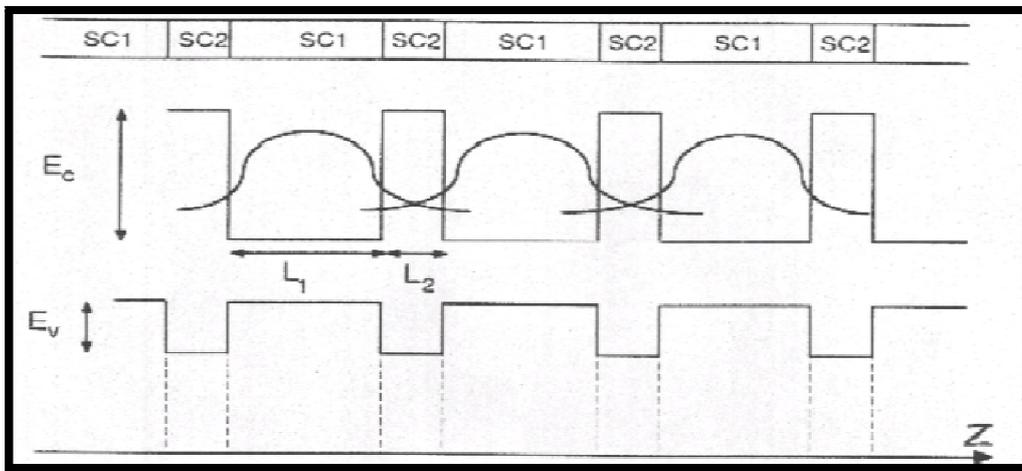
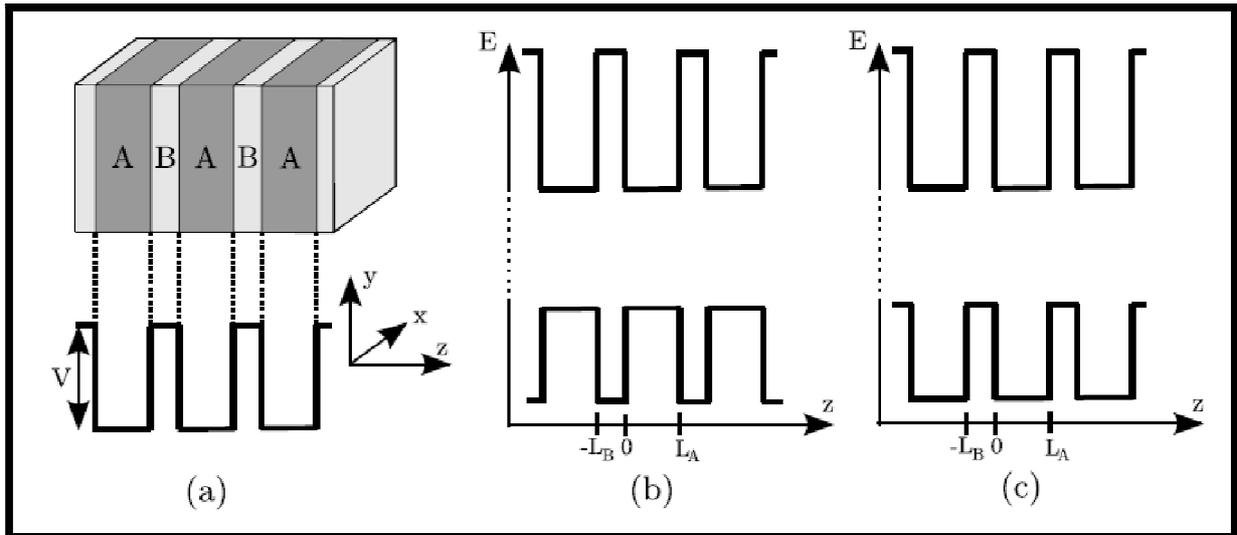


Figure I.6 : Structure à multi-puits quantiques couplés de type 1 ($L = L_1 + L_2$: période du Super-réseau).

I.8. Un super-réseau :

Un super-réseau est une structure de multi-puits quantiques dont les états électroniques associés aux puits sont couplés par effet tunnel. Le couplage des états résulte de la combinaison symétrique et antisymétrique des états liés aux puits. L'interaction des puits par effet tunnel assimilable à l'interaction des atomes et molécules dans un réseau cristallin, on obtient donc un réseau à une dimension dont le motif de répétition est un puits, double puits... etc., qui à évidemment une maille plus importante que celle des réseaux cristallins. Ces matériaux sont fabriqués en déposant côte à côte deux semi-conducteurs massifs SC1 et SC2 alternativement et périodiquement (figure (II.1)).


Figure .I.7:

- (a) Représentation schématisée d'un super-réseau de puits quantiques.
 (b) Structure de bande d'un super-réseau de type I.
 (c) Structure de bande d'un super-réseau de type II.

I.8.1. Super-réseaux III-V :

Le faible coût, la grande disponibilité, la grande conductivité thermique et la bonne qualité de son oxyde ont fait du silicium le matériau clé de l'électronique. Toutefois, les semi-conducteurs III-V sont rapidement apparus comme les matériaux de choix pour des applications spécialisées.

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés, formés à partir d'un élément de la 3^e colonne et d'un élément de la 5^e colonne de la classification périodique. Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants et à structure de bande indirecte. Les composés incluant du bore, de l'aluminium ou de l'azote et le phosphore de gallium *BP*, *GaP*, *AlP* et *BA*s entrent dans cette catégorie. Ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [17] qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [18].

Par ailleurs, l'interface entre deux composés différents (hétérojonction), présente des propriétés spécifiques, par exemple, la présence d'un gaz d'électrons bidimensionnel que l'on peut mettre à profit dans la réalisation de composants performants. L'empilement de couches alternées très minces de deux composés différents peut également faire apparaître des effets quantiques (puits quantiques multiples) ou même une périodicité supplémentaire du réseau cristallin (super-réseaux).

Il y a plusieurs possibilités de combinaison des semi-conducteurs binaires III V pour obtenir des super-réseaux, il suffit de choisir des gaps différents et des paramètres du réseau voisins. Le tableau (II.1) regroupe les binaires III V ainsi que leurs paramètres du réseau et leurs énergies de gap.

I.8.2. Les avantages liés aux super-réseaux :

- Le réseau représente une maille élémentaire importante $L = L_1 + L_2$.
- Le mouvement des électrons est ramené à trois dimensions.
- La résistance différentielle négative (diminution du courant dans le super-réseau cristallin (oscillations de Bloch)).

I.8.3. Les applications de super-réseaux :

Les super-réseaux possèdent un large domaine d'application surtout avec l'évolution technologique actuel, nous allons citer succinctement quelques applications.

I.8.3.1. La résistance différentielle négative:

Quand une différence de potentiel est appliquée à un super-réseau, les mini-bandes de la bande de conduction sont inclinées. Dans un super-réseau les mini-bandes sont très étroites et la probabilité est assez grande pour que les électrons passent du bord inférieur au bord supérieur d'une mini-bande. Arrivés au bord supérieur, ils sont réfléchis parce qu'ils ne peuvent pas aller vers la mini-bande supérieure (la bande interdite qui sépare les mini-bandes les en empêche).

Les électrons subissent plusieurs allers et retours entre les bords supérieurs et inférieurs de la mini-bande accomplissant plusieurs oscillations de Bloch avant d'émettre un phonon, comme la bande est inclinée, cette émission provoque un déplacement du centre de masse des électrons d'une certaine distance Δd . Cette distance Δd décroît quand l'inclinaison augmente, c'est à dire quand la tension appliquée augmente.

Ainsi donc le courant dans un super-réseau diminue quand la tension appliquée augmente. En d'autres termes, le cristal peut présenter une résistance négative donc il peut s'abstenir de consommer de l'énergie comme une résistance pure, mais au contraire il produit de l'énergie dans un oscillant. Un super-réseau peut donc servir d'élément actif dans le circuit oscillant.

I.8.3.2. Les lasers à puits quantiques :

Les lasers transmetteurs sont des composants clés dans les systèmes de communications optiques. Grâce à leurs performances supérieures, les lasers semi-conducteurs à puits quantiques sont particulièrement intéressants pour les systèmes de communications optiques.

chapiter II-Méthodes de calcul:

II.1. Introduction :

L'étude des structures de bandes permet d'interpréter plusieurs phénomènes physiques, qui se déroulent dans les corps solides. Dans ces corps, cette structure peut être obtenue en tenant compte de toutes les interactions existant entre les noyaux et les électrons. Les résolutions des équations générales sont impossibles, mais on peut toujours adopter des modèles simplifiés pour pouvoir obtenir des solutions approchées.

Dans ce chapitre, on expose d'une manière brièvement la méthode de calcul utilisée dans ce travail.

La **DFT** fournit une méthodologie de la mécanique quantique alternative à la méthode Hartree-Fock (**HF**). Le principal intérêt de ce formalisme réside dans le fait qu'il permet de modéliser des systèmes relativement étendus (grosses molécules, solides) avec une grande précision comparativement à la méthode **HF** qui requiert un effort numérique considérable pour la prise en compte des corrélations électroniques. La **DFT** présente en effet l'avantage de prendre en considération la corrélation électronique directement au sein de son formalisme. L'introduction du terme d'échange et de corrélation a permis d'atteindre une bonne exactitude dans les calculs des énergies de formation, paramètres de maille et aussi des énergies de surface comme ça a été discuté par Perdew et ses collègues [19, 20].

II.2. Hamiltonien exact du cristal :

Les solides sont constitués par une association de particules élémentaires : Les ions et les électrons. Le problème théorique fondamental de la physique des solides est de comprendre l'organisation intime de ces particules à l'origine de leurs propriétés. Mais dans ce cas, la mécanique classique s'avère être insuffisante et il faut faire appel à la mécanique quantique dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger : $\mathbf{H}\Psi = \mathbf{E}\Psi$ (2.1)

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

$$\mathbf{H}_{\text{total}} = \mathbf{T}_n + \mathbf{V}_{nn} + \mathbf{V}_{ne} + \mathbf{V}_{ee} + \mathbf{T}_e \quad (2.2)$$

\mathbf{T}_n : est l'énergie cinétique des noyaux.

\mathbf{V}_{nn} : l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

\mathbf{V}_{ne} : l'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.

\mathbf{V}_{ee} : l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

\mathbf{T}_e : l'énergie cinétique des électrons.

La solution de l'équation (2.1) avec $\mathbf{H}_{\text{total}}$ conduit à la résolution d'un problème à \mathbf{N} corps.

II.2.1. Approximation de Born-Oppenheimer :

Les diverses méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques des matériaux à l'état solide mises au point au cours des dernières décennies reposent sur un certain nombre d'approximations. Suivant Born et Oppenheimer [21], on commence par négliger le mouvement des noyaux par rapport à celui des électrons et l'on ne prend en compte que celui des électrons dans le réseau rigide périodique des potentiels nucléaires. On néglige ainsi l'énergie cinétique \mathbf{T}_n des noyaux et l'énergie potentielle noyaux-noyaux devient une constante qu'on peut choisir comme la nouvelle origine des énergies.

$$\mathbf{H}_{\text{total}} = \mathbf{T}_e + \mathbf{V}_{ne} + \mathbf{V}_{ee} \quad (2.3)$$

L'approximation de Born-Oppenheimer est qualifiée d'adiabatique car elle consiste à séparer le problème électronique de celui des vibrations du réseau. On pourra toujours introduire ultérieurement \mathbf{T}_n et \mathbf{V}_{nn} pour aborder le problème des vibrations du réseau (phonons) mais en supposant qu'il n'y a pas d'échange d'énergie entre le système électronique d'une part et les modes de vibration d'autre part.

II.2.2. Approximation de Hartree :

La résolution de l'équation de Schrödinger avec l'Hamiltonien, nécessite une autre approximation qui consiste à considérer l'ensemble des interactions entre les électrons comme étant une interaction d'un électron avec un champ moyen (self consistant) créé par tous les autres électrons du solide [22]. La fonction d'onde de ce système sera alors réduite à un produit de fonctions d'ondes mono-électroniques $\varphi_i(\mathbf{r}_i)$:

$$\Psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \dots \varphi_N(\mathbf{r}_N) \quad (2.4)$$

L'équation de Schrödinger serait la somme d'un Hamiltonien mono-électronique :

$$\mathbf{H}_i \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \quad (2.5)$$

Avec :

$$\mathbf{H}_i = -\frac{1}{2} \Delta_{r_i} + V_{ext}(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (2.6)$$

où \mathbf{V}_{ext} est le potentiel d'interaction noyaux-électron.

II.2.3. Approximation de Hartree-Fock :

L'approximation de Hartree-Fock [23] a été introduite pour tenir compte du spin des électrons, et donc du «principe d'exclusion de Pauli» pour la résolution de l'équation de Schrödinger. Dans cette approximation Fock a exprimé la fonction d'onde multiélectronique Ψ comme un déterminant de Slater construit à partir de N fonction d'onde mono-électronique.

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \Psi_1(2) & \dots & \Psi_1(N) \\ \Psi_2(1) & & & \\ \dots & & & \\ \Psi_N(1) & & & \Psi_N(N) \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

L'énergie électronique moyenne E_e est obtenue par une minimisation de l'hamiltonien électronique en appliquant le principe variationnel:

$$E(\Psi) = \frac{\int \Psi^* . H . \Psi}{\int \Psi^* . \Psi} . dt \quad (2.8)$$

La procédure de minimisation de l'énergie est une procédure auto-cohérente avec des contraintes d'orthonormalité pour les orbitales, et la meilleure fonction d'onde est recherchée en basant sur cette procédure. Avec cette idée, Hartree-Fock ont développé de façon simultanée et indépendante ce qui est maintenant bien connue comme les équations de Hartree-Fock, qu'ils peuvent être vue comme les équations de Schrödinger pour un électron qui se déplace dans un potentiel créé par les noyaux et les autres électrons.

II.3. Théorie de la Fonctionnelle de densité (DFT) :

La théorie fonctionnelle de la densité est proposée par Hohenberg et Kohn [24]. Son principe considère que chaque état possédant une énergie totale E d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel extérieur est représenté comme une fonctionnelle de la densité électronique de l'état fondamental $n(\mathbf{r})$, $E=E[n(\mathbf{r})]$.

Cette considération nous guide vers le théorème de Hohenberg et Kohn [24] qui est la base de la théorie fonctionnelle de la densité. Ce théorème montre que la vraie densité de l'état fondamental n'est autre que la densité qui minimise l'énergie $E[n(\mathbf{r})]$ et toutes les autres propriétés sont fonctionnelles de la densité de l'état fondamental. L'énergie totale s'écrit :

$$E=E[n(\mathbf{r})]=F[n(\mathbf{r})]+\int V(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (2.9)$$

Où $V(\mathbf{r})$ est le potentiel extérieur, $F[n(\mathbf{r})]$ est la fonctionnelle de Hohenberg et Kohn, cette dernière est une fonction universelle de la densité électronique $n(\mathbf{r})$ et ne dépend pas du potentiel extérieur. Elle est valable pour l'atome, molécule et solide. Les différentes interactions présentes dans la fonctionnelle seront disponibles que si la fonctionnelle de Kohn et Sham est connue. D'après Kohn et Sham [25] la fonctionnelle $F[n(\mathbf{r})]$ s'écrit sous la forme suivante :

$$F[n(\mathbf{r})]=T[n(\mathbf{r})]+V_{e-e}[n(\mathbf{r})] \quad (2.10)$$

avec $T[n(\mathbf{r})]$ représente l'énergie cinétique et $V_{e-e}[n(\mathbf{r})]$ le potentiel d'interaction électron-électron.

Si nous avons un ensemble d'électrons non interagissant dans un potentiel complexe avec la même densité $n(\mathbf{r})$ alors,

$$E[n(\mathbf{r})]=T^{non-int}[n(\mathbf{r})]+J[n(\mathbf{r})]+E_{xc}[n(\mathbf{r})]+\int V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (2.11)$$

J : l'énergie d'interaction de coulomb classique, son expression est :

$$J[n(\mathbf{r})]=\frac{1}{2}\iint\frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}' \quad (2.12)$$

$T^{non-int}[n(\mathbf{r})]$: l'énergie du système non interagissant et elle est donnée par,

$$T^{non-int}[n(\mathbf{r})]=\frac{1}{2}\sum_i|\nabla\Psi_i|^2 \quad (2.13)$$

avec $\int V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$ est l'énergie potentielle d'interaction avec le champ extérieur. l'énergie d'échange et de corrélation E_{xc} pour tout le volume est exprimée par :

$$E_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})]=\int\epsilon_{xc}^{LDA}n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (2.14)$$

Le terme d'échange et de corrélation résulte de l'interaction électron-électron. Cette interaction est de nature électrostatique (coulombienne) et traduit la répulsion entre les électrons. Donc pour résoudre ce problème, on suppose que les électrons ont des configurations spatiales distinctes, ce qui diminue leurs énergies d'interaction.

La connaissance du terme d'échange et corrélation est alors nécessaire pour la résolution du système électronique. Puisque $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ n'est pas connue exactement, on fait appel alors à l'approximation de la densité locale.

II.3.1. Les équations de Kohn et Sham :

D'après Kohn et Sham [25], la résolution de l'équation de Schrödinger pour une seule particule s'écrit comme suit :

$$\left[\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

avec :

- n_i : le nombre d'occupation
- E_i : la valeur propre d'un seul électron dans l'état i
- ψ_i : la fonction propre d'un seul électron dans l'état i
- $V(\mathbf{r})$: le potentiel de Coulomb
- $V_H(\mathbf{r})$: le potentiel électronique de Hartree qui est exprimé par :

$$V_H(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{2} \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \quad (2.16)$$

$V_{xc}[n(\mathbf{r})]$: le potentiel d'échange et de corrélation obtenu par la simple dérivée de l'énergie d'échange et de corrélation par rapport à la densité électronique :

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\partial E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\partial n(\mathbf{r})} \quad (2.17)$$

Comme chaque électron subit l'effet du potentiel effectif créé par tous les autres électrons, les équations de Kohn et Sham deviennent :

$$H\Psi_i = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i \quad (2.18)$$

II.4.Approximation pour le terme d'échange et de corrélation (XC) :

L'élaboration des équations de Kohn-Sham a permis de mettre en évidence le fait que la seule fonctionnelle de la densité demeurant inconnue au sein de ce formalisme correspond à la fonctionnelle d'échange-corrélation. Historiquement, la première approximation proposée est celle de la densité locale (LDA : local density approximation), qui considère le système électronique comme un gaz d'électrons localement uniforme. D'autres approximations ont été élaborées dans le but d'améliorer le traitement de l'échange et de corrélation proposé par la LDA. Elles constituent des tentatives de prise en compte de la non-homogénéité et du caractère non-local de la distribution électronique.

II.4.1.L'approximation de la densité locale (LDA) :

L'approximation de la densité locale (LDA) est très utilisée comme moyen pour approximer l'énergie d'échange et de corrélation. Elle consiste à employer le terme d'échange et de corrélation correspondant à un gaz d'électron homogène possédant une densité locale $n(\mathbf{r})$ au point r .

$$\text{Avec } V_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})] = \mathcal{E}_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})] + n(\mathbf{r}) \frac{\delta \mathcal{E}_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (2.19)$$

où $\mathcal{E}_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})]$ est l'énergie d'échange et de corrélation par électron dans un gaz d'électron libre et peut être décomposée en deux contributions. Dans la LDA le terme d'échange est obtenu exactement comme suit :

$$\mathcal{E}_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})] = -\frac{3}{4} \left(\frac{3n(\mathbf{r})}{\pi} \right)^{1/3} \quad (2.20)$$

On En déduit que :

$$V_x^{LDA}[n(\mathbf{r})] = -\left(\frac{3n(\mathbf{r})}{\pi} \right)^{1/3} \quad (2.21)$$

II.4.2.L'approximation du gradient généralisé (GGA) :

La LDA a donné des résultats très fiables dans plusieurs cas, mais son seul point faible reste qu'elle sous-estime les gaps d'énergie dans les matériaux semi-conducteurs. Ces écarts proviennent du modèle du gaz d'électrons uniforme, car elle n'est correcte que dans la limite d'une distribution de densité variant infiniment lentement. A la différence de la LDA, ici

l'énergie d'échange et de corrélation n'est plus seulement une fonction locale de la densité électronique mais dépend aussi de l'amplitude du gradient de cette même densité.

$$E_{XC}^{GGA} = \int \epsilon_{XC}^{unif}[\rho(r), \Delta\rho(r)]\rho(r)dr \quad (2.22)$$

Plusieurs formes de cette approximation semi-locale ont été développées par: *Perdew et Wang* GGAPW [26], *Perdew-Burke-Ernzerhof* GGA-PBE [27] et la *Meta-GGA* [28]. La différence entre celles-ci réside dans le choix des dérivées de l'énergie XC par rapport aux gradients de densité d'ordre supérieur à un, ainsi qu'aux détails de la paramétrisation. Ces fonctionnelles apportent une certaine amélioration par rapport à la LDA, de la précision dans le calcul du paramètre de maille (avec une légère surestimation) et une meilleure estimation de l'énergie de liaison. Cependant, la valeur du gap d'énergie pour les semi-conducteurs reste considérablement sous-estimée par les méthodes GGA classiques. L'introduction de nouvelles fonctionnelles, en l'occurrence celle Engel-Vosko (EV-GGA) [29–31] ont permis d'améliorer le calcul du gap.

II.5. La méthode utilisé “Full Potential Linear Muffin Tin Orbital”

FP-LMTO :

La méthode linéaire des orbitales muffin-tin (LMTO) est parmi les techniques qui jouent un rôle très important pour résoudre les équations de la fonctionnelle de la densité [32] pour un système de matière condensée. Cette approche est caractérisée par deux points :

- 1- L'utilisation des fonctions de base d'atome centré qui sont définies par le moment angulaire, construites en dehors des fonctions de Hankel.
- 2- L'utilisation de l'augmentation pour introduire les détails atomiques dans les fonctions de base à proximité de chaque noyau.

De façon générale, le raisonnement de cette approche est de construire les fonctions de base qui ressemblent beaucoup aux fonctions d'ondes du début. Pour la méthode (LMTO), l'équilibre n'est aucun doute positif si l'approximation de la sphère atomique est employée. Le potentiel d'un électron est modélisé par une superposition de potentiels sphériques à l'intérieur des sphères chevauchées. Là où cette approximation est applicable, la méthode (LMTO-ASA) est vraisemblablement le procédé le plus efficace pour résoudre les équations de la fonctionnelle de la densité à un degré d'exactitude raisonnablement élevé. Cependant, le

potentiel total (full-potential) dépasse (ASA) ; ceci est dû au changement de l'énergie totale liée aux déformations des phonons et aux relaxations atomiques, surtout sur une surface ou autour d'une impureté, en plus, parce que la méthode (LMTO-ASA) n'est pas efficace dans les situations à basse symétrie. Finalement, puisque les énergies liées à de telles déformations ne sont pas fiables, la question de calcul des forces sur les atomes ne se pose même pas. Cependant les forces sont des conditions nécessaires dans les calculs. Dans l'intérêt de l'efficacité, les fonctions de base de la méthode (LMTO) sont modifiées de telle sorte que l'ensemble de base peut être plus petit et l'effort pour une intégration numérique des éléments de la matrice du potentiel est réduit. En même temps, une reformulation du procédé d'augmentation est exigée, puisque le développement de la constante de structure ne peut être employée pour les fonctions modifiées.

Par exemple Methfessel [33] a développé la méthode (FP-LMTO), en considérant un lissage des fonctions de Hankel « Augmented Smooth Hankel functions » qui jouent le rôle des fonctions enveloppes de la méthode (LMTO), par contre, Savrasov a considéré les fonctions de Hankel avec l'introduction des transformée de Fourier pour le calcul dans les régions interstitielles.

De façon générale, ces critères sont utilisés afin d'améliorer et développer la méthode (LMTO) ; nous allons décrire ces développements et montrer la différence avec d'autres méthodes telle que la méthode (FP-LAPW).

II.6. Instruction de base :

On suppose que l'espace cristallin est divisé en sphères d'atome centré et la région restante c'est la région interstitielle. La densité de charge et le potentiel effectif sont augmentés par des harmoniques sphériques à l'intérieur des sphères :

$$\rho_{\tau}(r_{\tau}) = \sum_L \rho_{L\tau}(r_{\tau}) i^L Y_L(r) \quad (2.23)$$

$$V_{\tau}(r_{\tau}) = \sum_L V_{L\tau}(r_{\tau}) i^L Y_L(r) \quad (2.24)$$

L'équation de Schrödinger est résolue en termes du principe variationnel :

$$(-\nabla^2 + V - E_{k\lambda}) \psi_{k\lambda} = 0 \quad (2.25)$$

$$\psi_{k\lambda}(r) = \sum_{Lk\tau} A_{Lk\tau}^{k\lambda} \chi_{Lk\tau}^k(r) \quad (2.26)$$

et le problème de la valeur propre est

$$\sum_{Lk\tau} \langle \chi_{Lk\tau}^k | -\nabla^2 + V | \chi_{Lk\tau}^k \rangle - E_{k\lambda} \langle \chi_{Lk\tau}^k | \chi_{Lk\tau}^k \rangle A_{Lk\tau}^{k\lambda} = 0 \quad (2.27)$$

II.7. Fonctions de base :

L'espace est divisé en sphères muffin-tin non chevauchées (où légèrement chevauchées) S_R entourant chaque atome et la région restante c'est la région interstitielle Ω_{int} . A l'intérieur des sphères, les fonctions de base sont représentées en termes de solutions numériques de l'équation de Schrödinger radiale pour la partie sphérique du potentiel multipliées par des harmoniques sphériques ainsi que leurs dérivés d'énergie prises à un certain niveau d'énergie ε_v . Dans la région interstitielle, où le potentiel est essentiellement constant, les fonctions de base sont des ondes sphériques prises des solutions de l'équation de Helmholtz : $(-\nabla^2 - \varepsilon)f(r, \varepsilon) = 0$ avec une certaine valeur fixe de l'énergie cinétique moyenne $\varepsilon_v = k_v^2$. En particulier, dans la méthode LMTO standard utilisant l'approximation de la sphère atomique (ASA), la valeur choisie de $k_v^2 = 0$. Dans les développements de la méthode LMTO pour un potentiel de la forme arbitraire (full potential), plusieurs ensembles de base kappa sont normalement utilisés afin d'augmenter la liberté variationnelle des fonctions de bases tandis que les développements récents d'une nouvelle technique LMTO évite ce problème.

La stratégie générale pour inclure les termes du potentiel total (full potential) dans le calcul est l'utilisation du principe variationnel. Quelques différentes techniques ont été développée pour tenir compte des corrections non sphériques dans le cadre de la méthode LMTO. Elles incluent les transformée de Fourier dans la région interstitielle, les développements des harmoniques sphériques à un centre dans les cellules atomiques, les interpolations en termes de fonctions de Hankel aussi bien que des calculs directs de la densité de charge dans la représentation tight-binding.

Dans les deux arrangements, le traitement des structures ouvertes, par exemple, la structure diamant est compliquée et les sphères interstitielles sont habituellement placées entre les sphères atomiques.

De ce fait, est développée la technique (linear-response LMTO) en utilisant la représentation des ondes planes de Fourier.

Les ondes planes partielles ou les orbitales muffin-tin sont définies dans l'espace entier :

$$\chi_{Lk\tau}(\mathbf{r}_\tau) = \Phi_{Lk\tau}^H(\mathbf{r}_\tau) \quad r_\tau < S_\tau \quad (2.28)$$

et

$$\chi_{Lk\tau}(\mathbf{r}_\tau) = H_{Lk\tau}(\mathbf{r}_\tau) \quad r_\tau > S_\tau \quad (2.29)$$

où $\Phi_{Lk\tau}^H(\mathbf{r}_\tau)$ est construite à partir de la combinaison linéaire ϕ_v et $\dot{\phi}_v$ avec la condition de l'augmentation du lissage de la sphère.

II.9. Avantages et inconvénients de la méthode LMTO :

Les avantages de définir les fonctions de base de la méthode LMTO comme des fonctions de Hankel augmentées ne sont pas évidentes. Cela mène à un formalisme compliqué et un grand effort de programmation. D'où l'avantage de la méthode LMTO.

- les fonctions LMTO sont construites pour être semblable aux véritables fonctions d'onde du cristal. En fait, si le potentiel cristallin est approximé par la forme muffin-tin, c'est à dire, sphérique à l'intérieur des sphères et constant à l'extérieur, la véritable fonction d'onde du cristal devient une somme finie des fonctions LMTO.
- Une conséquence de la petite taille de base, les calculs devrait être rapide. Plus précisément, la réduction de la base par la moitié qui peut sauver un sept-huitième du temps machine.
- Une autre conséquence de la petite taille de la base est la réduction de la mémoire demandée, qui peut être également importante en économisant le temps machine quand on calcule les grands systèmes.

En tant qu'inconvénient principal, la complexité de l'approche doit être soulignée. En plus du plus grand effort de l'exécution, deux conséquences principales sont comme suit :

- En appliquant une méthode utilisant un ensemble de base de la méthode LMTO, un nombre de paramètres considérable doit être choisi raisonnablement. Ceci commence par la division de l'espace quand les rayons de la sphère atomique sont définis et le choix de l'ensemble de base. Après cela, un des paramètres de convergence (tels que les moments angulaires de coupures) doivent être indiqué.

- Il est extrêmement difficile de faire des modifications. Par exemple, considérer l'évaluation des éléments de la matrice optique, c'est à dire, la valeur de l'opérateur du gradient $i\nabla$ entre deux fonctions d'onde.

Résultats et discussions:

III – 1 – Introduction :

Les semi-conducteurs III-V à base de l'arséniure (GaAs et AlAs) étudiés dans ce chapitre cristallisent dans la structure zinc blende. La cellule primitive comporte deux atomes, un cation et un anion, et chacun des atomes a quatre paires de liaison atomique, formant ainsi un tétraèdre. La structure zinc blende peut être vue comme une superposition de deux sous réseaux cubiques à faces centrées (cfc), décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart suivant la diagonale principale. La maille conventionnelle de la structure zinc blende est représentée dans la figure III.1.

Par ailleurs, l'interface entre deux composés différents (hétérojonction), présente des propriétés spécifiques, par exemple, la présence d'un gaz d'électrons bidimensionnel que l'on peut mettre à profit dans la réalisation de composants performants. L'empilement de couches alternées très minces de deux composés différents peut également faire apparaître des effets quantiques (puits quantiques multiples), ou même une périodicité supplémentaire du réseau cristallin (super-réseaux).

Notre modeste contribution dans l'étude théorique de ce superréseau est d'étudier les propriétés structurale, électronique pour les deux configurations ($n=1,2$), nous avons utilisé la méthode du potentiel total des orbitales muffin-tin linéaire (FP-LMTO) augmentés par les bases des ondes planes.

Au cours de ce chapitre nous allons analyser les résultats obtenus en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, appliquée aux semi-conducteurs III-V à base de l'arséniure GaAs et AlAs. Les calculs entrepris nous ont permis d'évaluer leurs différentes propriétés structurales et électroniques et de les comparer aux résultats théoriques disponibles.

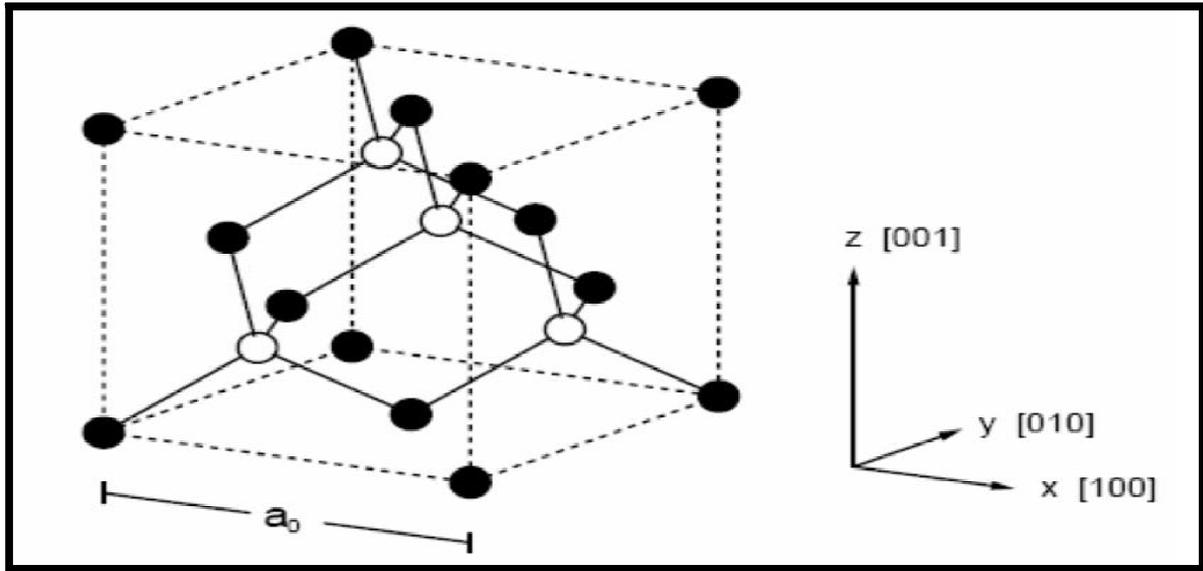


Figure III.1 : Structure cristalline zinc blende, les cercles pleins sont occupés par un type d'atome et les cercles vides par un autre. Les liaisons tétraédriques entre premiers voisins sont représentées (Figure extraite de la référence [34]).

III. 2. Propriétés des matériaux massifs :

III.2.1. Les propriétés structurales :

Dans cette partie, nous nous sommes intéressés à la détermination des propriétés structurales des deux binaires *GaAs*, *AlAs* dans la phase zinc-blend, ces propriétés nous permettent d'avoir des informations sur les propriétés des matériaux du point de vue microscopique. Les figures (III.1, III.2) représentent la variation de l'énergie totale en fonction du paramètre du réseau pour les deux binaires *GaAs*, *AlAs* respectivement.

Les propriétés de l'équilibre statique tel que le paramètre du réseau, le module de compressibilité (B_0), sa dérivée (B_0') et l'énergie totale sont obtenues par l'équation d'état proposée par Birch [35] :

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

Avec :

E_0 : L'énergie d'équilibre,

V_0 : Le volume d'équilibre,

B_0 : Le module de compressibilité,

B_0' : La première dérivée du module de compressibilité.

Tandis que N représente l'ordre d'ajustement. Pour un ajustement du second ordre ($N = 2$), il est évident qu'expérimentalement $B_0' = 4$, dont la valeur est considérée habituellement entre 3 et 5.

La constante du réseau de l'équilibre est donnée par le minimum de la courbe $E(V)$, concernant le module de compressibilité B_0 , ce dernier mesure la résistance à une modification du volume dans les solides et donne ainsi une estimation de la réponse élastique d'un matériau à une pression hydrodynamique externe. La valeur $B_0(V)$ est liée à la courbure de la fonction $E(V)$:

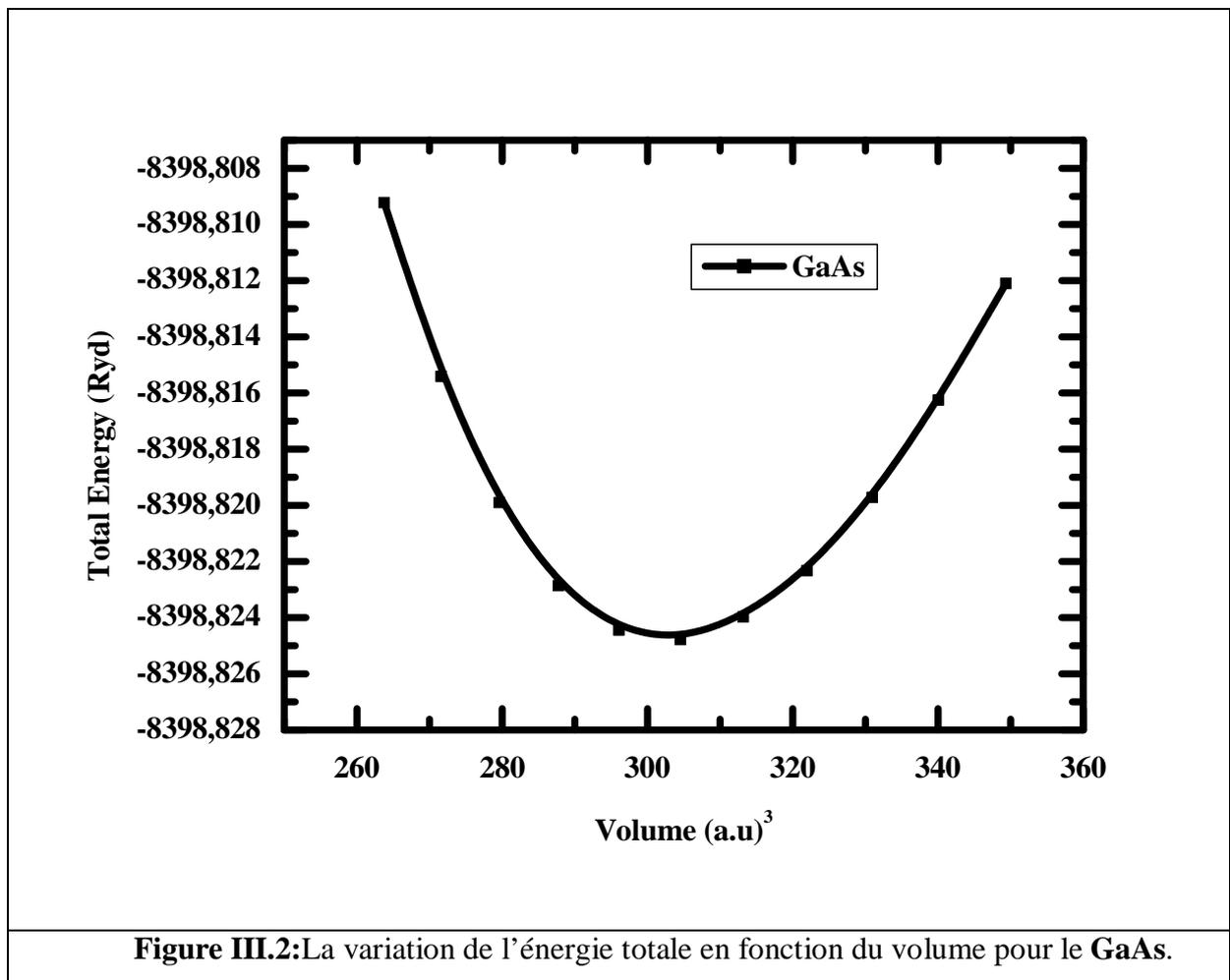
$$B_0(V) = -V \frac{\partial P}{\partial V} = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III.2})$$

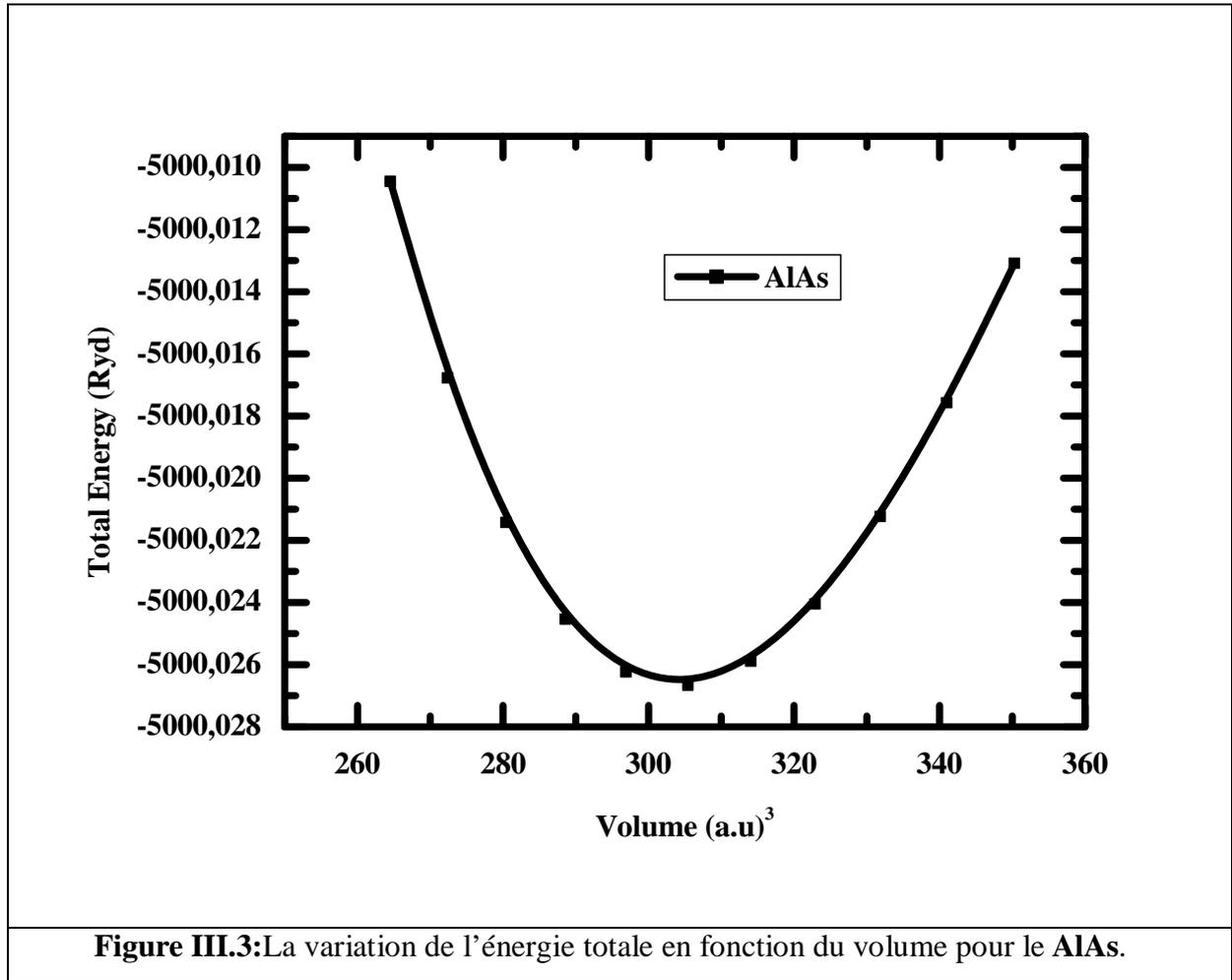
Où V est le volume de la maille unitaire, $E(V)$ est l'énergie par maille unitaire en fonction du volume V , et $P(V)$ est la pression nécessaire pour maintenir la maille unitaire au volume V .

La dérivée du module de compressibilité B'_0 est déterminée par l'équation suivante :

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

Dans cette phase plusieurs études théoriques ont été effectuées sur ces binaires et des résultats sont obtenus par l'utilisation de différentes méthodes.





Les tableaux (III.1, III.2) montrent les résultats structuraux obtenus pour nos binaires et qui sont en bon accord avec les données expérimentales.

<i>GaAs</i>	a_0 (u.a)	B_0 (GPa)	B'_0
notre présent travail	10,66	72,77	4,29543
Autres résultats	10,51 [36] 10,41 [37]	75,4 60,4 [36]	-

^a Ref.[36], ^b Ref.[37]

Tableau III.1 : Le paramètre du réseau a , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B'_0 de *GaAs*.

<i>AlAs</i>	a_0 (u.a)	B_0 (GPa)	B'_0
notre présent travail	10,67	69,09	4,85014
Autres résultats	10,648[38]	75,10[38]	4,512[38]
	10,839[38]	66,50[38]	4,184[38]
	10,669[39]	75,40[39]	4,400[39]

^a Ref.[38], ^b Ref.[39]

Tableau III.2 : Le paramètre du réseau a , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B'_0 de *AlAs*.

Dans les tableaux **III.1** et **III.2**, nos résultats pour la structure zinc blend des deux binaires GaAs et AlAs sont comparés avec quelques données d'autres résultats. Les paramètres d'équilibre a_0 calculés et même avec les valeurs d'autres résultats. Les valeurs du module de compressibilité et sa dérivée (B_0 et B'_0) évaluées à la pression nulle sont estimées à (72,77GPa et 4,29543), (69,09GPa et 4,85014) pour *GaAs*, *AlAs* respectivement. Si on compare nos valeurs trouvées avec d'autres calculs et même avec les valeurs d'autres résultats, on trouve que leurs paramètres de réseau d'équilibre, le module de compressibilité et sa dérivée sont en très bon accord avec nos résultats.

III.2.2. Propriétés électroniques :

Les structures de bandes le long des directions de hautes symétries dans la zone de Brillouin pour les binaires sont calculées aux paramètres de mailles d'équilibres et sont représentées dans les figures **III.3** et **III.4**.

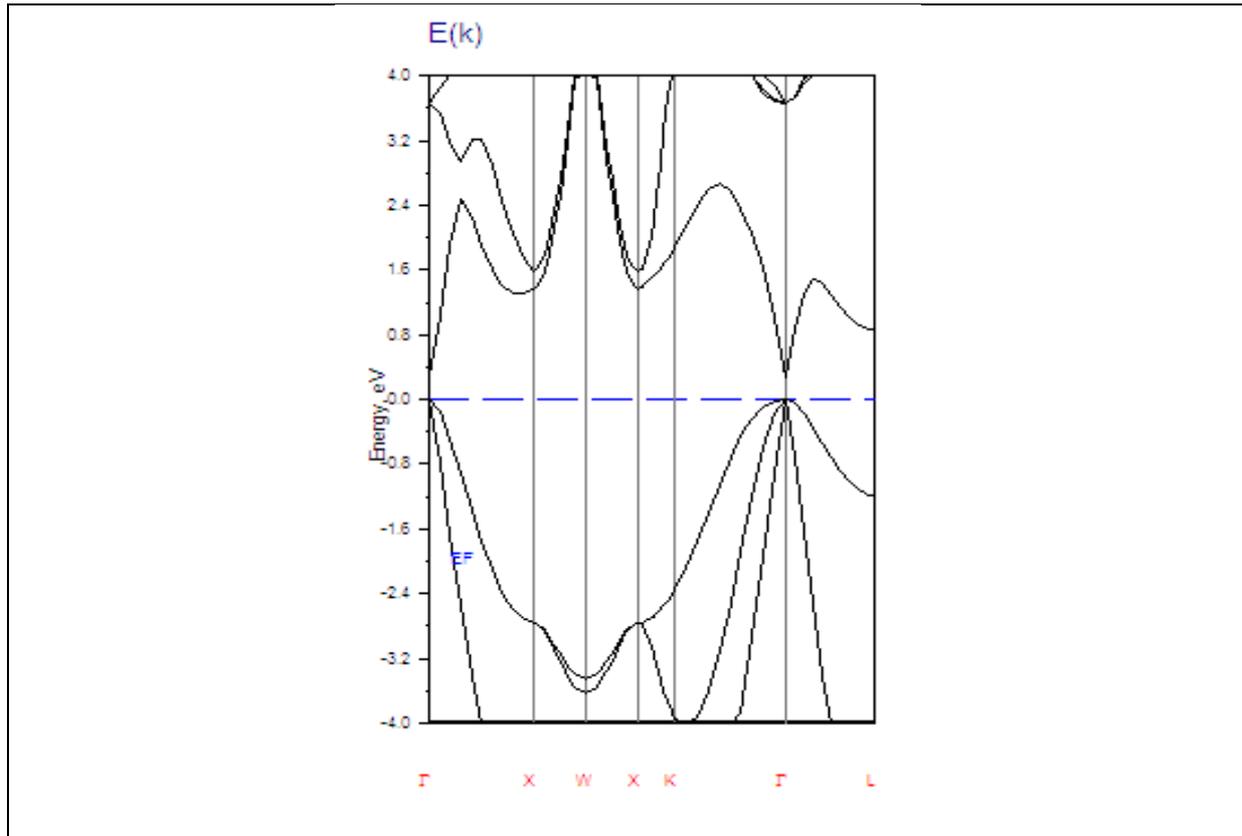


Figure III.4: Structure de bande électronique du *GaAs* dans la phase Zinc-blende .

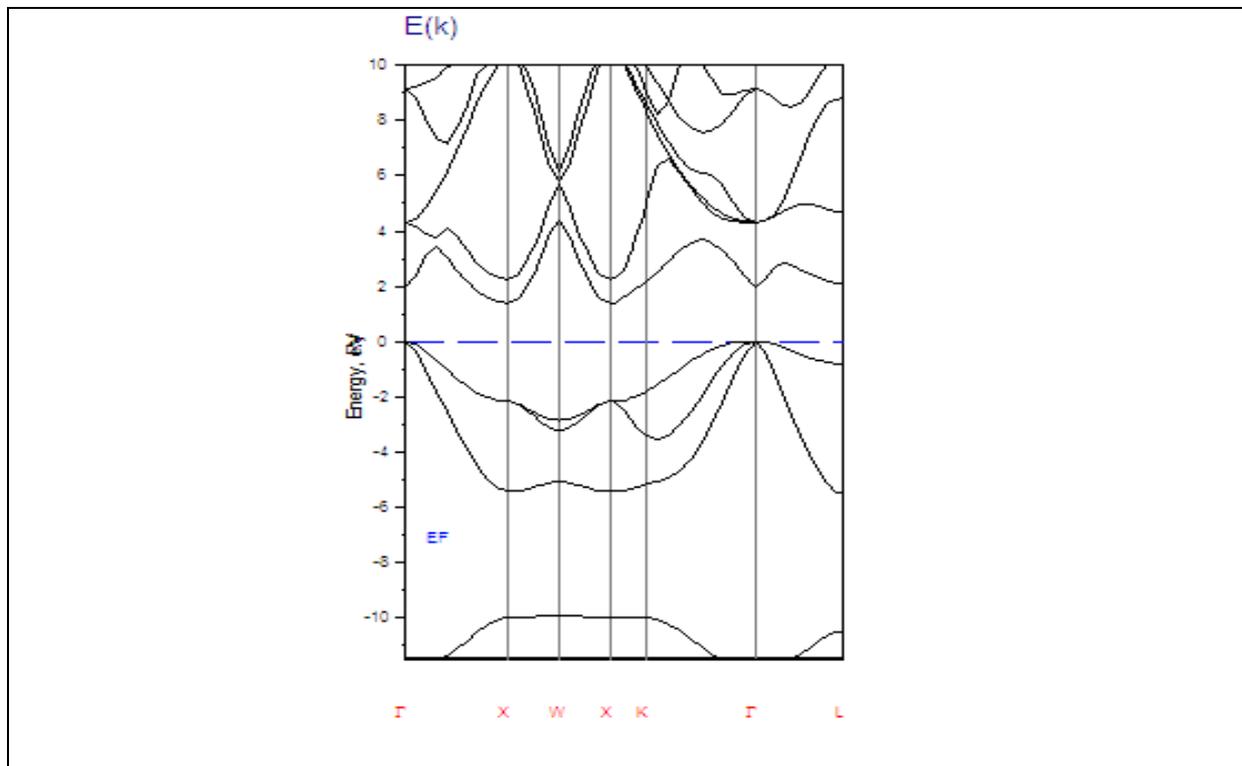


Figure III.5: Structure de bande électronique du *AlAs* dans la phase Zinc-blende.

D'après la figure (III.4) , nous pouvons voir clairement le comportement semiconducteur à gap direct de binaire (GaAs), Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction est situé au point Γ .et d'après la figure (III.5) le comportement semi-conducteur à gap indirect de binaire (AlAs), Le maximum de la bande de valence est situé au point Γ pour le binaires mais le minimum de la bande de conduction est situé au point X .

Les énergies des bandes calculées des deux binaires dans la phase Zinc-blende sont récapitulées dans les Tableaux III.3 et III.4.

<i>GaAs</i>	$E_g(\Gamma - \Gamma) (ev)$
notre présent travail	0.262
Autres résultats	1.062 , 1.717 [40]

^a Ref.[40].

Tableau III.3 : L'énergies de bande du *GaAs* en (eV) dans la structure zinc-blende.

<i>AlAs</i>	$E_g (\Gamma - \Gamma) (ev)$	$E_g (\Gamma - X) (ev)$
notre présent travail	3.54	3 .08
Autres résultats	3.13 and 3.03 ev [41]	-

^a Ref.[41] .

Tableau III.4 : L' énergies de bande du *AlAs* en (eV) dans la structure zinc-blende.

III.3. Super-réseaux :

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

III.3.1. Les propriétés structurales :

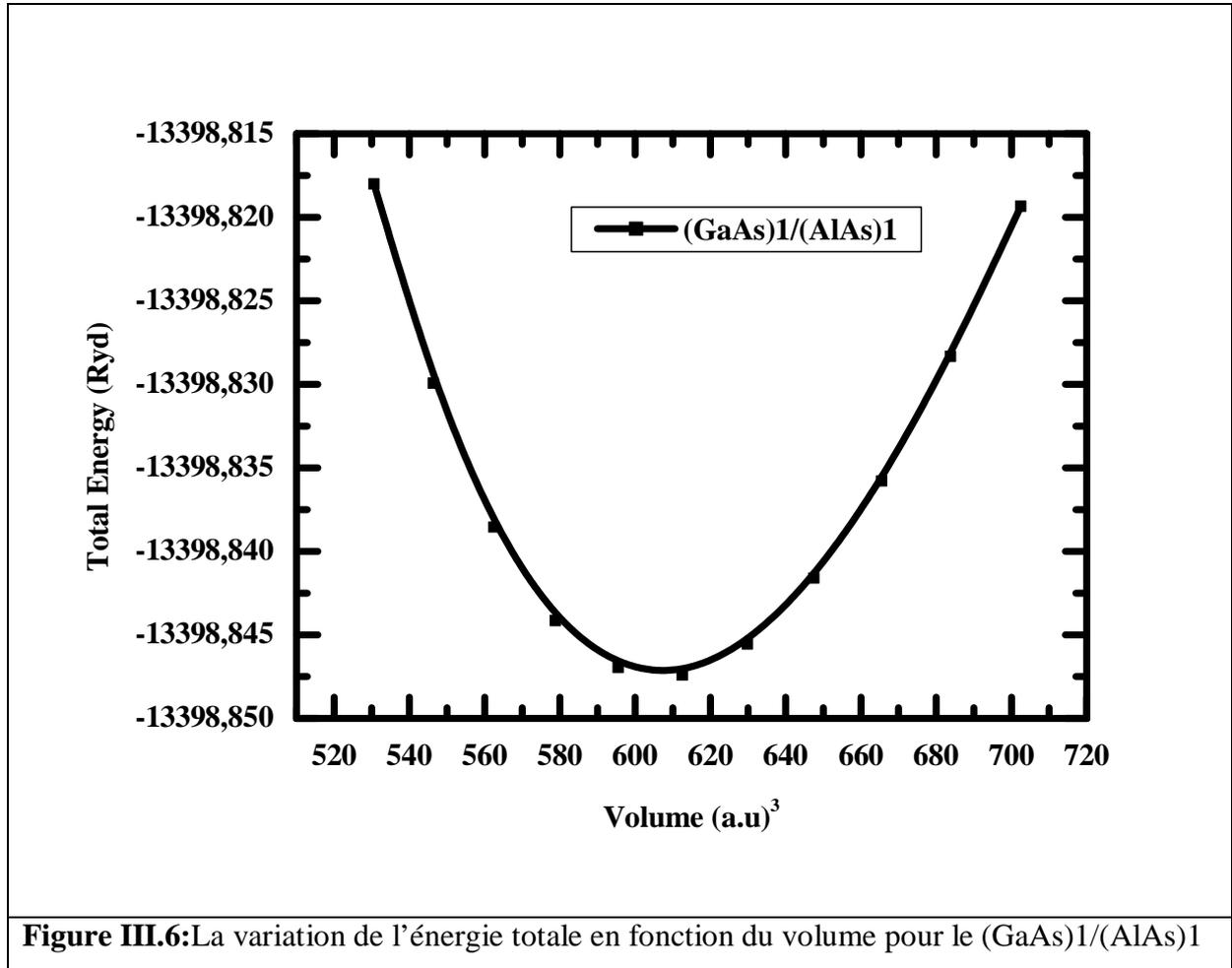
Les super-réseaux $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ sont constitués d'une séquence de couches alternées de $n GaAs$, $n AlAs$ pour le $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ respectivement suivant une direction déterminée de croissance. Dans notre cas, nous avons choisi l'axe [001] comme axe de croissance. Les binaires massifs ont une structure diamant et les super-réseaux SLs(m,n) ont une symétrie tétragonale (m et n sont les nombres de monocouches).

Le volume de la cellule élémentaire V_{SL} du SL(m,n) est $[(m+n)/2]$ fois le volume massif (bulk) V_b pour le même $(m+n)$ et les vecteurs de translation de la primitive du super-réseau SL(n,n) sont données par:

$$a_1 = \frac{a_0}{2}(1, 1, 0), \quad a_2 = \frac{a_0}{2}(-1, 1, 0), \quad a_3 = \frac{a_0}{2}(0, 0, n) \quad (III.4)$$

Où a_0 est le paramètre de maille, et la période du SL (n, n) est $n \times a_0$.

Dans notre travail, nous avons effectué un calcul self consistant de l'énergie totale pour plusieurs paramètres du réseau. Le module de compressibilité et sa dérivée sont déterminés par un ajustement de l'énergie totale obtenue $E_{Total}(V)$ en utilisant l'équation d'état de Birch, qui est donnée par l'équation (III.1). La constante d'équilibre du réseau est donnée par le minimum de la courbe $E(v)$, le module de compressibilité est déterminé par l'équation(III.3) et sa dérivée par l'asymétrie de la courbe $E(V)$. Les figures III.6, III.7 et représentent la variation d'énergie totale en fonction du paramètre du réseau pour $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ pour les deux configurations SL(1,1), SL(2,2).



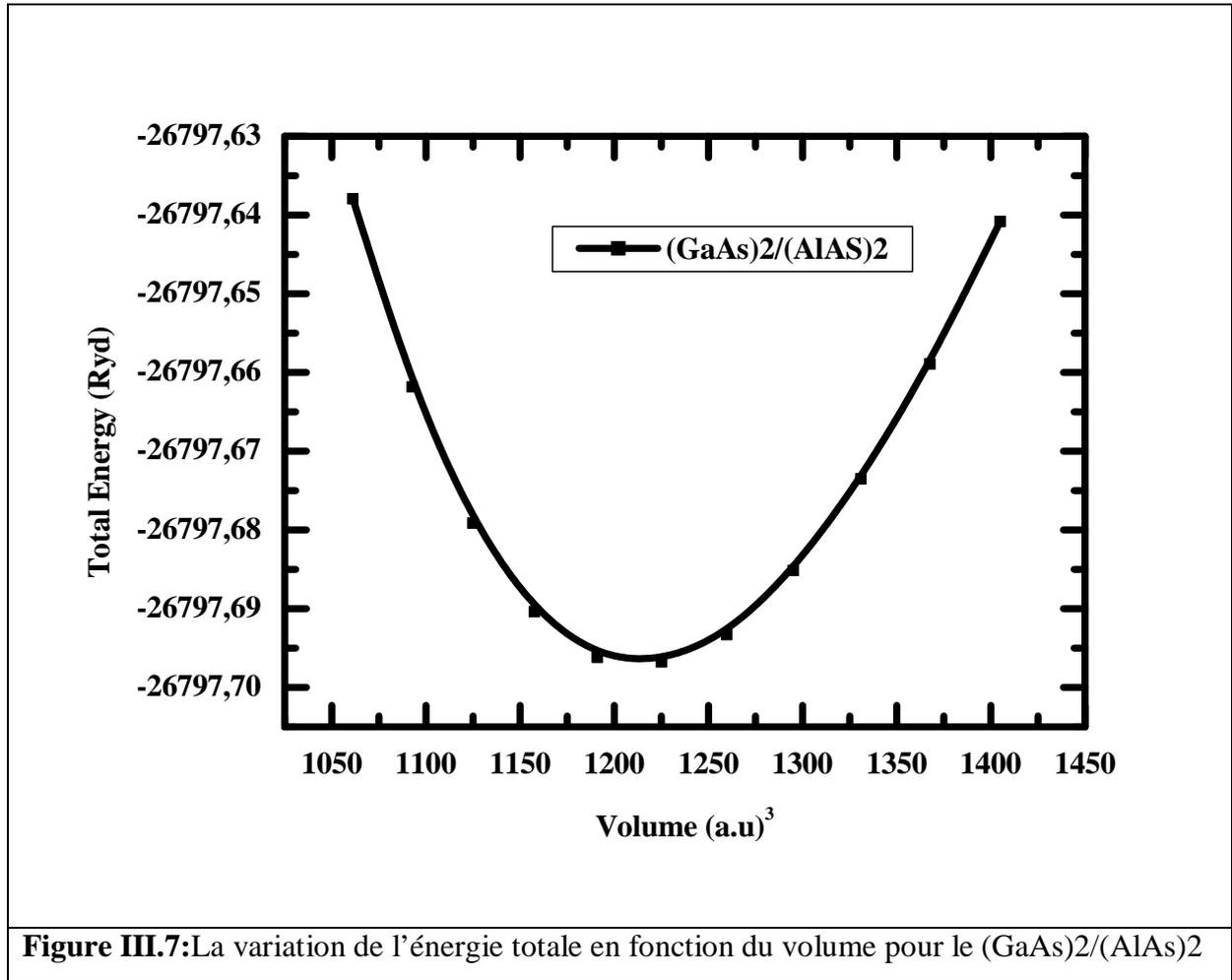


Figure III.7: La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le (GaAs)₂/(AlAs)₂

Le tableau III.5 montrent les résultats structuraux obtenus pour nos super-réseaux (GaAs)_n/(AlAs)_n pour les deux configurations ($n = 1, 2$).

Composés	a_0 (u. a)	B_0 (GPa)	B'_0
(GaAs) ₁ /(AlAs) ₁	10.66	71.45	4.41341
(GaAs) ₂ /(AlAs) ₂	21.33	71.45	4.49816

Tableau III.5 : Le paramètre du réseau a , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B'_0 des deux configurations (1, 1), (2, 2) du GaAs/AlAs .

Nous constatons d'après le tableau **III.5** , que nous avons trouvé les paramètres de super-réseaux, le paramètre $a_{2,2}$ est deux fois plus grand que $a_{1,1}$, et que le module de compressibilité augmente avec le nombre de monocouche impliquant que le SLs(2, 2) est plus dur que les SLs(1, 1).

III.3.2. Propriétés électroniques :

III.3.2.1. Structures de bande :

Les structures de bandes sont illustrées sur les figures (**III.8**, **III.9**) pour les super-réseaux SL(1,1), SL(2,2), respectivement.

D'après la figures (**III.8**) , nous pouvons voir clairement le comportement semiconducteur à gap direct de super-réseaux SL(1,1), Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction est situé au point Γ .

La valeur du gap direct est, $E_g = 0.969034$ eV pour SL(1,1).

Pour le cas du SL(2,2), le gap est trouvé indirect, Le maximum de la bande de valence est situé au point Δ situé entre Γ et R et le minimum de la bande de conduction est situé au Γ .

La valeur du gap indirect est, $E_g(\Delta-\Gamma) = 0.22$ pour SL(2,2).

Les valeurs des énergies de bandes calculées des deux configurations sont récapitulées dans le Tableau (**III.6**), Tableau(**III.7**).

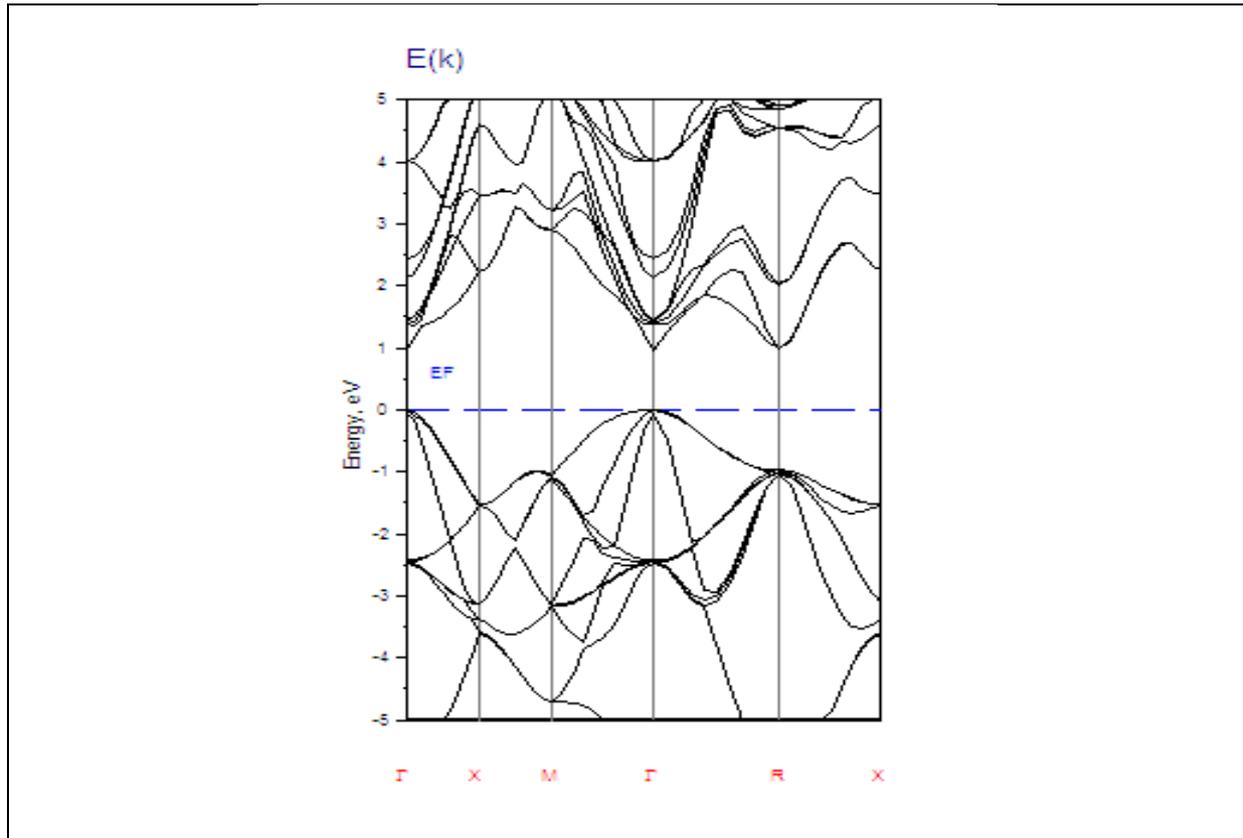


Figure III.8 : Structure de bande du super-réseau $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ le long des directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin.

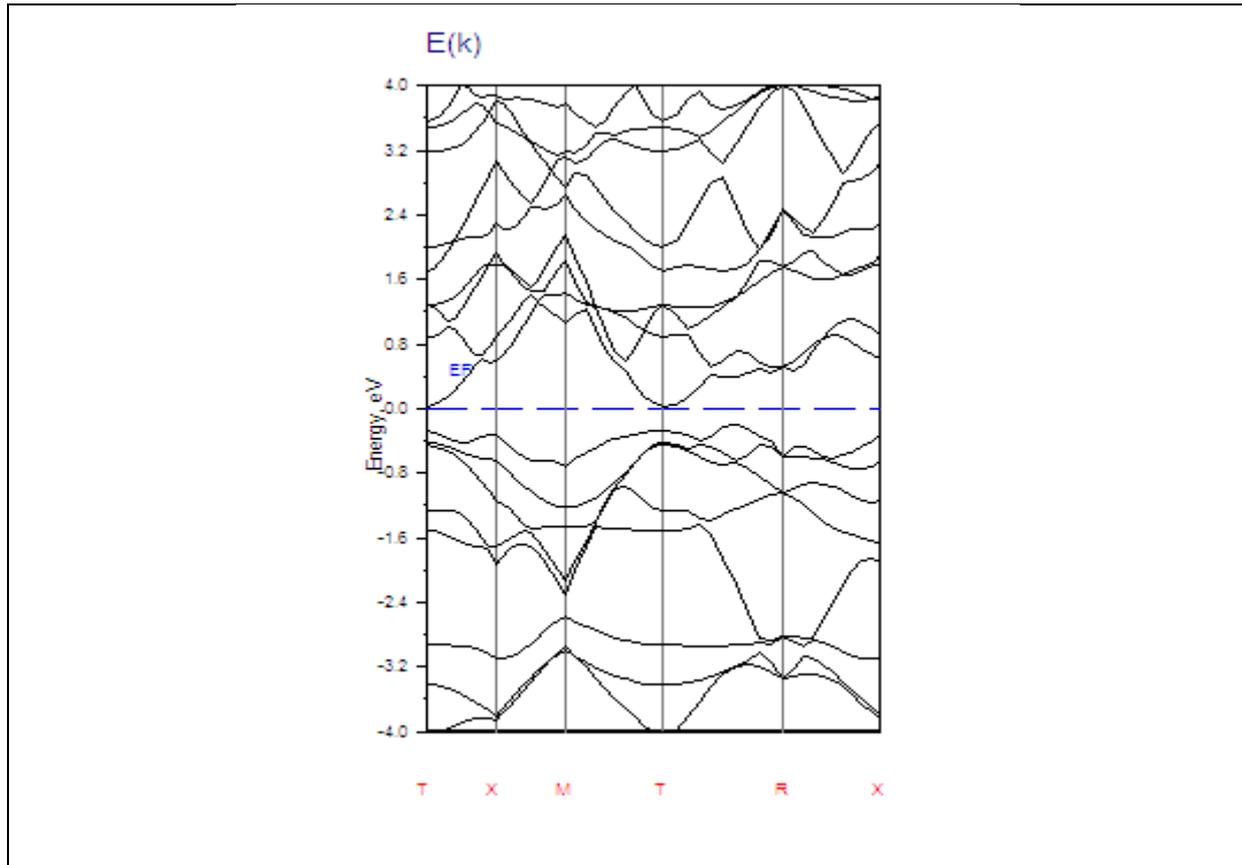


Figure III.9 : Structure de bande du super-réseau $(GaAs)_2/(AlAs)_2$ le long des directions de hautes symétrie dans la zone de Brillouin.

Les énergies de bandes calculées des deux configurations du super-réseau $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ sont récapitulées dans le Tableau III.6.

	$E_g(\Gamma-\Gamma)$ (ev)
$(GaAs)_1/(AlAs)_1$	0.969034

Tableau III.6 : L'énergie de bande de configuration (1, 1), du super-réseau $(GaAs)_n/(AlAs)_n$.

	$E_g(\Gamma-\Gamma)$ (ev)	$E_g(\Delta-\Gamma)$ (ev)
$(GaAs)_2/(AlAs)_2$	0.31	0.22

Tableau III.7 :L' énergie de bande de configuration (2, 2), du super-réseau $(GaAs)_n/(AlAs)_n$.

Pour la comparaison, on a pas trouvé d'autre travaux ni théoriques ni expérimentales dans ce sens. alors on peut considérer notre étude comme une prédiction théorique pour des futurs travaux.

Conclusion générale:

Nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des composés à base de l'arséniure GaAs et AlAs de la famille des semi-conducteurs III-V. Nous avons utilisé la méthode FP-LMTO basée sur la théorie DFT. pour étudier les propriétés structurales et électroniques des super-réseaux $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ pour les deux configurations ($n = 1, 2$). Ces nouvelles structures présentent des propriétés électroniques différentes de celles des matériaux massifs qui les constituent et sont exploitées avec succès dans la technologie moderne.

Nous avons obtenu dans les deux binaires GaAs, AlAs les valeurs des paramètres de réseau d'équilibre et des modules de compressibilité en bon accord avec les autres résultats. Nous avons conclu que ces binaires sont des matériaux semi-conducteurs à gap indirect et gap direct.

Dans les super-réseaux, si on commence par les propriétés structurales, on trouve que le paramètre $a_{2,2}$ est deux fois plus grand que $a_{1,1}$ Pour les propriétés électroniques, on a obtenu un gap direct pour la configuration (1,1) et gap indirect pour la configuration(2,2).

Nous avons trouvé après notre présent travail de super-réseau (1-1) la fréquence égale $2,3420761 \cdot 10^{14}$ HZ et la longueur d'onde égale $1,28 \cdot 10^{-6}$ m. donc nous avons conclu le spectre de super-réseau (1-1) situé dans la région d'infrarouge. Le super-réseau (1-1) possède une grande importance pour l'optoélectronique.

Cette étude du premier principe fait partie des grands efforts théoriques pour explorer les différentes propriétés physiques de super-réseau $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ et sera certainement très utile pour l'interprétation des futures données expérimentales.

الخلاصة

بواسطة طريقة (FP-LMTO) والتي تركز على نظرية كثافة الدالة (DFT) قمنا بحساب الخواص البنيوية و الالكترونية للمواد ذات الشبكة الممتازة (الهيكل ذات الآبار الطاقوية المكممة) $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ وللتكوينات الثنائية ($n = 1, 2$) وقد استعملنا تقريب (LDA) كما قمنا بمناقشة و بمقارنة النتائج المحصل عليها مع النتائج النظرية الأخرى ومن بين النتائج المهمة التي تحصلنا عليها هي أن : طول الشبكة التناظرية $a_{2,2}$ أكبر مرتين من $a_{1,1}$ في كلتا الشبكتين ; الشبكة الممتازة $GaAs/AlAs$ لها عصابة طاقوية ممانعة غير مباشرة (gap indirect) في التكوينيتين ($n = 2$) و عصابة طاقوية ممانعة مباشرة (gap direct) في التكوينة ($n = 1$) وتجدر الإشارة إلى أن العصابة الطاقوية الممانعة المباشرة في التكوينة $GaAs/AlAs$ لها أهمية كبيرة لعمليات الانتقال الضوئية ويمكن أن تكون مفيدة لتصميم الليزر ذو الآبار الطاقوية المكممة.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés : structurales et électroniques des super-réseaux $(GaAs)_n/(AlAs)_n$ pour les deux configurations ($n = 1, 2$) dans la phase zinc-blende, en utilisant la méthode linéaire des orbitales muffin-tin (FP-LMTO) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Parmi les principaux résultats trouvés, nous avons le paramètre $a_{2,2}$ qui est deux fois plus grand que $a_{1,1}$ pour le super-réseaux. La nature directe de gap pour seulement $n = 1$ et indirecte de gap pour seulement $n = 2$. On peut souligner que le caractère du gap direct du super-réseau $(GaAs)_1/(AlAs)_1$ a une grande importance pour les transitions optiques et pourrait être utile pour la conception des lasers à puits quantique.

Abstract

An accurate *ab initio* full-potential linear muffin-tin orbital method has been used to investigate the structural, electronic properties of $(\mathbf{GaAs})_n/(\mathbf{AlAs})_n$ superlattices (SLs) for the two configurations ($n = 1, 2$) in zinc-blende phase. The exchange-correlation potential is treated with the local density approximation (LDA). Among the main results found: that the parameter $a_{2,2}$ is twice larger than $a_{1,1}$, and three times greater than $a_{1,1}$ for the superlattice; the nature of indirect gap to just for $n = 2$ and direct gap behavior when $n = 1$ for $(\mathbf{GaAs})_n/(\mathbf{AlAs})_n$ superlattice; It may be noted that the character of the band gap of the $(\mathbf{GaAs})_1/(\mathbf{AlAs})_1$ superlattice is of great importance for optical transitions and could be useful for the design of quantum well lasers.

Références :

- [1] I. Esaki et al. *IB M J. Res. Dev.* 14,61,1970.
- [2] G. C. Osbourn. *J. Vacuum Sci. Technol. B*, 1:379, 1983.
- [3] *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*, edited by L. L. Chang and K. Ploog (Nijhoff, Dordrecht, 1985).
- [4] T. P. Pearsall, J. Bevk, L. C. Feldman, J. M. Bonar, J. P. Mannaerts, and A. Ourmazd. *Phys. Rev. Lett.*, 58:729, 1987.
- [5] *Interfaces, Quantum Wells, and Superlattices*, edited by C. R. Leavens and R. Taylor (Plenum, New York, 1988).
- [6] *Band Structure Engineering in Semiconductor Microstructures* edited by R. A. Abram and M. Jaros (Plenum, New York, 1989).
- [7] Dimitri Galayko. unité d'enseignement Elec.info, 2005.
- [8] J. Bardeen and W. H. Brattain *phys. Rev.* 74,230(1948).
- [9] Dimitri Galayko «Introduction des composants à semi conducteur», cours ; 2005; Unité enseignement Elec -info pour master ACSI à l'UPMC
- [10] R. Castagne, J. P. Duchemin, M. Gloanec, Ch. Rumelhard, *Circuits Intégrés en Arseniure de Gallium*, collection technique et scientifique des télécommunications, Masson, 1989.
- [11] J. L. Pankove, *Optical processes in semiconductors*, Dover publications Inc, 1971.
- [12] I. Esaki et al. *IB M J. Res. Dev.* 14,61,1970.
- [13] R. Dingle, H. L. Stormer, A. C. Gossard et W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 33,655,1978.
- [14] B. Mombelli, *Processus optique dans les solides*, P. 62.65, MASSON, 1995.
- [15] J. L. Pankove, *Optical processes in semiconductors*, Dover publications Inc, 1971.
- [16] Frédéric Fossard «Spectroscopie infrarouge des fils et boîtes quantiques d'InAs/InAlAs/InP(001) », thèse présentée pour obtenir le grade de docteur en science physique ; 2002 ; université Paris XII Orsay.
- [17] D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, *Quantum Dots Hetero-structures* (Ed. John Wiley et Sons Chichester, 1999).
- [18] J. L. Pankove, « *Optical processes in semiconductors* », Dover publications Inc. (1971).
- [19] Perdew, J. P. Constantin, L. A. Sagvolden, E. Burke, K. *Phys. Rev. Lett.* **97**
(2006) 223002.

- [20] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, K. Burke, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 136406.
- [21] M. Born, J.R. Oppenheimer, Ann. Phys. 87, 457 (1927).
- [22] D. R. Hartree, Proc. Cambridge. Phil. Soc. 24:89, 111, 426 (1928).
- [23] V. Fock, Z.Phys. 61, 126 (1930); 62, 795 (1930).
- [24] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 864, 136 (1964).
- [25] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A 1133 (1965).
- [26] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 33(1986) 8822.
- [27] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77(1996) 3865.
- [28] J. P. Perdew, S. Kurth, A. Zupan, P. Blaha, Phys. Rev. Lett. 82(1999) 2544.
- [29] E. Engel and S. H. Vosco, Phys. Rev. B 42(1990) 4940.
- [30] E. Engel and S. H. Vosco, Phys. Rev. B 47(1993) 13164.
- [31] E. Engel and S. H. Vosco, Phys. Rev. B 50(1994) 10498.
- [32] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136, 864 (1964).
- [33] M. Methfessel, Phys. Rev. B 38, 1537 (1988).
- [34] Francis Levy. Traité des matériaux (18). Physique et technologie des semiconducteurs. Presses polytechniques et universitaires Romandes(1995)
- [35] F. Birch, J. Geophys. Res. 83, 1257 (1978).
- [36] Lee, S., Kang, J., and Kang, M., 1997, "Structural Properties of Semiconductors in the Generalized Gradient Approximation, Journal of the Korean Physical Society, Vol. 31, pp 811-814.
- [37] Remediakis, I. N., and Kaxiras, E., 1999, "Band-structure calculations for semiconductors within generalized-density-functional theory", Phys. Rev. B Vol. 59, pp 5536 -5543.
- [38] R. Ahmed, S. Javad, Hashemifar, H. Akbarzadeh, M. Ahmed and F. Aleem, "A Density-Functional Theory Study of Structural and Electronic Properties of III-As- selenide Binary Compounds," *Computational Materials Science*, Vol. 39, No. 3, 2007, pp. 580-586. doi:10.1016/j.commatsci.2006.08.014
- [39] S. Adachi, "Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors," John Wiley & Sons, England, 2005. doi:10.1002/0470090340.ch3

[40] Remediakis and Kaxiras, 1999

[40] B. Monemar, Phys. Rev. B **8**, 5711 (1973)