

REPUBLICQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

*Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj*

*Faculté des Sciences et de la technologie*

*Département d'Electronique*

# *Mémoire*

*Présenté pour obtenir*

LE DIPLOME DE MASTER

**FILIERE : ELECTRONIQUE OU TELECOMMUNICATION**

**Spécialité : microélectronique**

Par

- **BENGUEDOUAD LOUNIS**
- **FADACHE TOUFIK**

*Intitulé*

***Étude des propriétés structurales, optiques et électroniques du  
semiconducteur ScP***

*Évalué le : 07/09/2021*

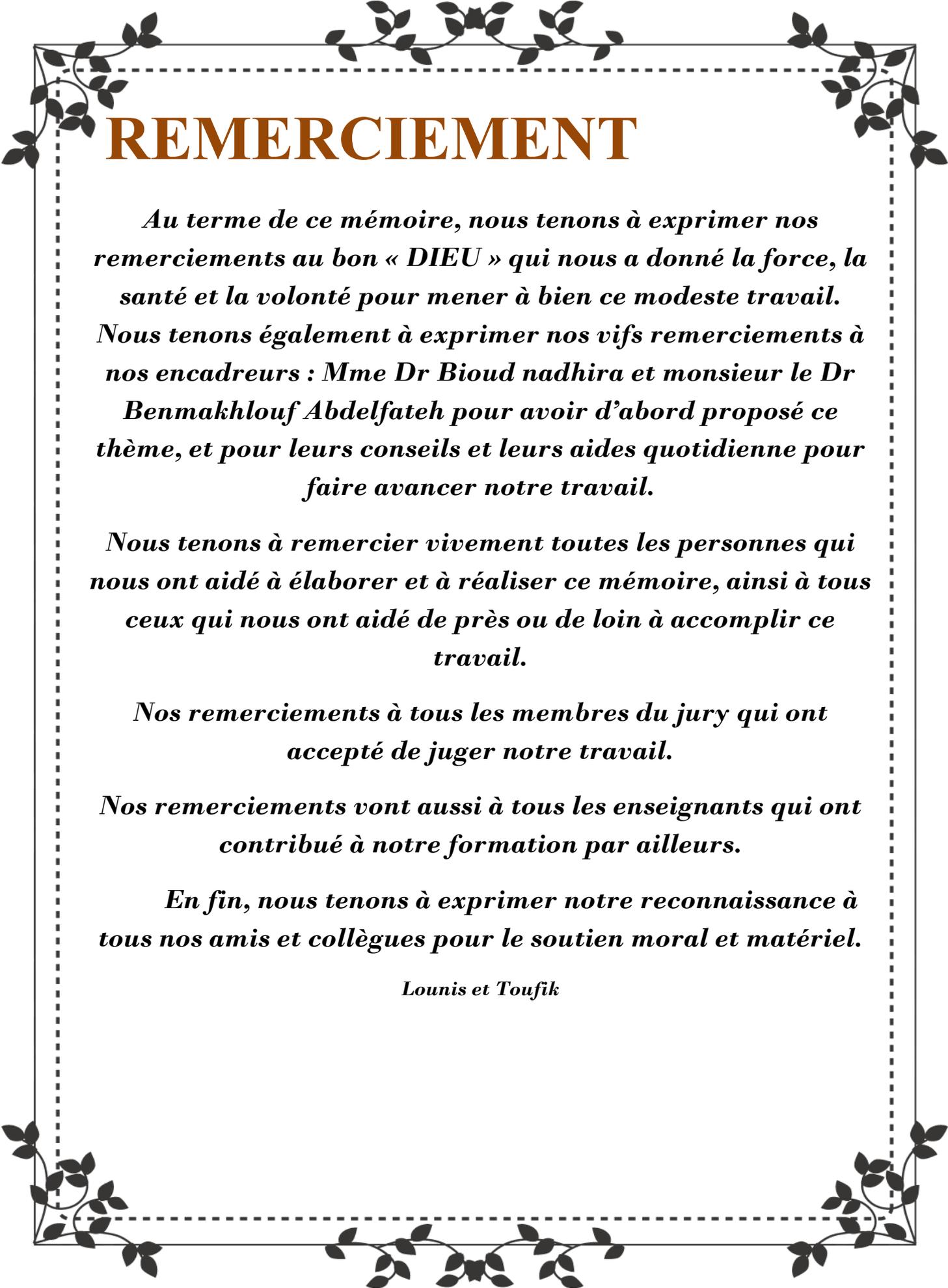
*Par la commission d'évaluation composée de\* :*

<i>Nom &amp; Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
<i>FARES Fahima</i>	<i>MCB</i>	<i>Président</i>	<i>Université de Bordj Bou Arréidj</i>
<i>BIOUD Nadhira</i>	<i>MCA</i>	<i>Rapporteur</i>	<i>Université de Bordj Bou Arréidj</i>
<i>BENMAKHOUF Abdelfateh</i>	<i>Dr</i>	<i>Co- Rapporteur</i>	<i>Université de Bordj Bou Arréidj</i>
<i>DIB Lyes</i>	<i>MCB</i>	<i>Examineur</i>	<i>Université de Bordj Bou Arréidj</i>

*Année Universitaire 2020/2021*

\* Conformément à :

- L'arrêté n°055 du 21 janvier 2021 Fixant dispositions exceptionnelles autorisées en matière d'organisation et gestion pédagogique, de l'évaluation et de la progression des étudiants, durant la période COVID-19 au titre de l'année universitaire 2020-2021 ;
- Procès-verbal de la réunion de l'équipe du domaine des Sciences et Technologies du mois de Mai 2021.



# REMERCIEMENT

*Au terme de ce mémoire, nous tenons à exprimer nos remerciements au bon « DIEU » qui nous a donné la force, la santé et la volonté pour mener à bien ce modeste travail. Nous tenons également à exprimer nos vifs remerciements à nos encadreurs : Mme Dr Bioud nadhira et monsieur le Dr Benmakhlouf Abdelfateh pour avoir d'abord proposé ce thème, et pour leurs conseils et leurs aides quotidiennes pour faire avancer notre travail.*

*Nous tenons à remercier vivement toutes les personnes qui nous ont aidé à élaborer et à réaliser ce mémoire, ainsi à tous ceux qui nous ont aidé de près ou de loin à accomplir ce travail.*

*Nos remerciements à tous les membres du jury qui ont accepté de juger notre travail.*

*Nos remerciements vont aussi à tous les enseignants qui ont contribué à notre formation par ailleurs.*

*En fin, nous tenons à exprimer notre reconnaissance à tous nos amis et collègues pour le soutien moral et matériel.*

*Lounis et Toufik*



# DEDICACE

*C'est avec un immense plaisir que je dédie ce modeste travail à :*

*Mes très chers parents*

*Aux supports de mon âme, vous mes très chers frères : Islam.*

*Et ma sœur : Khaoula.*

*Et à mes amies : Yahia, Fateh Mounir et tous mes Amies*

*Et c'est sûr le groupe de microélectronique master 2 : Chamsou.*

*Et tout le groupe microélectronique.*

*Et toute ma Famille*

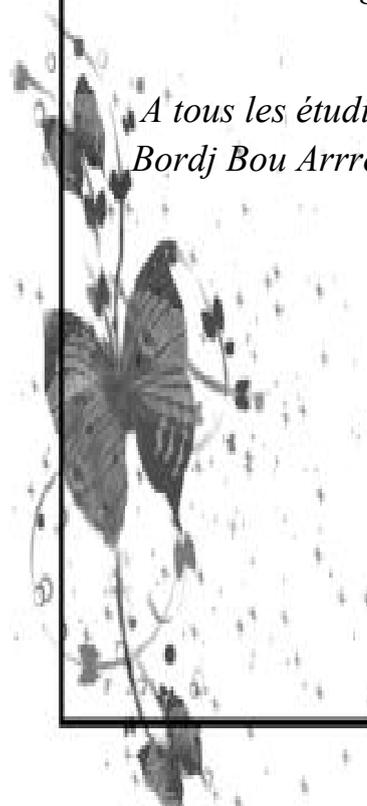
*Et bien sûr à mes amies Okba, Walid et Abdennoure qui m'accompagné pendant le long de cette période pour réaliser ce modeste travail.*

*A Tous les enseignants qui m'ont aidé de proche ou de loin pour être un jour en master en électronique.*

*A tous les étudiants de microélectronique et d'électronique de l'université de Bordj Bou Arrridj et surtout les étudiants de deuxième Année Master promo 2021 /2022.*

*Je vous remercie tous*

*Lounis*





# DEDICACE

*C'est avec un immense plaisir que je dédie ce modeste travail à :*

*Mes très chers parents*

*Aux supports de mon âme, vous mes très chers frères : Ahmed, Yacine.*

*Et ma sœur : Samia, siham.*

*Et à mes amies : Aymen, Mahdi, Ali et tous mes Amies*

*Et c'est sur le groupe de microélectronique master 2 : Chamsou.*

*Et tout le groupe microélectronique.*

*Et toute ma Famille*

*Et bien sûr à mon Manel qui m'accompagné pendant le long de cette période  
pour réaliser ce modeste travail.*

*A Tous les enseignants qui m'ont aidé de proche ou de loin pour être un jour en  
master en électronique.*

*A tous les étudiants de microélectronique et d'électronique de l'université de  
Bordj Bou Arréridj et surtout les étudiants de deuxième Année Master promo  
2021 /2022.*

*Je vous remercie tous*

*Toufik*



# TABLE DES MATIERES

---

## Table des matières

Liste des abréviations

Table des illustrations

Introduction générale ..... 1

## Chapitre I : Aperçu théorique

I.1. Introduction..... 3

I.2. Généralités sur les semiconducteurs ..... 3

I.2.1. Définition d'un semiconducteur..... 3

I.2.2. Différent types de semiconducteurs ..... 4

a) Semi-conducteurs purs ou intrinsèques..... 4

b) semi-conducteurs dopés ou extrinsèques : ..... 5

I.2.3. Gap direct et indirect..... 9

a. Gap direct ..... 9

b. Gap indirect..... 9

I.3. Propriétés structurales et électriques des semiconducteurs..... 9

a) Structure cristalline ..... 9

b) Relation constante de maille et bande interdite ..... 11

I.4. Propriétés Optiques..... 12

I.5. Théories de la fonctionnelle de la densité (DFT)..... 14

I.5.1. Théorèmes de Hohenberg-Kohn ..... 15

I.5.2. Fonctionnelle d'échange-corrélation..... 16

a. Approximation de la densité locale (LDA) ..... 16

b. Approximation du gradient généralisé (GGA)..... 17

I.5 Conclusion ..... 17

I.6 Bibliographie ..... 19

## Chapitre II : Résultats et discussion

# TABLE DES MATIERES

---

II.1 Introduction .....	20
II.2 Propriétés structurales.....	22
II.2.1 Propriétés structurales du ScP à la pression nulle .....	22
II.2.2 Effets de la pression sur les propriétés structurales du ScP .....	25
II.3. Propriétés optiques .....	29
II.3.1 Fonction diélectrique .....	29
II.3.2 Coefficient d'absorption optique .....	30
II.3.3 Conduction Optique.....	31
II.3.4 Fonction de perte d'énergie des électrons .....	33
II.3.5 Indices de réfraction .....	34
II.3.6 Réflectivité Optique.....	35
II.4 Structures de bandes électroniques.....	36
II.6 Bibliographie .....	38
Conclusion générale .....	40
Résumé	
Abstract	

ملخص

## ABREVIATIONS LES PLUS UTILISEES

---

### Liste des abréviations

**DFT** Théorie de la fonctionnelle de la densité (*Density Fonctionnel Theory*)

**LDA** Approximation de la densité locale (*Local Density Approximation*)

**GGA** Approximation du gradient généralisé

**PP** Pseudo potentiel (*Pseudo-potentiel*)

**US-PP** Pseudo potentiels ultradoux (Ultra soft pseudo potentiel)

**PW** Onde plane (Plane Waves)

**ZB** Zone de Brillouin (*Brillouin zone*)

**nkpt** Nombre de points  $k$  (*Numbers of  $k$  points*)

**EF** Energie de Fermi (*Fermi Energy*)

**Eg** Energy de gap

$\sigma$  Contrainte (*stress*)

**B<sub>0</sub>** Module de compressibilité (*Bulk modules*)

**B'<sub>0</sub>** Dérivée par rapport à la pression du module de compressibilité

$\mu$  Coefficient de Poisson (*Poisson coefficient*)

# Table des illustrations

---

## Table des illustrations

### Liste des figures

<b>Figure I.1 :</b> (a) Atome de Silicium (b) Cristal de Silicium .....	4
<b>Figure I.2 :</b> Silicium dopé au phosphore (a) à $T = 0$ K et, (b) à $T \neq 0$ K. ....	6
<b>Figure I.3 :</b> La représentation simplifiée d'un semi-conducteur type N .....	7
<b>Figure I.4 :</b> La représentation simplifiée d'un semi-conducteur type P.....	8
<b>Figure I.5 :</b> Silicium dopé au Bore (a) à $T = 0$ K et, à (b) $T \neq 0$ K. ....	8
<b>Figure I.6 :</b> Niveau d'énergie (a) pour un dopage de type N, et (b) pour un dopage de Type P .....	8
<b>Figure I.7 :</b> (a) semiconducteur à gap direct, (b) semiconducteur à gap indirect [5]. ....	9
<b>Figure I.8 :</b> structure Zinc-Blende (ZB).....	10
<b>Figure I.9 :</b> Première zone de Brillouin de la structure zinc blende (B3). ....	10
<b>Figure I.10 :</b> Structure Wurtzite (B4).....	10
<b>Figure I.11 :</b> structure Rock Salt (NaCl ou B1). ....	11
<b>Figure I.12 :</b> Energie de la bande interdite de plusieurs familles de semi-conducteurs en fonction de la constante de maille [4]. ....	12
<b>Figure I.13 :</b> Transitions optiques directe et indirecte [6]. ....	13
<b>Figure I.14 :</b> Différents phénomènes se produisant durant l'interaction lumière [8]. ....	14
<b>Figure II.1 :</b> Maille élémentaire du composé ScP en phase cubique rocksalt.....	22
<b>Figure II.2 :</b> Variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille.....	23
<b>Figure II.3 :</b> Volume relatif ( $V/V_0$ ) en fonction de la pression appliquée pour le ScP. ....	26
<b>Figure II.4 :</b> Volume relatif ( $V/V_0$ ) en fonction de la pression appliquée pour le ScP. ....	27
<b>Figure II.5</b> Variations de la densité cristalline en fonction de ( $a/a_0$ ) du ScP.....	28
<b>Figure II.6 :</b> Parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique du ScP à une pression nulle et une pression de 100 GPa. ....	30

## Table des illustrations

---

<b>Figure II.7 :</b> Spectres du coefficient d'absorption optique du ScP à P = 0 et P = 100 GPa.....	31
<b>Figure II.8 :</b> Conduction optique du ScP à P = 0 GPa et sous une pression de 100 GPa.....	32
<b>Figure II.9 :</b> Fonction de perte d'énergie des électrons du ScP à une pression nulle et sous une pression de 100 GPa.....	33
<b>Figure II.10 :</b> Indice de réfraction (n) du ScP pour des pressions nulle et 100 GPa.....	34
<b>Figure II.11 :</b> Spectres de réflectivité du ScP à P = 0 et P = 100 GPa .....	35
<b>Figure II.12 :</b> Structure de bandes du composé ScP à P= 0 et sous une pression de 100GPa.....	37

## List des tableaux

<b>Tableau II. 1 :</b> Constante de réseau $a_0$ ( $a_0 = \sqrt[3]{V_0}$ ), volume de la maille ( $V_0$ ), Energie totale ( $E_0$ ), module de rigidité $B_0$ et sa dérivée ( $[B'_0]$ ) du ScP en comparaison avec les valeurs expérimentales (Exp) [11] et autres valeurs théoriques (Théo) [10, 12-16].....	24
<b>Tableau II. 2 :</b> Valeurs de $(a/a_0)$ , et de la densité cristalline $g$ du semiconducteur ScP.....	28

# **INTRODUCTION GENERALE**

# INTRODUCTION GENERALE

---

## Introduction générale

La science et la technologie jouent un rôle indispensable dans notre environnement. Les différentes méthodologies utilisées, et les différentes connaissances générées se traduisent par une multitude d'applications omniprésentes dans notre vie quotidienne.

Parmi les domaines scientifiques et technologiques qui ont connu un grand développement ces dernières années, on trouve le domaine de la physique des semiconducteurs.

Dans la plupart des domaines de la technologie moderne, les améliorations apportées dans le rendement et la rentabilité des systèmes sont souvent limitées par les propriétés des matériaux disponibles. Ceux-ci sont à la base de toutes les fonctions électroniques et font apparaître de nouvelles technologies, permet d'envisager de les utiliser d'une manière plus judicieuse, sachant que tout progrès technologique et industriel, est étroitement lié au développement des matériaux. Grâce à l'utilisation des méthodes de premiers principes dites « ab-initio » (qui signifie du tout début), les physiciens peuvent prédire de nouveaux matériaux ou alliages dont les propriétés sont importantes. Ces méthodes de simulation numérique constituent un moyen d'accès à la compréhension des systèmes physiques. L'avantage de ces méthodes se situe dans le fait qu'elles n'exigent aucune connaissance expérimentale pour effectuer de tels calculs et la plupart de ces méthodes subissent des mises à jour continues qui s'adaptent à la rapidité et à la capacité de mémoire des calculateurs. Ces méthodes de calcul sont un outil très puissant pour la prédiction et l'étude de nouveaux matériaux. Elles sont basées sur la théorie de la fonctionnelle de densité DFT dont l'idée principale consiste à montrer que l'énergie totale d'un système de  $N$  électrons en interaction, soumis à un potentiel extérieur, peut s'écrire comme une fonctionnelle  $F[n]$  de la densité. La DFT est utilisée généralement pour calculer la structure électronique des systèmes complexes contenant

# INTRODUCTION GENERALE

---

plusieurs atomes tels que les molécules ou les solides. Elle est basée sur la densité d'électrons plutôt que sur la fonction d'onde. Alors dans notre mémoire est divisée en deux grands chapitre :

Le premier est consacré aux rappels théoriques sur les semi-conducteurs ainsi que la théorie de la fonctionnelle et de la densité (DFT).

Alors que dans le deuxième chapitre nous avons représenté les résultats de nos calculs des différentes propriété (structurales, électronique et optique).

# **Chapitre I**

## **Aperçu théorique**

# Aperçu théorique

---

## I.1. Introduction

L'importante croissance des semi-conducteurs au niveau mondial est liée au fait que ces matériaux forment la base de la révolution technologique de ces quarante dernières années dans le domaine de l'électronique qui, au sens large représente le marché mondial le plus important à l'heure actuelle en même temps que celui qui bénéficie de la croissance la plus rapide. Les matériaux semiconducteurs interviennent principalement en microélectronique, dans les domaines radiofréquences et hyperfréquences ; applications militaires et spatiales ainsi qu'en optoélectronique.

La première partie de ce chapitre fournit une brève introduction sur semiconducteurs. On va donner un bref aperçu sur les propriétés et optiques électriques des semiconducteurs. Par la suite, dans deuxième partie, on va présenter la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

## I.2. Généralités sur les semiconducteurs

### I.2.1. Définition d'un semiconducteur

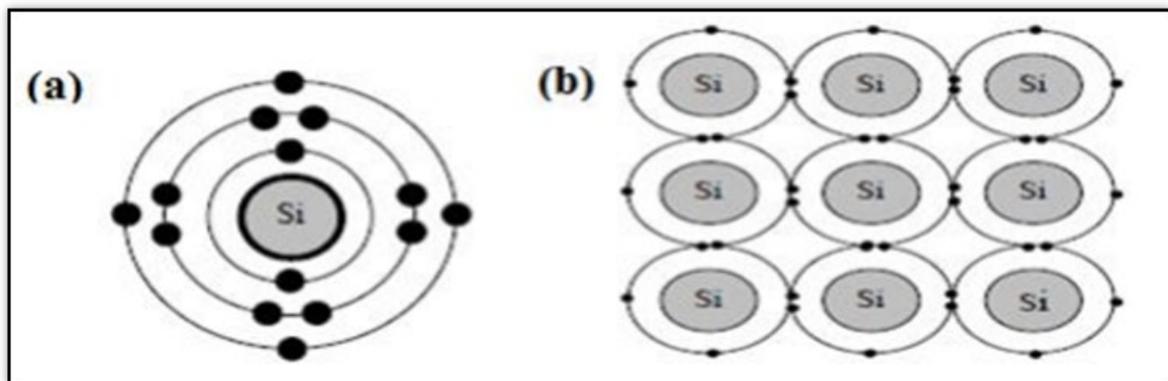
Les semiconducteurs sont des matériaux solides qui disposent de propriétés uniques : en effet, leur capacité à conduire l'électricité se situe entre celles des métaux et des isolants. La famille des cristaux de SC serait isolant s'il était pur et au zéro-absolu ( $T = -273^{\circ}\text{C}$ ) : or, la présence d'impuretés, l'agitation thermique ou encore certains défauts au sein de sa structure lui permet de devenir « conducteur ». La résistivité des semiconducteurs varie alors de  $10^{-3}$  à  $10^{+4} \Omega.\text{cm}$ . La présence des électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique entre les métaux (conducteurs) et les isolants (non conducteur). Un semiconducteur peut être soit intrinsèque (pur) ou extrinsèque (dopé par des impuretés).

# Aperçu théorique

## I.2.2. Différent types de semiconducteurs

### a) Semi-conducteurs purs ou intrinsèques

Un semi-conducteur dit intrinsèque est un matériau idéal qui ne possède ni défaut physique ni défaut chimique [1]. Le monocristal du silicium possède une structure de type tétraédrique c'est à dire que chaque atome est entouré symétriquement de 4 atomes [2]. Lorsque le corps est parfaitement pur, il est qualifié comme intrinsèque (Exemples : Silicium (Si), Germanium (Ge), Sélénium (Se)) Le Silicium est un atome tétravalent : Il possède 4 électrons de valence qui vont se mettre en commun avec d'autres atomes de Silicium pour avoir la forme cristalline (Figure I.04).



*Figure I.1 : (a) Atome de Silicium (b) Cristal de Silicium*

On qualifie le silicium comme intrinsèque lorsqu'il ne présente pas d'impuretés dopantes. Un tel silicium est en pratique impossible à obtenir. Dans un silicium intrinsèque, il existe autant de trous que d'électrons libres susceptibles de participer à la conduction, mais leur densité  $n_i$  est très faible à température ambiante si bien que la résistivité ( $\rho$ ) théorique du matériau est de  $3.2 \times 10^5 \Omega \cdot \text{cm}$ . La densité  $n_i$  s'exprime en fonction de densités d'états effectives de la bande de conduction ( $N_C$ ) et de la bande de valence ( $N_V$ ) ainsi que l'énergie de bande interdite  $E_g$  (1.12eV à 300 °K dans le Silicium) [2] :

## Aperçu théorique

---

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (I.1)$$

$N_c$  et  $N_v$  sont fonction de T et s'expriment:

$$N_c = 2 \times \frac{2\pi m_{de} K T^{3/2}}{h^2} \quad (I.2)$$

$$N_c = 5,4 \times 10^{15} \times T^{3/2} \text{cm}^{-3} \quad (I.3)$$

$$N_v = 2 \times \frac{2\pi m_{dh} K T^{3/2}}{h^2} \quad (I.4)$$

$$N_v = 3,5 \times 10^{15} \times T^{3/2} \text{cm}^{-3} \quad (I.5)$$

Dans ces expressions, h est la constante de Planck ( $6,63 \times 10^{-34} \text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$ ),  $m_{de}$  et  $m_{dh}$  sont les masses effectives d'un électron et d'un trou utilisées pour les calculs de densité d'état.  $m_{de}$  et  $m_{dh}$  valent respectivement  $1.08m_0$  et  $0.81m_0$ , où  $m_0$  est la masse de l'électron ( $9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$ ) [3].

### b) semi-conducteurs dopés ou extrinsèques :

#### ❖ Dopage des semi-conducteurs :

Le dopage est l'introduction dans un semi-conducteur intrinsèque de très faible quantité d'un corps étranger appelé dopeur. Pour les semi-conducteurs usuels (Si, Ge), les dopeurs utilisés sont :

\*soit des éléments pentavalents : ayant 5 électrons périphériques exemples : l'Arsenic (As), l'Antimoine (Sb), le Phosphore (P),

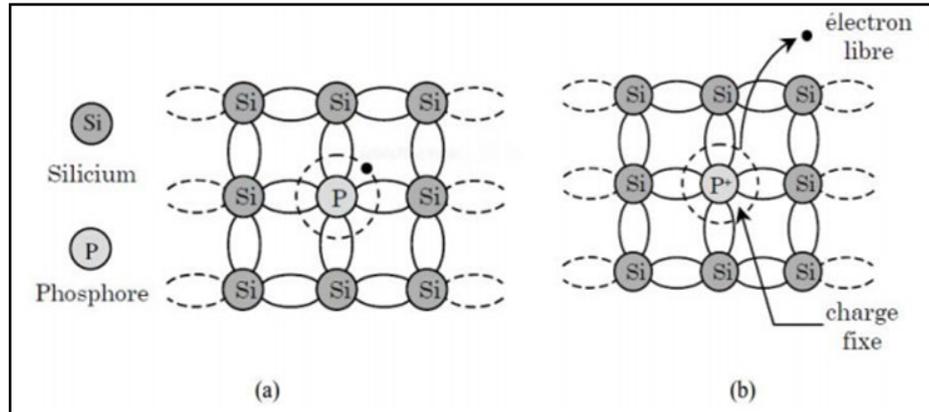
\*soit des éléments trivalents : ayant 3 électrons périphériques exemples : le Bore (B), le Gallium (Ga), l'Indium (In), ...

#### ❖ Semi-conducteur dopé N :

Un semi-conducteur de type N est un semi-conducteur intrinsèque, dans lequel on introduit des impuretés qui possèdent 5 électrons sur leur couche externe (Phosphore ou Arsenic...).

## Aperçu théorique

Les impuretés sont appelées des donneurs parce qu'elles donnent un électron à la bande de conduction. La Figure I.7 présente schématiquement des liaisons électroniques pour le silicium dopé avec du phosphore.



**Figure I.2 :** Silicium dopé au phosphore (a) à  $T=0\text{ K}$  et (b) à  $T \neq 0\text{ K}$ .

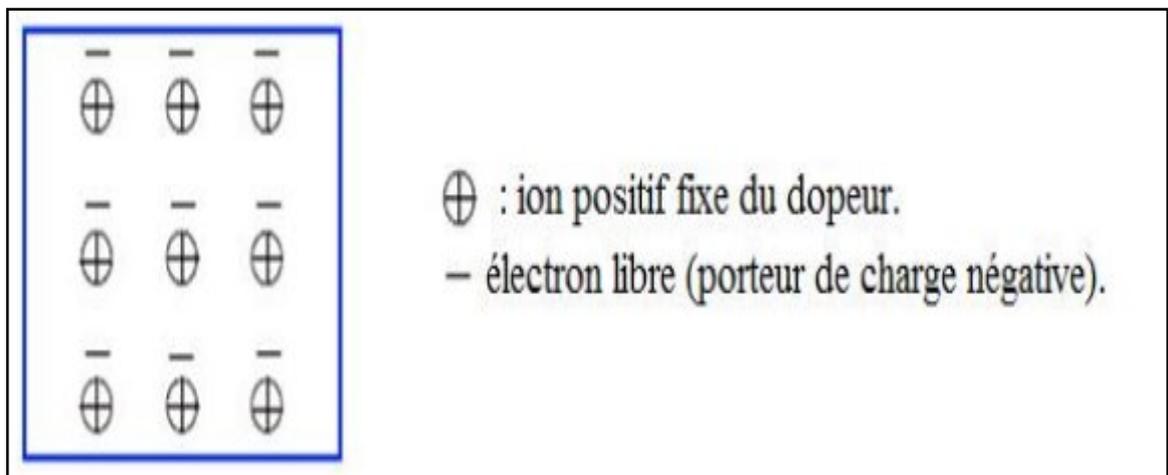
Quatre électrons d'atome de silicium voisins sont mis en commun avec quatre électrons de l'atome donneur. Le cinquième électron est faiblement lié à l'impureté. Une très faible énergie due à une température supérieure au zéro Kelvin est suffisante pour le libérer et le déplacer dans la bande de conduction pour qu'il se trouve libre [4-6]. L'atome de phosphore a perdu sa neutralité et est devenu un ion positif (charge fixe). Ainsi, il y a apparition d'un niveau d'énergie dans la bande interdite  $E_D$ , situé au-dessous de la bande de conduction (Figure I.7 (a)). À température ambiante, la quasi-totalité des atomes donneurs est ionisée. Si  $N_D$  correspond à la concentration des atomes donneurs, on obtient  $n = N_D$  électrons libres. Dans un semi-conducteur de type N, les électrons sont majoritaires, les trous sont minoritaires, et la conduction est assurée par les électrons.

## Aperçu théorique

---

### ❖ Semi-conducteur dopé P :

Un semi-conducteur de type P est un semi-conducteur intrinsèque, dans lequel on introduit des impuretés, qui possèdent trois électrons sur leur couche externe (Bore, Indium, ...). Ces impuretés sont appelées des accepteurs parce qu'elles acceptent un électron de la bande de conduction afin de réaliser une liaison avec le cristal semiconducteur. La Figure I.07 présente schématiquement des liaisons électroniques pour le semi-conducteur silicium dopé P par du Bore. L'atome dopant a perdu sa neutralité et est devenu alors un ion fixe négatif par capture d'un électron. Ce phénomène correspond à l'apparition d'un niveau d'énergie  $E_A$  dans la bande de gap, au-dessus de la bande de valence. La quasi-totalité des atomes accepteurs est ionisée à la température ambiante (Figure I.7 (b)). Si  $N_A$  correspond à la concentration des atomes accepteurs, donc on obtient  $p = N_A$  trous libres. Dans un semi-conducteur de type P, les trous sont les majoritaires, les électrons sont les minoritaires, et la conduction est assurée par les trous [1].



*Figure I.3 : La représentation simplifiée d'un semi-conducteur type N*

## Aperçu théorique

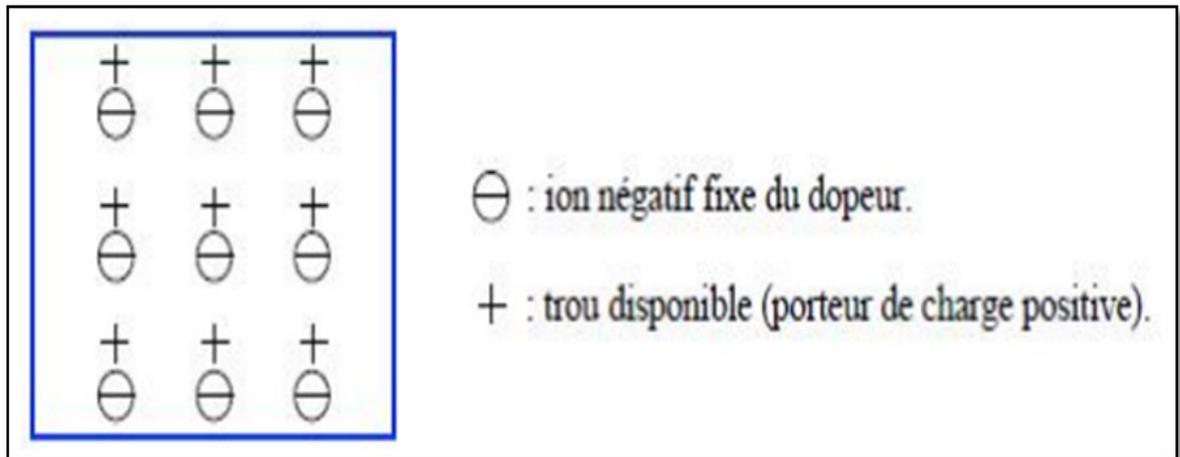


Figure I.4 : La représentation simplifiée d'un semi-conducteur type P.

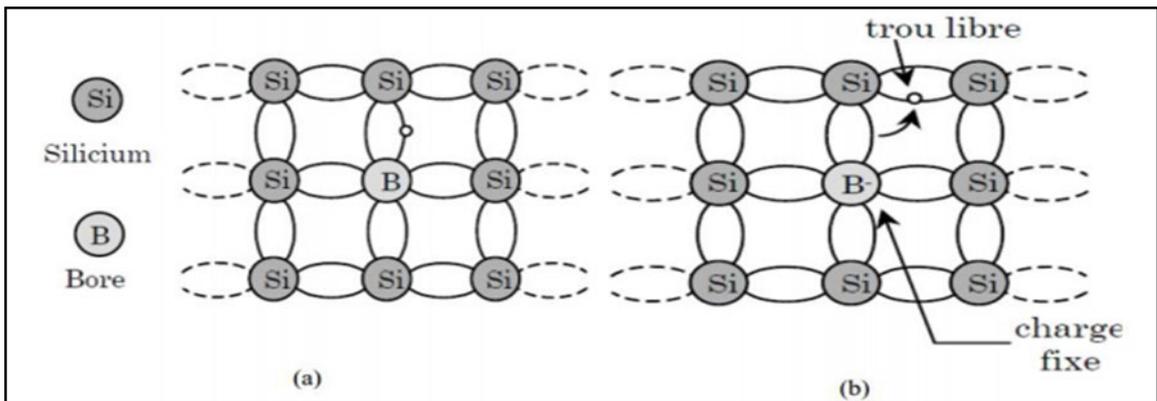


Figure I.5 : Silicium dopé au Bore (a) à  $T = 0\text{ K}$  et, à (b)  $T \neq 0\text{ K}$ .

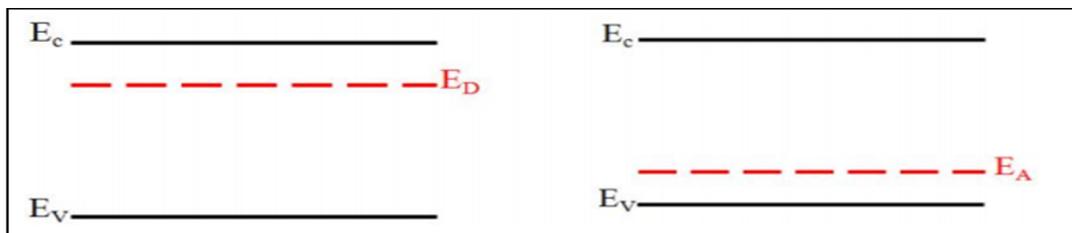


Figure I.6 : Niveau d'énergie (a) pour un dopage de type N, et (b) pour un dopage de Type P

# Aperçu théorique

## I.2.3. Gap direct et indirect

### a. Gap direct

Un semi-conducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde  $k$  voire la figure (I.12.a).

### b. Gap indirect

Un semi-conducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde  $k$  voire la figure (I. 12.b). La distinction entre les semi-conducteurs à gap direct et indirect est très importante notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [4].

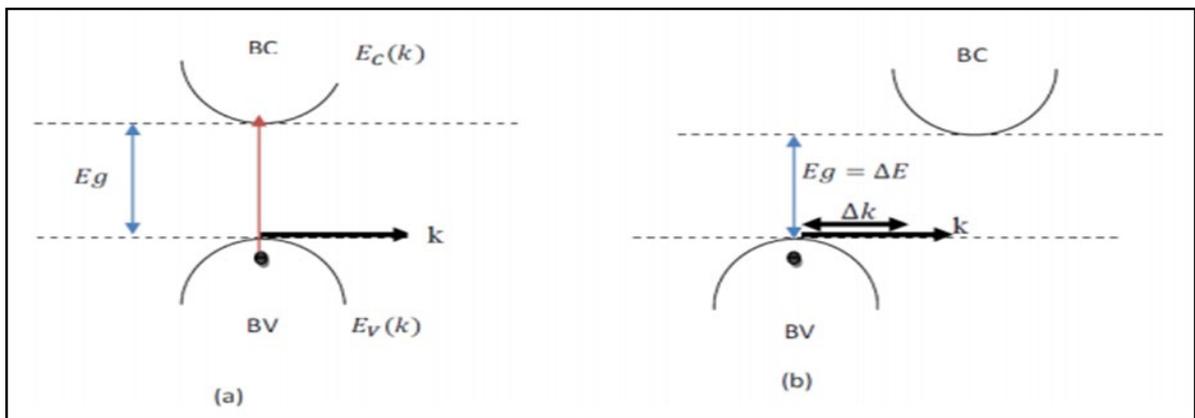


Figure I.7 : (a) semiconducteur à gap direct, (b) semiconducteur à gap indirect [5].

## I.3. Propriétés structurales et électriques des semiconducteurs

### a) Structure cristalline

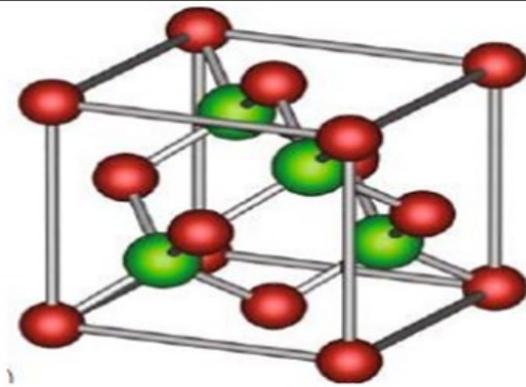
Les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines.

## Aperçu théorique

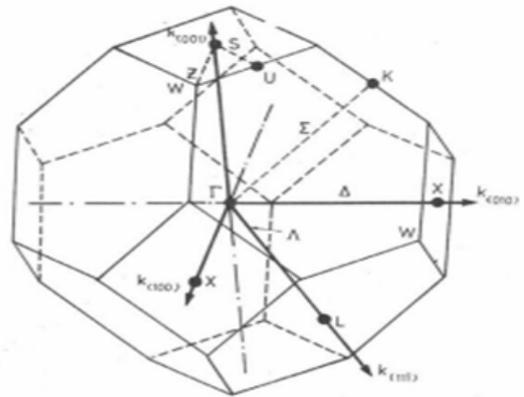
---

### \* Structure Zinc-blinde

La plupart des matériaux semi-conducteurs binaire III-V et quelques matériaux II-VI ont une structure Zinc-Blende (ZB) (Figure I.1). Cette structure est constituée de deux sous réseaux cubique faces centrée (cfc). La première zone de Brillouin pour la structure zinc-Blend à la forme d'un octaèdre tronqué (Figure I -2).



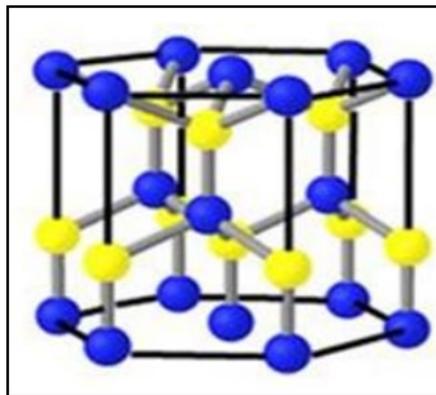
*Figure I.8 : structure Zinc-Blende (ZB).*



*Figure I.9 : Première zone de Brillouin de la structure zinc blende (B3).*

### \*\* Structure Wurtzite :

Quelques composés binaires des semiconducteurs II-VI tels que le ZnS se cristallisent dans la structure Wurtzite ou dite est hexagonale (Figure I.3).



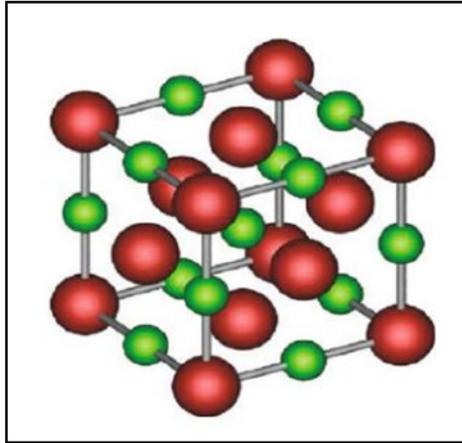
*Figure I.10 : Structure Wurtzite (B4).*

## Aperçu théorique

---

### \*\*\* Structure Rock-Salt :

Le Rock-Salt (RS) ou structure NaCl a une base diatomique, l'atome de Cl et l'atome de Na consiste un treillis de FCC (Figure I-4).



*Figure I.11 : structure Rock Salt (NaCl ou B1).*

### b) Relation constante de maille et bande interdite

La constante de maille est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives, notée  $a$  sur la (figure I-5) [2]. Les bandes interdites et les constantes de maille des principaux semi-conducteurs sont représentées dans la (figure I.5.) Les points indiquent les valeurs pour les binaires et les lignes uniquement l'évolution de ces paramètres en fonction matériau. [3].

## Aperçu théorique

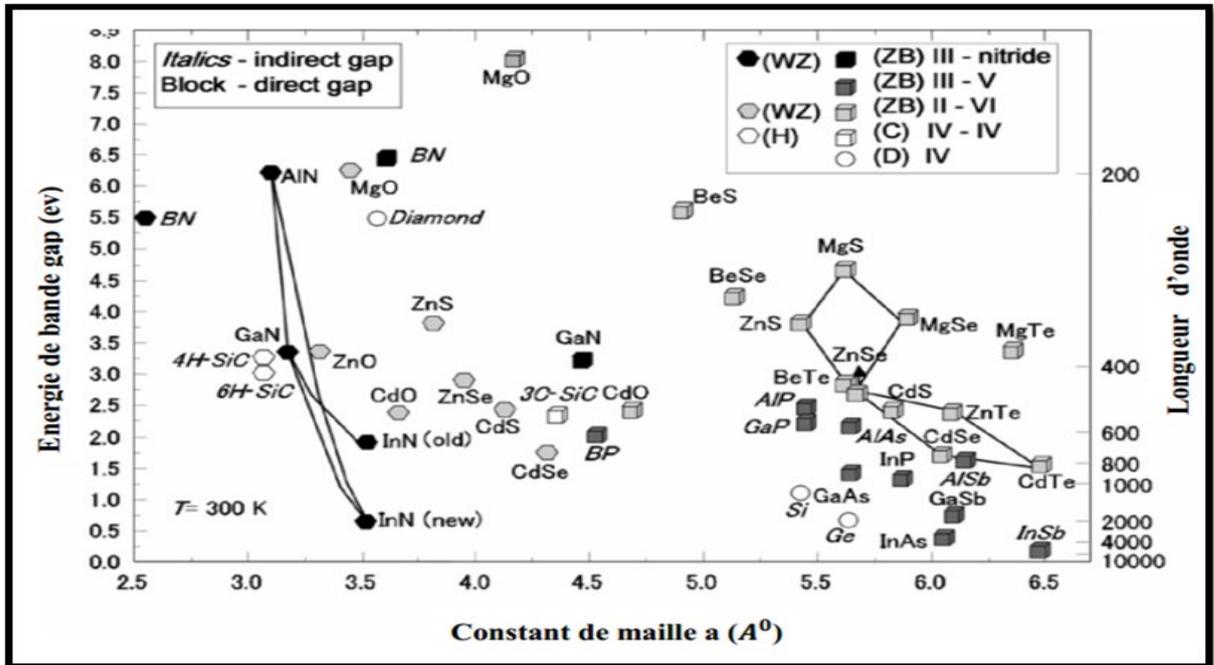


Figure I.12 : Energie de la bande interdite de plusieurs familles de semi-conducteurs en fonction de la constante de maille [4].

### I.4. Propriétés Optiques

L'interaction d'un électron avec un photon se fait, comme toute interaction, avec conservations de l'énergie et du vecteur d'onde. Les transitions optiques directes entre les extrêmes des bandes de valence et de conduction apparaissent verticales radiatives dans le diagramme de bande des électrons. Dans le cas d'un semi-conducteur à bande interdite indirecte, les transitions optiques à travers le gap ne peuvent avoir lieu que grâce à une interaction supplémentaire : transitions obliques (non radiatives). (Figure I.13)

## Aperçu théorique

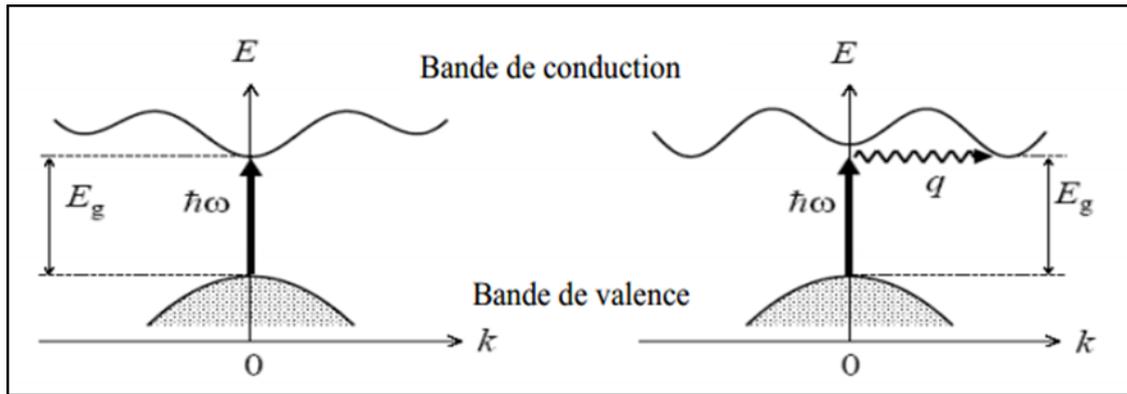


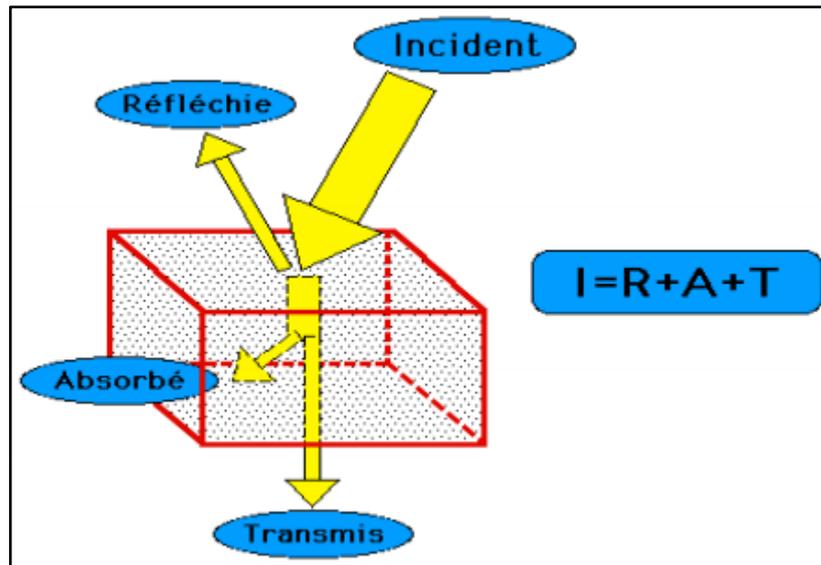
Figure I.13 : Transitions optiques directe et indirecte [6].

L'interaction lumière-matière conduit à plusieurs phénomènes parmi lesquels (Figure. I.14) :

- ❖ **La réfraction** : Déviation d'un rayonnement à la surface d'un corps, à l'interface entre deux milieux d'indices différents dans une direction fixée par la loi de Snell-Descartes [7].
- ❖ **L'absorption** : Elle se produit au cours de la propagation de l'onde. Si la fréquence de la lumière est résonante avec les fréquences de transition des atomes dans le matériau, le faisceau sera atténué à mesure qu'elle progresse.
- ❖ **La transmission** : Elle est clairement liée à l'absorption, parce que la lumière non absorbée sera transmise. L'absorption sélective est responsable de la coloration de nombreux matériaux optiques.
- ❖ **La réflectivité** : Tout corps qui reçoit une certaine quantité d'énergie radiante d'une source extérieure peut en réfléchir une partie. Le rapport entre l'énergie réfléchie et l'énergie reçue est appelée coefficient de réflectance.

## Aperçu théorique

---



*Figure I.14 : Différents phénomènes se produisant durant l'interaction lumière [8].*

### ➤ Motivations et applications :

Ces propriétés singulières font en sorte que ces matériaux sont destinés à des applications technologiques variées telles que des dispositifs optoélectroniques pour les télécommunications et des cellules photovoltaïques [9,10]. Plus précisément, les dispositifs où ces alliages s'avèrent prometteurs sont les diodes électroluminescentes (LED), les transistors bipolaires à hétérojonctions (HBT) [11], les photodiodes à avalanche (APD) [12], les lasers à émission de surface à cavité verticale (VCSEL), et les photodétecteurs à cavités résonantes.

## I.5. Théories de la fonctionnelle de la densité (DFT)

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) constitue aujourd'hui l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs des propriétés physiques des matériaux. L'objectif principal de la DFT est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique par la densité électronique en tant que quantité de base pour les calculs. Le principe de la DFT consiste en une reformulation du problème quantique à  $N$  corps en un problème monocorps. L'idée centrale de

## Aperçu théorique

---

la DFT est que la densité électronique de l'état fondamental du système détermine entièrement les valeurs moyennes des observables, comme, par exemple, l'énergie [13].

### I.5.1. Théorèmes de Hohenberg-Kohn

Les fondements du formalisme de la DFT sont basés sur deux théorèmes essentiels qui furent énoncés et démontrés par Hohenberg et Kohn [14]. Le premier théorème établit la correspondance biunivoque entre la densité électronique de l'état fondamental  $\rho(\mathbf{r})$  et le potentiel externe  $V_{ext}$ . En conséquence, l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle unique universelle de la densité électronique, telle que :

$$E = E[\rho(\mathbf{r})] \quad (\text{I.6})$$

Ce théorème signifie qu'il suffit de connaître seulement la densité électronique pour déterminer toutes les fonctions d'onde. L'intérêt de l'approche de Hohenberg-Kohn est de prouver que la densité électronique est une variable pertinente dont la connaissance suffit à déterminer les propriétés du système dans son état fondamental, ce dont on peut initialement douter vu la complexité de la fonction d'onde à N-corps.

Deuxièmement, Hohenberg et Kohn montrent que la valeur minimale de cette fonctionnelle est l'énergie exacte de l'état fondamental, et que la densité qui conduit à cette énergie est la densité exacte de l'état fondamental

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{I.7})$$

Où  $\rho_0$ : la densité de l'état fondamental.

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

$$E[\rho(\vec{r})] = F_{HK}[\rho(\vec{r})] + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3\vec{r} \quad (\text{I.8})$$

Où :

## Aperçu théorique

---

$$F_{HK}[\rho(\vec{r})] = \langle \psi | T + V | \psi \rangle \quad (\text{I. 9})$$

T et V : sont respectivement l'énergie cinétique et l'interaction inter-particules qui ne dépendent pas du potentiel extérieur. La détermination d'un état d'énergie dépend de la fonctionnelle de Hohenberg et Kohn  $F_{HK}[\rho]$  qui est valable pour l'atome, la molécule et le solide. Cependant, cette fonctionnelle demeure inconnue à l'heure actuelle de façon exacte. Il est par conséquent nécessaire de recourir à des approximations qui correspondent aux équations de Kohn et Sham établies dans l'objectif de fournir les fondements nécessaires pour exploiter de façon effective les théorèmes de Hohenberg et Kohn.

### I.5.2. Fonctionnelle d'échange-corrélation

L'approche de Kohn-Sham impose au terme d'échange-corrélation de prendre en charge, en plus de tout cela, la correction du terme d'énergie cinétique. À ce stade, il est nécessaire d'approcher l'expression de cette fonctionnelle d'échange et de corrélation qui repose sur un certain nombre d'approximations qui sont LDA et GGA.

#### a. Approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité locale (Local Density Approximation LDA) est basée sur l'hypothèse que la densité électronique varie lentement dans l'espace et par conséquent les termes d'échange-corrélation ne dépendent que de la valeur locale de la densité  $\rho(\mathbf{r})$  ; c'est-à-dire qu'elle traite un système non homogène comme étant localement homogène. L'énergie d'échange-corrélation s'exprime pour la LDA comme suit [15]:

$$E_{XC}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(\vec{r})]\rho(\vec{r})d^3\vec{r} \quad (\text{I. 10})$$

Où :  $\varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(\vec{r})]$ : est l'énergie d'échange-corrélation d'un gaz d'électron homogène.

## Aperçu théorique

---

La LDA permet de décrire seulement l'état fondamental des systèmes électroniques mais pas les états excités. Les largeurs de bande d'énergies interdites des semi-conducteurs et des isolants sont sous-estimées dans cette approximation. Pour certains systèmes à forts effets de corrélations (bandes « f-d » étroites), l'approximation LDA ne permet pas de décrire correctement les propriétés du système. En particulier, les composés de métaux de transition de type isolants de Mott-Hubbard ou isolants à transfert de charge sont prédits métalliques.

### b. Approximation du gradient généralisé (GGA)

On a remarqué que, le potentiel d'échange-corrélation de la LDA ne dépend que de la densité local au point  $r$  (localisation), alors que dans un système réel la densité est spatialement inhomogène, et par conséquent, il sera plus convenable d'introduire une correction à cette fonctionnelle qui tiendrait compte du taux de variation de  $\rho(\mathbf{r})$ : cette amélioration de tenir compte de l'inhomogénéité de la densité électronique en introduisant dans l'énergie d'échange-corrélation des termes dépendant du gradient de la densité a été prise en considération dans la GGA (Generalized Gradient Approximation) qui permet d'introduire un ajustage entre les termes locaux et les termes dépendants du gradient [15]. Elle s'écrit comme suit :

$$E_{xc}[\rho]^{GGA} = \int f[\rho(\vec{r}), |\vec{\nabla}_{\rho}(\vec{r})|] d\vec{r} \quad (\text{I. 11})$$

La GGA a fait ses preuves dans de très nombreux cas et elle est connue pour donner de meilleurs résultats que la LDA, notamment pour les systèmes magnétiques.

## I.5 Conclusion

Dans ce chapitre, on a fourni une brève introduction sur les composés semiconducteurs. On a donné un bref aperçu sur les propriétés électriques des semiconducteurs. Par la suite, on

## **Aperçu théorique**

---

a présenté les différents types de semiconducteurs et quelques propriétés optiques. En fin on a parlé très brièvement sur les fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Des critères tels que le Gap, la température, le dopage et les propriétés optiques sont déterminantes dans le choix d'un semiconducteur.

## Aperçu théorique

---

### I.6 Bibliographie

- [1] A. Bensaada, Technologie des semi-conducteurs, Livre, Université d'Oran, Alger.
- [2] A. Bechiri, Effet du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semiconducteurs III-V, Thèse de doctorat, Université de Constantine (2006).
- [3] R. Beneyton, Sur l'incorporation du thallium dans une matrice III-V : préparation de GaTIAs et InTIAs par EJM. Thèse doctorat, Université de Constantine (2004).
- [4] N. Lebga, Propriétés structurales, élastiques et optiques de semiconducteurs à grand gap : Les composés B-V, les alliages  $Zn_xCd_{1-x}Se$  et  $ZnSe_{1-x}Tex$ , le  $\beta$ -SiC thèse doctorat Université de Setif1 (2011).
- [5] A. Chovet, P. Planson, Physiques des semiconducteurs, Cours de l'école polytechnique, Universitaire de Marseille, (2004).
- [6] J. Fais. Introduction à la physique des semiconducteurs, Université de Neuchâtel. 2001
- [7] L. Lasne, Physique et technologie des composants de puissance, Université de Bordeaux, 2001.
- [8] <http://www.eumetcal.org/euromet/french/nwp/n9100/n9100107.htm>
- [9] J. F. Geisz, D.J. Friedman, III-N-V semiconductors for solar photovoltaic applications, Semicond. Sci. And Technol. 17, 769 (2002).
- [10] Y. Zhang, A. Mascarenhas, S. K. Deb, H. P. Xin, C. W. Tu, Heavily nitrogen doped III-V semiconductors for high-efficiency solar cells, Proceedings of 28th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2001, p. 1189. IEE.

## Aperçu théorique

---

- [11] C.W. Tu, III-N-V low-band gap nitrides and their device applications, *J. Phys. Condens. Matter.* 13, 7169 (2001).
- [12] G.S. Kinsey, D.W. Gotthold, A.L. Holmes Jr., J.C. Campbell, GaN Asresonant-cavity avalanche photodiode operating at 1.064-micron, *Appl. Phys. Lett.* 77, 1543 (2000).
- [13] N. Lebga, Propriétés structurales, élastiques et optiques de semiconducteurs à grand gap : Les composés B-V, les alliages  $Zn_xCd_{1-x}Se$  et  $ZnSe_{1-x}Te_x$ , le  $\beta$ -SiC, Thèse de doctorat, Université de Sétif (2011).
- [14] P. Hohenberg, W. Kohn: *Phys. Rev. B* 864, 136 (1964).
- [15] R. M. Dreizler, J. Provincia, *Density functional methods in physics*, Plenum, New York (1985).

# **Chapitre II**

## **Résultats et discussion**

## Résultats et discussion

---

### II.1 Introduction

Les avancées théoriques et la réduction du coût et du temps de calcul ont provoqué une grande diversité de la modélisation ab initio. Plusieurs codes de calcul (WIEN 2K, CASTEP, ...etc.) ont été commercialisés, leur emploi croît d'une manière considérable, et les scientifiques deviennent de plus en plus sensibles à leurs résultats [1]. En tant qu'aide à l'interprétation et à l'analyse des données expérimentales, la modélisation ab initio est désormais devenue un outil presque incontournable. En outre, ses capacités prédictives en font une véritable « expérience à l'ordinateur », capable d'identifier sans ambiguïté des mécanismes microscopiques sous-jacents aux phénomènes ou aux propriétés étudiées [1].

L'étude des propriétés physiques des semiconducteurs sous pression est devenue une activité de recherche importante. Plusieurs techniques de calcul ont permis de mieux comprendre les propriétés fondamentales des semiconducteurs que ce soit à l'équilibre [2, 3] ou sous haute pression [4-6]. En fait, la valeur de la pression appliquée, ainsi que celle de la température peuvent affecter considérablement les propriétés fondamentales des matériaux semiconducteurs [7, 8], même elles peuvent conduire à de nouveaux matériaux avec de nouvelles propriétés de comportement [1].

Malgré l'importance des semiconducteurs binaire à base de scandium, il n'y a eu que peu de travaux sur les propriétés fondamentales de ces composés à haute pression. Pour cela, d'autres investigations de ces matériaux sous pression sont nécessaires.

Dans là ce travail, on va essayer d'étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques du composé semiconducteur ScP dans la phase rocksalt (B1), en utilisant la méthode du pseudo potentiel et onde plane (PP-PW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémentée dans le code CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package).

## Résultats et discussion

---

Il s'agit d'un code de calcul *ab initio* et il fait partie d'un ensemble de logiciel de simulation numériques nommé Materials Studio (MS) commercialisés par Accerlys. CASTEP utilise la DFT pour la résolution de l'équation de Schrodinger et emploi des conditions périodiques, des super cellules, une intégration sur la zone de Brillouin (ZB), une base d'ondes planes et des pseudo potentiels pour calculer l'énergie total d'un système donné La fonctionnelle d'échange-corrélation est traitée dans l'approximation de la densité locale (LDA). En outre, on s'intéresse aussi à l'effet de la pression hydrostatique sur les différentes propriétés du matériau considéré.

Avant le calcul de différentes propriétés désirées, il est très intéressant de faire des tests dits de convergence de l'énergie totale  $E_{\text{tot}}$  en fonction de nombre de point-  $k$  dans la première zone de Brillouin et en fonction de l'énergie de coupure  $E_{\text{cut}}$ . Il faut noter qu'un échantillonnage insuffisant de la zone de Brillouin mènera à des résultats mal convergés ; à l'inverse un trop grand nombre de points  $k$  conduirait à des temps de calculs démesurés. Les tests de convergences effectués sur le composé ScP, nous ont permis de fixer la valeur de l'énergie de coupure à 400 eV pour l'ensemble de base de l'onde plane, alors que les intégrations de la zone de Brillouin sont effectuées en utilisant 60 points- $k$  dans la partie irréductible, qui correspondait à l'ensemble points de Monkhorst-Pack  $8 \times 8 \times 8$ .

La tolérance de convergence pour l'optimisation de la géométrie est sélectionnée de telle sorte que l'énergie minimale, la force maximale, la contrainte maximale et le déplacement maximal sont inférieurs à  $2 \times 10^{-5}$  eV/atome, 0.05 eV/Å, 0.1 GPa, et  $2 \times 10^{-3}$  Å, respectivement.

Nous avons proposé d'étudier les propriétés structurales, en particulier : la constante de réseau, le volume de maille et la densité cristalline ; les propriétés électroniques, en particulier la structure de bandes électroniques ; et les propriétés optiques, en particulier : la fonction

## Résultats et discussion

---

diélectrique, l'indice de réfraction, la réflectivité optique, l'absorption optique, la conductivité optique, et la fonction de perte des électrons.

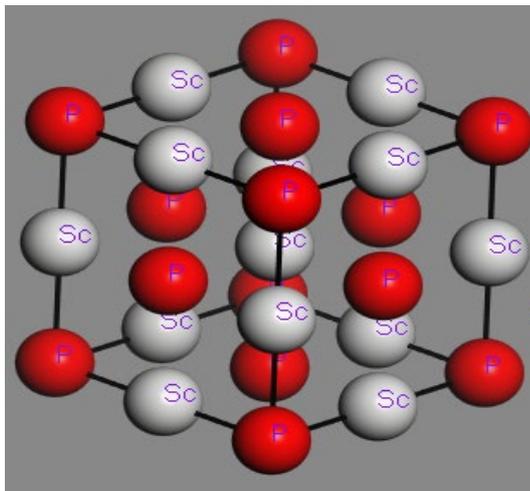
### II.2 Propriétés structurales

#### II.2.1 Propriétés structurales du ScP à la pression nulle

La disposition des atomes ou des groupes d'atomes (des molécules) dans un solide cristallin, c'est-à-dire la structure cristalline de l'ensemble, dépend de plusieurs facteurs, en particulier du type de liaison (ionique, covalente, métallique, ...etc.) entre les atomes, du nombre de premiers voisins, ou nombre de coordinence, ...etc. [9].

L'étude des propriétés structurales à savoir le paramètre de maille est un point de départ à cause de leurs importances dans la compréhension d'autres propriétés électroniques, élastiques, optiques, thermodynamiques ...etc. Pour cela, dans un premier temps, nous avons calculé les paramètres structuraux du composé ScP dans la phase rocksalt (nommée aussi la phase NaCl) à l'équilibre c.-à-d., à  $P = 0$  GPa (et  $T = 0$  K).

La figure II.1 présente la structure du composé ScP, c'est un prototype de la maille élémentaire cubique à faces centrées (cubique rocksalt (B1)).



*Figure II.1 : Maille élémentaire du composé ScP en phase cubique rocksalt.*

## Résultats et discussion

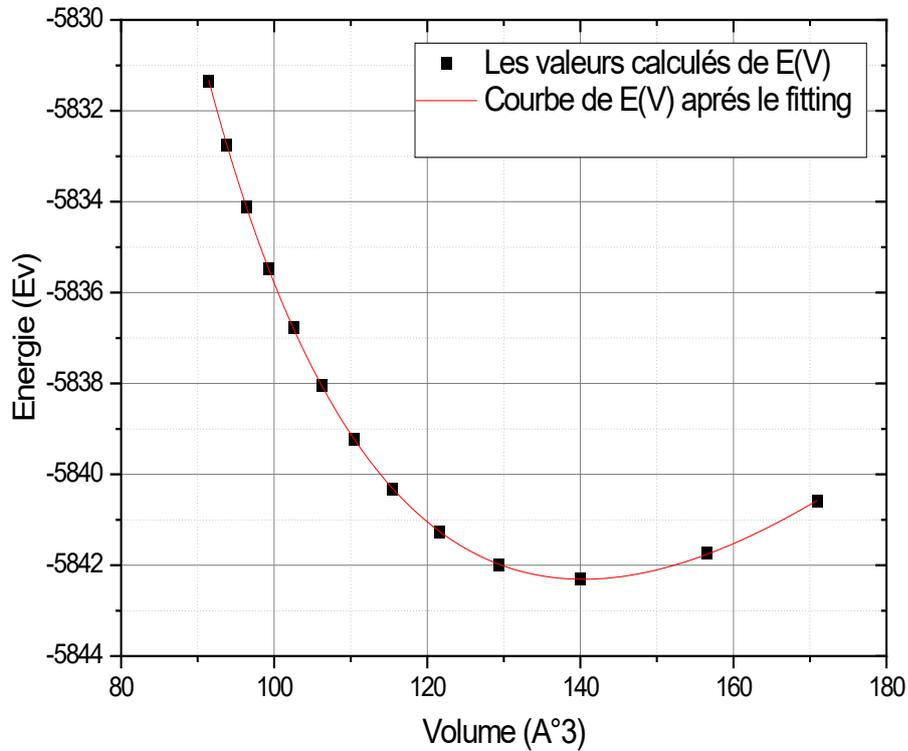
---

Le processus d'optimisation de la géométrie est effectué à l'équilibre. La figure II.2 représente les données d'énergie-volume total ( $E-V$ ) résultantes. Le volume de la maille à l'équilibre ( $V_0$ ), le module de rigidité ou de compressibilité noté ( $B_0$ ) et la dérivée du module de rigidité par rapport à la pression noté  $B'_0$ , sont obtenus par un fit de données  $E-V$  par l'équation de Murnaghan [6] :

$$E(V) - E(V_0) = \frac{B_0 V}{B'_0} \left[ \frac{(V_0/V)^{B'_0}}{B'_0 - 1} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B'_0 - 1} \quad (\text{II-1})$$

Où  $V_0$  est le volume d'équilibre,

Et  $E(V_0)$  c'est l'énergie correspondante au volume d'équilibre.



*Figure II.2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille.*

## Résultats et discussion

La constante de réseau relaxée ( $a_0$ ), le volume de la maille ( $V_0$ ), le module de compressibilité ( $B_0$ ), ainsi que sa dérivée  $B'_0$  du composé ScP sont représentés dans le tableau II.1. Les valeurs du  $a_0$ ,  $V_0$ ,  $B_0$ , et  $B'_0$  du ScP déterminées par des résultats de recherches de divers chercheurs [10-16] selon les variétés des méthodes sont aussi portées sur le tableau II.1. En général, nos valeurs des propriétés structurales du composé ScP sont en bon accord avec les valeurs de la littérature. Par exemple la déviation entre notre valeur (5.196 Å) du paramètre de maille et la valeur expérimentale (5.312 Å) [11] est estimée à 2.23% environ.

Paramètres	Présent calcul	Autres travaux
$E_0$ (eV)	-5842.298*, -5842.309**	-
$V_0$ (Å <sup>3</sup> )	139.96*, 140.35**	-
$a_0$ (Å)	5.191* 5.196**	5.354 <sup>a</sup> , 5.312 <sup>b</sup> , 5.204 <sup>c</sup> , 5.319 <sup>d</sup> , 5.2584 <sup>e</sup> , 5.31 <sup>f</sup> , 5.32 <sup>g</sup> , 5.27 <sup>h</sup> , 5.205 <sup>i</sup>
$B_0$ (GPa)	109.53**	111.07 <sup>a</sup> , 107.9 <sup>c</sup> , 94.97 <sup>d</sup> , 101.4 <sup>e</sup> , 97.6 <sup>f</sup> , 99.27 <sup>g</sup> , 110.05 <sup>h</sup> , 109.5 <sup>i</sup>
$B'_0$	3.25**	2.903 <sup>a</sup> , 3.41 <sup>f</sup> , 3.58 <sup>g</sup> , 5.80 <sup>h</sup> , 3.77 <sup>i</sup>

**Tableau II.1 :** Constante de réseau  $a_0$  ( $a_0 = \sqrt[3]{V_0}$ ), volume de la maille ( $V_0$ ), Energie totale ( $E_0$ ), module de rigidité  $B_0$  et sa dérivée ( $B'_0$ ) du ScP en comparaison avec les valeurs expérimentales (Exp) [11] et autres valeurs théoriques [10, 12-16].

\*Calculer par CASTEP, \*\* à partir du fit de l'équation de Murnaghan, par Origin

<sup>a</sup>- Réf. [10], <sup>b</sup>- Réf. [11] Ex (mesurée à température et pression ambiantes), <sup>c</sup>- Réf. [12] LDA,

<sup>d</sup>- Réf. [12] GGA, <sup>e</sup>- Réf. [12] WC, <sup>f</sup>- Réf. [13] GGA, <sup>g</sup>- Réf. [14] GGA, <sup>h</sup>- Réf. [15] GGA,

<sup>i</sup>- Réf. [16] LDA.

## Résultats et discussion

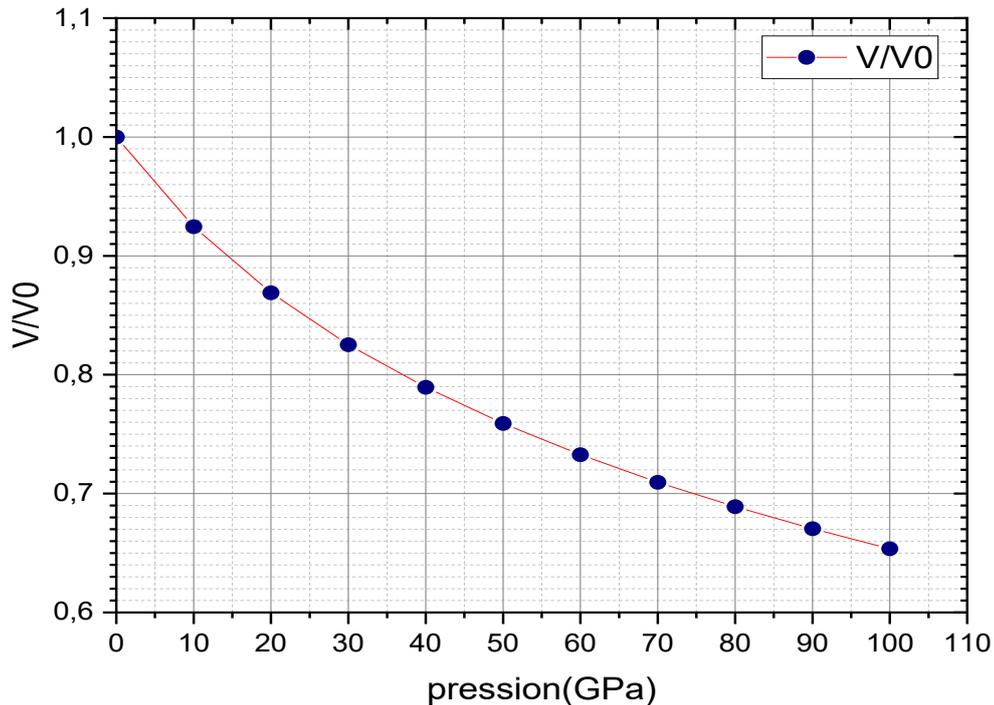
---

Sachant que le module de compression est sensible aux variations du volume, les valeurs obtenues de ce dernier sont généralement surestimées par l'approximation LDA et sous-estimées par l'approximation GGA. Ainsi, nos calculs confirment la règle générale que l'approximation du gradient généralisé (GGA) surestime les valeurs du paramètre de maille, et sous-estime celles du module de rigidité, contrairement à l'approximation de la densité locale (LDA) qui sous-estime les valeurs du paramètre de maille, et surestime celles du module de rigidité [17]. D'une manière générale, les composés les plus compacts possèdent néanmoins des plus grands modules de compressibilité et, amenant à des plus grandes valeurs de la température de Debye.

### II.2.2 Effets de la pression sur les propriétés structurales du ScP

La réponse du composé semiconducteur ScP en structure rocksalt à la pression externe appliquée a été estimée en explorant la dépendance du volume relatif (ou dit volume normalisé) ( $V/V_0$ ) à la pression hydrostatique appliquée. Nos résultats sont présentés sur la figure II.3. Le processus d'optimisation de la géométrie est effectué à diverses pressions. On note que tous les paramètres structurels normalisés (volume relatif ou constante de réseau relative) diminuent de façon monotone avec l'augmentation de la pression appliquée. Le volume relatif  $V/V_0$  commence par la valeur 1 (volume  $V = 139.93 \text{ \AA}^3$ ) à la pression nulle, et il atteint la valeur  $\sim 0.65$  ( $V = 91.45 \text{ \AA}^3$ ) pour une pression de 100 GPa.

## Résultats et discussion



**Figure II.3 :** Volume relatif ( $V/V_0$ ) en fonction de la pression appliquée pour le ScP.

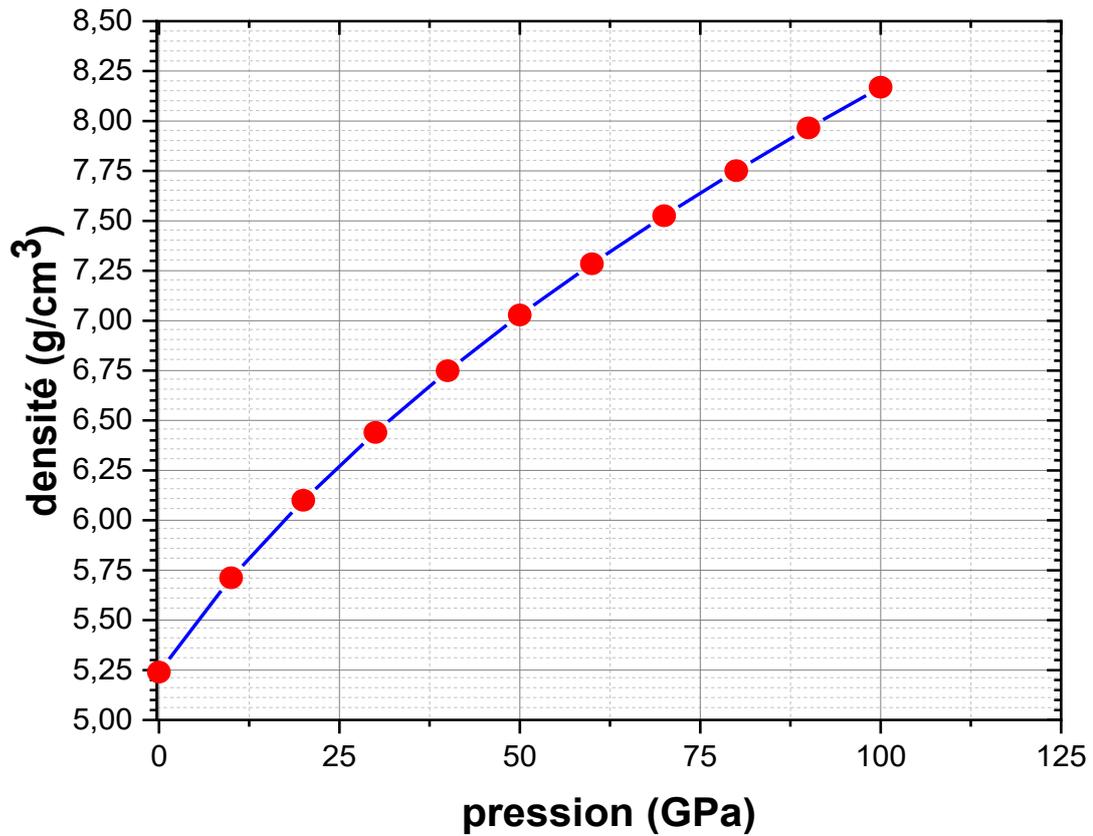
La caractéristique fondamentale d'un matériau dans *l'état cristallin* est d'être formé d'un arrangement périodique d'atomes ou de molécules. L'arrangement et la relation qui existent entre ceux-ci expliquent certaines de leurs propriétés. La cristalline densité (la masse volumique)  $g$  est exprimée comme suit [18] :

$$g = n.M/N_A.V \quad (\text{II-2})$$

Où,  $n$  c'est nombre de molécules par maille,  $M$  c'est la masse moléculaire,  $N_A$  c'est le nombre d'Avogadro ( $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ), et  $V$  c'est le volume de la maille.

La variation de la densité cristalline (la masse volumique)  $g$  en fonction du volume de la maille  $V$  du composé ScP peut être estimé par la formule suivante :  $g(V) = 504.35/V$ . La variation de  $g$  en fonction de la pression hydrostatique est illustrée sur la figure II.4, où il a été remarqué, que la densité cristalline prend une valeur d'environ  $3.604 \text{ g/cm}^3$  à pression nulle, de même elle atteint une valeur de  $5.515 \text{ g/cm}^3$  à  $P = 100 \text{ GPa}$ .

## Résultats et discussion



*Figure II.4 : Volume relatif ( $V/V_0$ ) en fonction de la pression appliquée pour le ScP.*

D'une manière générale, la densité cristalline en fonction de la pression présente une variation quadratique sous la forme suivante [17]:

$$g(p) = g(0) + a p + b p^2 \quad (\text{II-3})$$

Pour le composé ScP, la courbe la densité cristalline peut être interpolée par l'équation suivante :  $g = 3.633 + 2.62 \times 10^{-2} p - 7.55 \times 10^{-5} p^2$ , où  $g$  est exprimée en g/cm<sup>3</sup> et  $p$  en GPa.

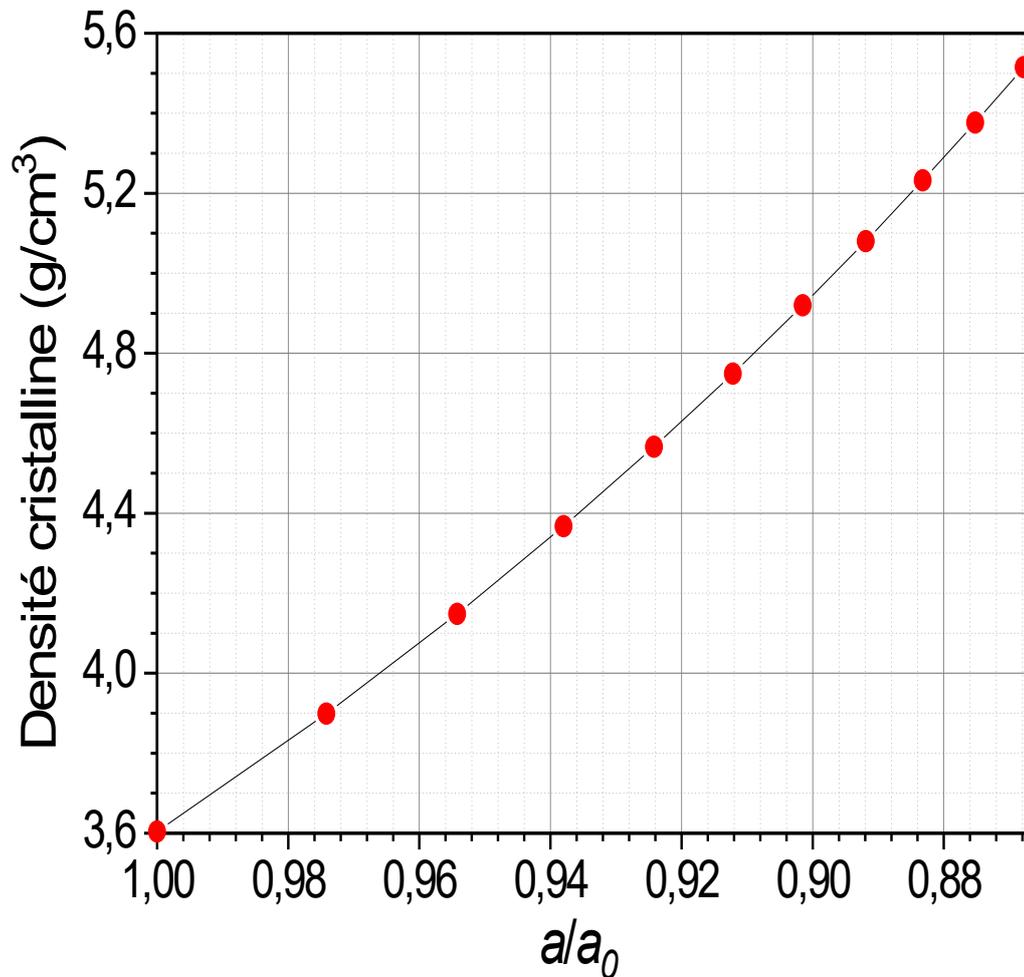
Une autre forme largement utilisée pour présenter la densité cristalline  $g$ ; c'est en fonction du paramètre de maille relatif ( $a/a_0$ ). Les valeurs obtenues de ( $a/a_0$ ), ainsi que celles de la densité cristalline  $g$  du semiconducteur ScP sont rassemblées dans le tableau II.2.

## Résultats et discussion

$(a/a_0)$	1.000	0.974	0.954	0.938	0.924	0.912	0.902	0.892	0.883	0.875	0.868
$g$ (g/cm <sup>3</sup> )	3.604	3.899	4.148	4.367	4.566	4.749	4.920	5.080	5.232	5.376	5.515

*Tableau II.2 : Valeurs de  $(a/a_0)$ , et de la densité cristalline  $g$  du semiconducteur ScP.*

Les variations de la densité cristalline en fonction de  $(a/a_0)$  du semiconducteur ScP sont présentées sur la figure II.5. D'après la courbe représentée sur la figure II.5, on constate que la densité cristalline  $g$  augmente d'une façon monotone avec la diminution de  $(a/a_0)$ .



**Figure II.5 :** Variations de la densité cristalline en fonction de  $(a/a_0)$  du ScP.

## Résultats et discussion

---

### II.3. Propriétés optiques

#### II.3.1 Fonction diélectrique

Pour décrire le comportement des semiconducteurs soumis à l'effet d'une excitation lumineuse extérieure, le calcul de la fonction diélectrique  $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\omega})$  est indispensable. Cette dernière est une fonction complexe qui s'écrit sous la forme [20] :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\omega}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{Re}(\boldsymbol{\omega}) + i\boldsymbol{\varepsilon}_{Im}(\boldsymbol{\omega}) \quad (\text{II. 4})$$

La partie imaginaire de la fonction diélectrique est obtenue en utilisant la même méthodologie que celle décrite dans les Réfs. [19, 20], alors que la partie réelle de la fonction diélectrique est dérivée de la partie imaginaire en utilisant l'expression dite de Kramers-Kronig [21, 22].

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{Re}(\boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{Im}(\boldsymbol{\omega}')}{\boldsymbol{\omega}' - \boldsymbol{\omega}} d\boldsymbol{\omega}' \quad (\text{II. 5})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{Im}(\boldsymbol{\omega}) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{Re}(\boldsymbol{\omega}')}{\boldsymbol{\omega}' - \boldsymbol{\omega}} d\boldsymbol{\omega}' \quad (\text{II. 6})$$

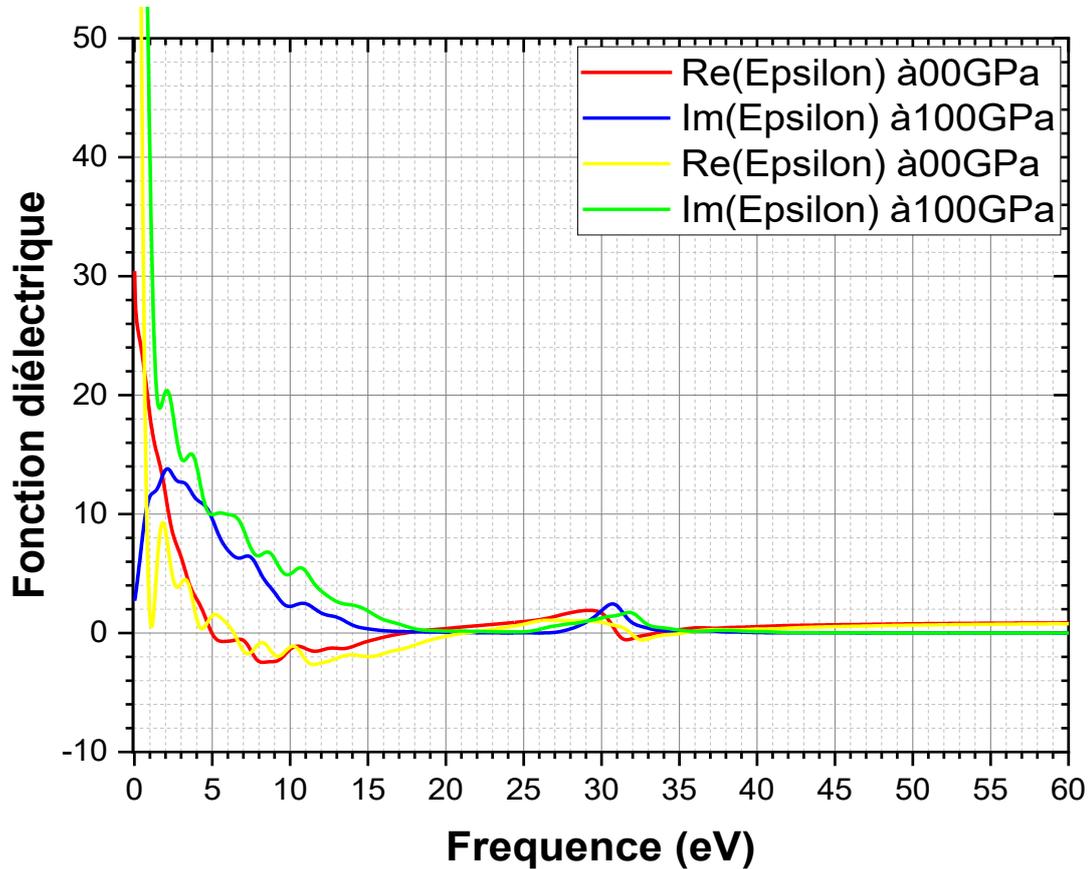
Où  $\mathcal{P}$  représente la valeur principale.

La figure II.6 illustre les parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique du composé ScP en phase cubique rocksalt à pression nulle et sous pression de 100 GPa.

Nous observons sur la figure II.6 que pour les plus petites fréquences, la courbe de la partie réelle présente un maximum proche du bord d'absorption. Ce maximum est suivi par les régions ayant la tendance générale à une intensité réduite. La forme générale de la partie réelle est celle attendue pour un oscillateur harmonique de fréquence de résonance autour de 4 eV environ. La pression appliquée déplace très légèrement la fréquence de résonance vers des

## Résultats et discussion

fréquences plus élevées. On note que presque le même comportement de la fonction diélectrique était observé dans le cas des semiconducteurs magnétiques à base de manganèse  $MnX$  ( $X = Te, S$  et  $Se$ ) en phase zinc-blende [1].



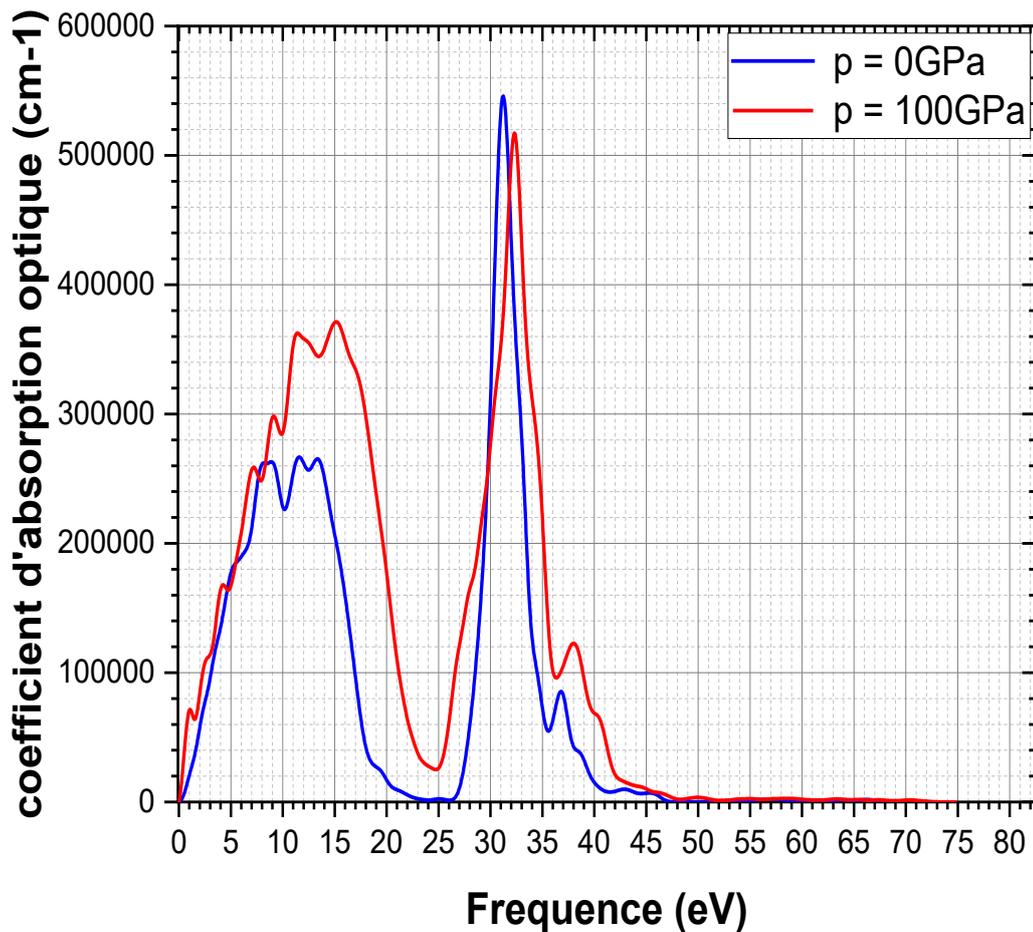
*Figure II.6 : Parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique du ScP à une pression nulle et sous une pression de 100 GPa.*

### II.3.2 Coefficient d'absorption optique

La pénétration de la lumière d'une longueur d'onde particulière dans un matériau avant son absorption peut être déterminée par le coefficient d'absorption optique. Ce dernier est calculé en fonction de l'énergie des photons. Les spectres du coefficient d'absorption optique du composé ScP à zéro et à 100 GPa sont présentés sur la figure II.7. On constate deux pics que ce soit à une pression nulle ou à 100 GPa. Le premier se trouve à des énergies du photon

## Résultats et discussion

d'environ 13 eV, alors que le second se trouve à des énergies du photon d'environ 31 eV. Le coefficient d'absorption optique ensuite diminue et disparaît à une énergie de photon d'environ 47eV. Lorsque la pression est appliquée, le premier pic de ce spectre augmente en amplitude, alors que le second légèrement diminue.



*Figure II.7 : Spectres du coefficient d'absorption optique du ScP à  $P = 0$  et  $P = 100$  GPa.*

### II.3.3 Conduction Optique

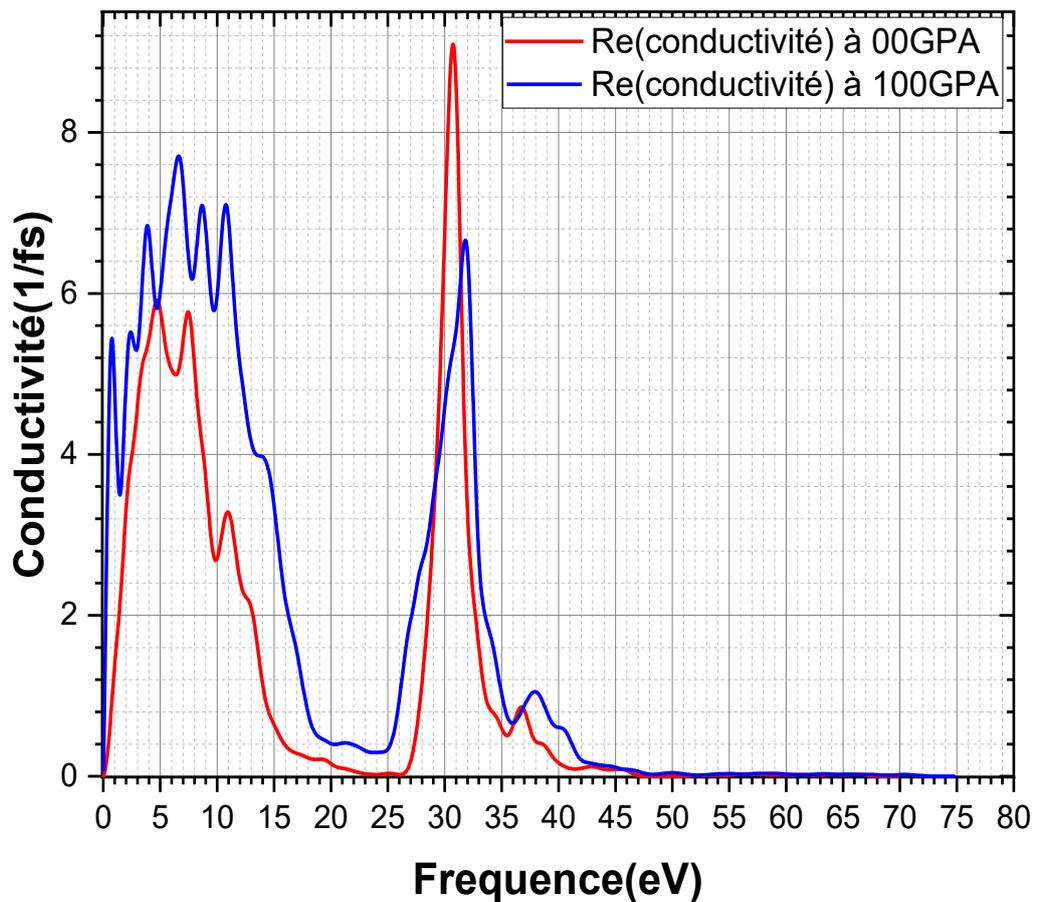
La conduction optique du composé ScP à une pression nulle et sous une pression de 100 GPa en fonction de l'énergie du photon est illustrée sur la figure II.8. Telle que les spectres du coefficient d'absorption optique, cette figure montre deux pics, le premier pour

## Résultats et discussion

des énergies s'étaient entre 4 et 12 eV, puis elle atteint son maximum lorsque l'énergie des photons est atteinte la valeur 32 eV, ensuite elle s'annule pour les énergies des photons au-delà de la valeur d'environ 40 eV.

La pression de 100 GPa conduit à l'augmentation de la conductivité optique dans la plage d'énergie des photons 0-29 eV, et sa diminution dans la plage d'énergie des photons 29-45 eV, ensuite elle s'annule pour les énergies des photons supérieures à 45 eV.

La diminution de la conductivité optique sous pression appliquée suggère la diminution de la vitesse à laquelle les électrons absorbent les photons incidents pour une énergie donnée [1].

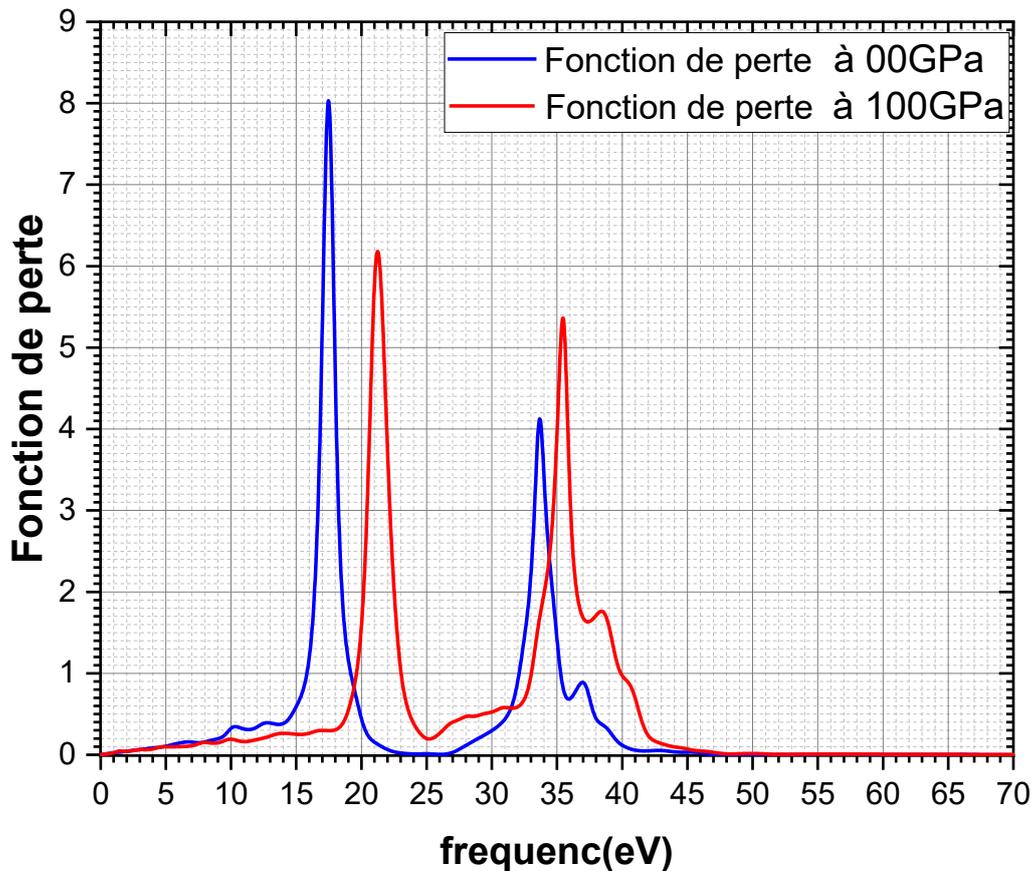


*Figure II.8 : Conduction optique du ScP à  $P = 0$  GPa et sous une pression de 100 GPa.*

## Résultats et discussion

### II.3.4 Fonction de perte d'énergie des électrons

La fonction de perte électronique d'énergie  $L(\omega)$  est utilisée pour décrire les pertes d'énergie des électrons rapides traversant un semiconducteur. À cette fin, la fonction de perte d'énergie des électrons  $L(\omega)$  du composé ScP à une pression nulle et sous une pression de 100 GPa était calculée. Nos résultats sont représentés sur la figure II.9. Dans ces spectres, on note des pics qui représentent la caractéristique associée à la résonance du plasma. Lorsque la pression de 100 GPa est appliquée, la fréquence du plasma est légèrement décalée vers des énergies plus grandes et le maximum du pic de  $L(\omega)$  est réduit suivi d'un changement de la forme du spectre.



*Figure II.9 : Fonction de perte d'énergie des électrons du ScP à une pression nulle et sous une pression de 100 GPa.*

## Résultats et discussion

### II.3.5 Indices de réfraction

La figure II.10 illustre les variations du spectre d'indice de réfraction  $n(E)$  du composé ScP à des pressions de 0 et 100 GPa en fonction de l'énergie. A la pression nulle, on note de pics provenant des transitions excitoniques qui se produisent aux bords de  $E_0$ . Les pics ne sont que légèrement affectés par une pression de 100 GPa. Les effets excitoniques ont tendance à augmenter la force de l'oscillateur aux points M0 et M1 [1]. À la pression nulle, notre résultat prédite une valeur de 5 environ pour l'indice de réfraction statique de ScP. On peut noter que les indices de réfraction  $n_0$  des agrégats polycristalline prennent une valeur intermédiaire entre les valeurs décernées aux différents plans cristallographiques. Cela ne peut s'interpréter que par le fait que une réponse optique polycristalline d'un matériau anisotrope est considéré comme la moyenne des réponses des différents plans qui l'en construit.

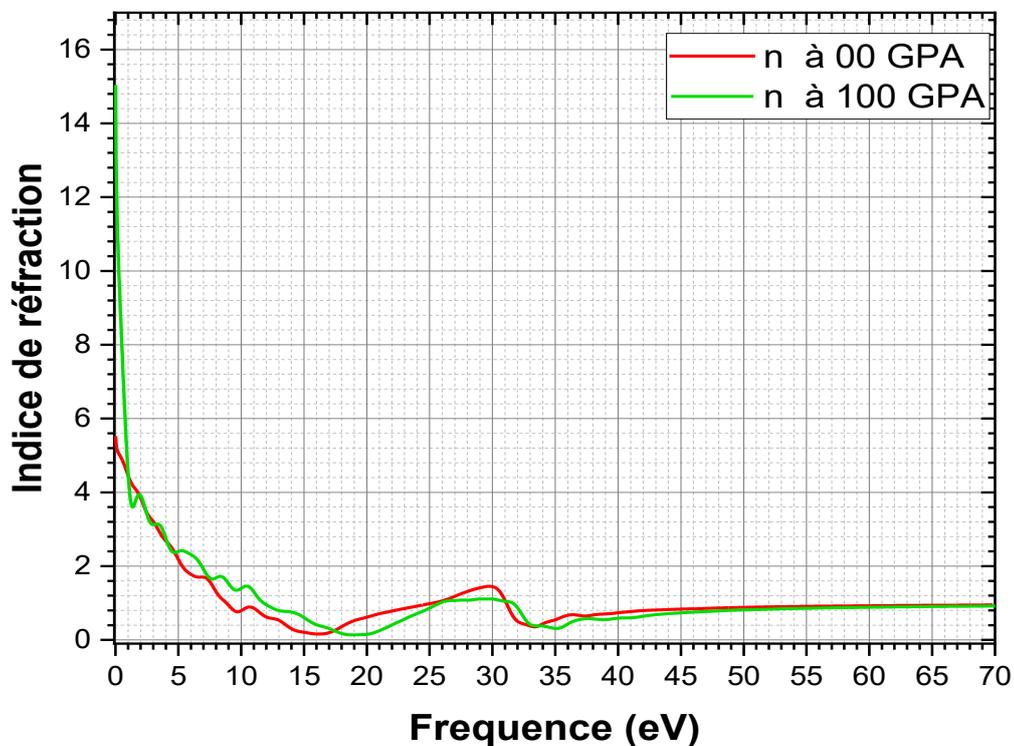


Figure II.10 : Indice de réfraction ( $n$ ) du ScP pour des pressions nulle et 100 GPa.

## Résultats et discussion

### II.3.6 Réflectivité Optique

La connaissance des deux parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique permet de calculer des fonctions optiques importantes tel que la réflectivité donnée en incidence normale par [20] :

$$R(\omega) = \frac{n + ik - 1}{n + ik + 1} \quad (\text{II. 7})$$

Nos résultats du spectre de réflectivité pour ScP à des pressions de 0 et 100 GPa sont représentés sur la figure II.11. Notez que le maximum de la réflectivité a une valeur d'environ 64% et se situe autour de  $\hbar\omega = 15$  eV. Une pression appliquée de 100 GPa conduit à un léger déplacement du spectre de réflectivité vers des fréquences plus élevées (énergies) avec une tendance générale à ce que les pics de réflectivité deviennent plus élevés. Néanmoins, la forme du spectre de réflectivité reste presque la même. Le maximum de la réflectivité a une valeur d'environ 73.5% et se situe autour de  $\hbar\omega = 18$  eV.

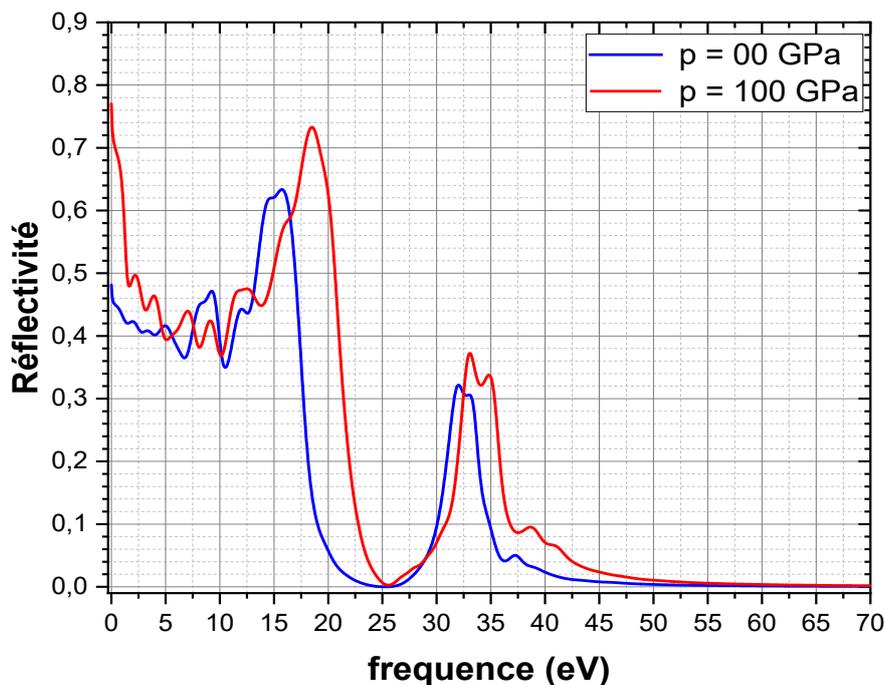


Figure II.11 : Spectres de réflectivité du ScP à  $P = 0$  et  $P = 100$  GPa.

## Résultats et discussion

---

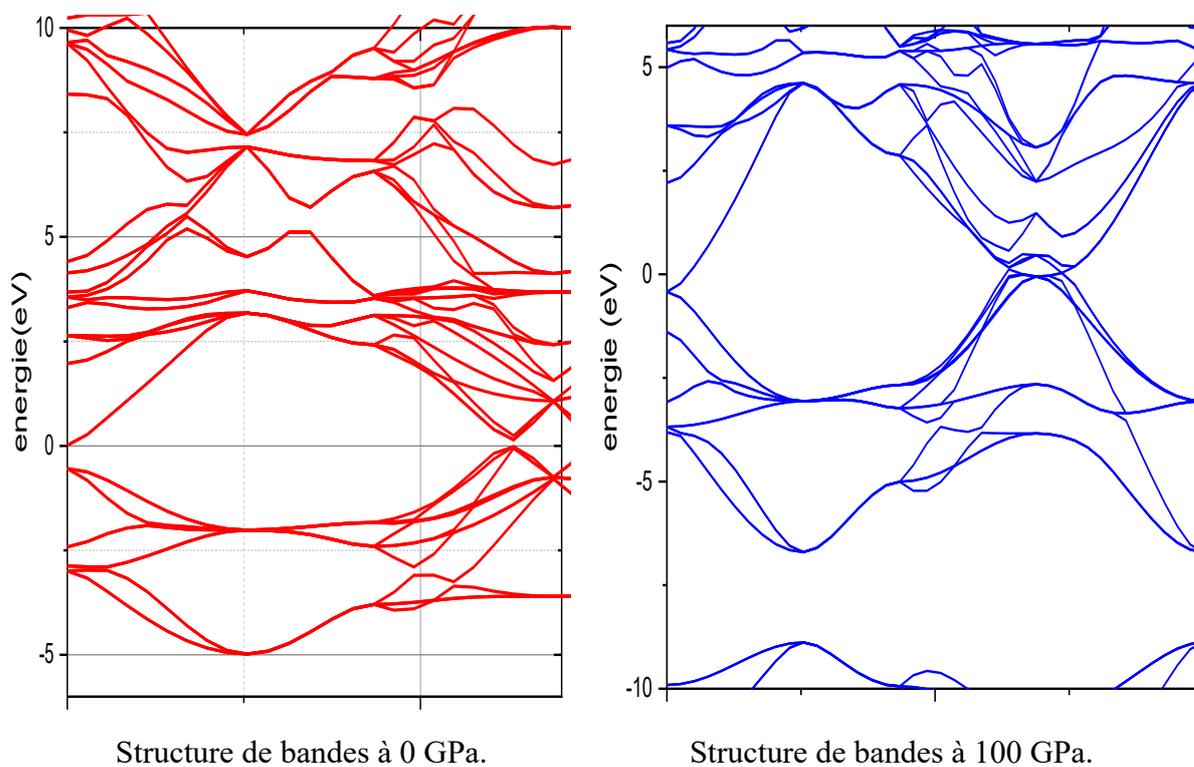
### II.4 Structures de bandes électroniques

Un atome d'un élément donné présente des niveaux d'énergie bien définis auxquels on peut associer des fonctions d'onde bien définies. Il en est de même dans un cristal où les atomes sont arrangés selon un réseau triplement périodique. Les électrons occupent des niveaux d'énergie bien définis correspondant à des modes de propagation également bien définis. Ces niveaux sont extrêmement proches les uns des autres et sont regroupés en bandes appelées bandes d'énergie permise, qui sont séparées par des zones appelées bandes interdites (il n'y a pas de niveau d'énergie permise), et qui sont représentées dans l'espace réciproque [17].

Donc par définition, le gap d'énergie fondamentale d'un matériau isolant incorporé dans la famille des semiconducteurs ou celle d'un matériau diélectrique c'est la différence entre le maximum de la bande de valence (MBV) et le minimum de la bande de conduction (MBC) [20]. Les structures des bandes d'énergie des composés ScP dans la structure rocksalt, ont été calculées en utilisant la méthode du pseudo potentiel des ondes planes avec l'approximation de la densité locale (LDA). Les spectres d'énergie obtenus selon les directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin sont représentés sur la figure II.12. Dans cette figure le sommet de la dernière bande de valence du composé étudié est comme origine des énergies. A pression nulle (figures II.12), on remarque que le maximum de la bande de valence est situé au point de haute symétrie X dans la zone de Brillouin et le minimum de la bande de conduction est situé aussi au point X. Cela est vrai pour le composé ScP est un semiconducteur à bande-gap directe. L'écart relevé entre le minimum de la bande de conduction et maximum de la bande de valence égale 0.11 eV ( $E_g = 0.11$  eV). Cette valeur est relativement inférieure de la valeur expérimentale 1.1 eV rapporté dans la littérature [23].

## Résultats et discussion

Ainsi, notre calcul confirme la règle générale que LDA sous-estime la valeur du gap d'énergie [10, 14].



**Figure II.12 :** Structure de bandes du composé ScP à  $P=0$  et sous une pression de 100 GPa.

Sous l'effet de la pression de 100 GPa (Figure II.12), nous voyons que la présence de cette pression fait déplacer pratiquement toutes les bandes, conduisant à un comportement semi-métallique de notre composé.

## Résultats et discussion

---

### II.6 Bibliographie

- [1] A. khaldi, Etude des propriétés optoélectroniques et mécaniques des semiconducteurs magnétiques, Thèse de Doctorat, Université Mohamed Khider–Biskra, (2019).
- [2] S. Daoud, N. Bioud, L. Belagraa, N. Lebga, J. Nano- Electron. Phys. 5, 04061 (2013)
- [3] N. Bioud, Optik, 127, (23) 11395 (2016).
- [4] E. Viswanathan, M. Sundareswari, D. S. Jayalakshmi, M. Manjula, S. Krishnaveni, Indian J Phys., 91, 999 (2017).
- [5] N. Bioud, K. Kassali, X-W. Sun, T. Song, R. Khenata, S. Bin-Omran, Mater. Chem. Phys. 203, 362 (2018).
- [6] S. Daoud, N. Bioud, N. Lebga, Chinese J. Phys., 57, 165 (2019).
- [7] A. Khaldi, H. Ghodbane, N. Bouarissa, S. Daoud, L. Tabourot, J. Supercond. Nov. Magn. 30, 1533 (2017)
- [8] S. Daoud, N. Bouarissa, Comput. Condens. Matter., 19, e00359 (2019).
- [9] A. Raskin, Rappels atomistiques, structure des métaux, des alliages et des céramiques, Support de Cours, Université Médicale Virtuelle Francophone, (2009-2010).
- [10] A. Tebboune, D. Rached, A. Benzair, N. Sekkal, A.H. Belbachir, Phys. Status Solidi B, 243, 2788 (2006).
- [11] E. Parthé, E. Parthé, Acta Cryst., 16,71 (1963).
- [12] W. Celin-Mancera, W. López-Pérez, Á. González-García, L. Ramírez-Montes, R. González-Hernández, Comput. Condens. Matter.8, 14 (2016).
- [13] P. Pandit, B. Rakshit, S. P. Sanyal, Phys. Status Solidi B 248, 921 (2011).
- [14] A. Maachou, B. Amrani, M. Driz, Physica B 388, 384 (2007).

## Résultats et discussion

---

- [15] M. Shoaib, G. Murtaza, R. Khenata, M. Farooq, R. Ali, *Comput. Mater. Sci.* 79, 239 (2013)
- [16] A. Benamrani, S. Daoud, P.K. Saini, *J. Nano-Electron. Phys.* 13No 1, 01008 (2021).
- [17] S. Zehar, S. Mohamadi, Etude *ab-initio* des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires  $\text{BN}_x\text{P}_{1-x}$ , Mémoire de master, Université de Bordj Bou Arreridj (2019).
- [18] S. Daoud, N. Bioud, *Ukr. J. Phys.*, 59, 418 (2014).
- [19] A. Gueddime, S. Zerroug, N. Bouarissa, *J. Luminescence.* 135, 243 (2013).
- [20] D. Cherrad, Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas de Sétif (2012)
- [21] O. Stenzel, The Kramers-Kronig Relations. In Springer Series in Surface Sciences (pp. 85–93). Cham : Springer International Publishing (2016).
- [22] V. B. Bobrov, S. A. Trigger, G. J. F. Van Heijst, P. P. J. M. Schram, *Europhysics Letters*, 90, 10003 (2010).
- [23] W.M. Yim, E.J. Stofko, R.T. Smith, *J. Appl. Phys.*, 43, 254 (1972).

# **Conclusion générale**

## Conclusion générale

---

### Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons essayé d'étudier les propriétés structurales, optiques et électroniques du semiconducteur binaire ScP à l'équilibre et sous pression de 100 GPa.

Nous avons utilisé un calcul *ab-initio* basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) combinée avec la méthode des pseudo potentiels (PP) implémenté dans le code CASTEP. Pour le traitement du terme d'échange et de corrélation, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA).

Notre étude a nécessité un bon choix de l'énergie de coupure et un suffisant points  $k$  pour l'échantillonnage de la première zone de Brillouin. La valeur de l'énergie de coupure à 400 eV était fixée pour l'ensemble de base de l'onde plane, alors que les intégrations de la zone de Brillouin sont effectuées par un ensemble de points de Monkhorst-Pack de  $(8 \times 8 \times 8)$ .

Nos valeurs de calculs de propriétés structurales (paramètre de réseau  $a_0$ , module de compressibilité  $B_0$  et sa dérivée  $B_0'$ ) sont très semblables à celles trouvées dans la littérature.

Nous avons étudié plusieurs propriétés optiques à savoir : les spectres de la fonction diélectrique, les spectres de la fonction de perte d'énergie des électrons, les spectres d'indice de réfraction, les spectres de réflectivité, ...etc. D'une manière générale, lorsque la pression de 100 GPa est appliquée, les différents spectres sont légèrement décalés vers des énergies plus grandes (ou plus petites) avec des petits changements dans les formes de ces spectres.

Notre résultat obtenu de l'étude de propriétés électroniques à pression nulle indique que le ScP est un semiconducteur, avec une valeur d'énergie de gap  $E_g = 0.11$  eV. Cette valeur est

## **Résultats et discussion**

---

relativement inférieure de la valeur expérimentale 1.1 eV. Ainsi, notre calcul confirme la règle générale que LDA sous-estime la valeur du gap d'énergie.

## Résumé

Dans ce modeste mémoire, nous avons tenté d'étudier les propriétés structurales, optiques et électroniques du semiconducteur ScP dans sa structure cubique Rocksalt. Dans ce travail, nous avons utilisé un calcul *ab-initio* basé sur la théorie de la fonctionnelle de densité. Plusieurs propriétés optiques à savoir : la fonction diélectrique, le coefficient d'absorption optique, la réflectivité optique, ...etc. sont déterminés et analysés. L'effet de la pression hydrostatique sur les propriétés précédentes est aussi discuté. Malgré notre valeur de l'énergie du gap  $E_g$  est inférieur à la valeur expérimentale de la littérature, nos valeurs des propriétés structurales sont très semblables à celles trouvées dans la littérature.

---

## Abstract

In this thesis, we have tried to study the structural, optical and electronic properties of ScP semiconductor in its structure cubic Rocksalt. In this work, we have used ab-initio calculations based on the Density Functional Theory. Several optical properties such as: the dielectric function, the optical absorption coefficient, the optical reflectivity.... etc. were determined and analyzed. Although our value of the bandgap energy  $E_g$  is lower than the experimental one, our values of the structural parameters are very closely to those found in the literature.

## ملخص

## ف

في هذه الرسالة حاولنا دراسة الخصائص التركيبية والبصرية والإلكترونية لأشباه الموصلات ScP (أنصاف النواقل) في بنيتها المكعبة Rocksalt. في هذا العمل، استخدمنا حسابات *ab-initio* بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية. عدة خواص بصرية مثل: دالة العزل، معامل الامتصاص البصري، الانعكاسية الضوئية... إلخ. تم تحديدها وتحليلها. على الرغم من أن قيمة طاقة فجوة الحزمة على سبيل المثال لدينا أقل من القيمة التجريبية، فإن قيمنا للمعلمات الهيكلية قريبة جدًا من تلك الموجودة في الأبحاث المنشورة.