



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة محمد البشير الإبراهيمي برج بوعريريج

Université Mohamed El Bachir El Ibrahimi- B.B.A.

كلية علوم الطبيعة والحياة وعلوم الارض والكون

Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie et des Sciences de la Terre et de l'Univers

قسم العلوم البيولوجية

Département des Sciences biologiques



Mémoire de fin d'études

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de master

Filière : Physique

Option : Physique des matériaux

Thème

**Etude des propriétés structurales et électroniques des
Semi-conducteurs binaires à base d'Indium de type InX ($X=N, P, As$ et Sb).**

Préparé par :

Medbough Malika

Soutenu le : 15/09/2021

Devant le Jury :

Président : Moula Baghdadi

Rapporteur1 : Bentabet Abdelouahab

Rapporteur2 : Betka Abelrahim

Examineur : Mechouma Farid

MCB

Professeur

MCB

MAA

Université de Bordj Bou Arreridj

Université de Bordj Bou Arreridj

Université de Sétif

Université de Bordj Bou Arreridj

Année universitaire : 2020/2021

Dédicace

Avec un énorme plaisir, un cœur ouvert et immense joie, que je dédie mon travail :

A mon **cher père**

A ma **chère mère**

A mes sœurs « **Aicha, Inès** »

A mon frère « **Abderrahmane** »

A toute ma **famille Medbough**

A **mes amis**

A tous qui m'ont aidé de près ou de loin

Malika Medbough

Remerciements

Le premier et le grand merci à mon dieu « **ALLAH** », qui est toujours à présent avec moi dans les moments faciles et difficiles de la vie.

Je tiens à remercier particulièrement mon encadreur « **Monsieur Bentabet Abdelouahab** » pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa rigueur et sa disponibilité durant notre préparation de ce mémoire, ses grandes compétences et ses conseils riches m'ont aidé à achever ce mémoire de master.

J'aussi remercie « **Monsieur Betka Abderrahim** » pour a fournis des conseils et de temps pour moi.

Mes remerciements vont également aux membres de jury qui ont accepté d'examiner mon mémoire.

Mes remerciements à ma famille surtout mon père, ma mère et ma petite sœur pour leurs soutien, leurs présence et leurs encouragement.

Je tiens à remercier tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.

Malika Medbouh

Sommaire

Introduction générale	1
Chapitre I : La méthode de la fonctionnelle de la densité DFT	
I.1.Introduction	2
I.2.Equation de Schrödinger (Sans spin).....	2
I.3.Approximation de Born-Oppenheimer.....	3
I.4.L'approximation de Hartree et Hartree-Fock.....	4
I.5.La théorie de la fonctionnelle de la densité DFT.....	5
I.5.1.Théorème de Hohenberg et Kohn.....	5
I.5.1.1.Premier théorème.....	5
I.5.1.2.Deuxième théorème.....	6
I.5.2.Fonctionnelle d'échange de corrélation.....	7
I.5.2.1.L'approximation de la densité locale (LDA).....	7
I.5.2.2.L'approximation de gradient généralisé (GGA).....	8
Chapitre II : Etude des propriétés structurales et électroniques des matériaux cristallins	
II.1.Introduction.....	9
II.2.Les propriétés structurales.....	9
II.2.1. Réseau de Bravais.....	10
II.2.2 La structure du matériau InX(X=N, As et Sb).....	11
II.2.3.Théorème de Bloch.....	12
II.2.4.Le réseau Réciproque.....	12
II.2.5.La zone de Brillouin	13
II.2.5.1.La zone de Brillouin de type de face centré CFC.....	14
II.3.Les propriétés électroniques.....	14
II.3.1.Structure des bandes.....	14
II.3.2.Gap direct et Gap indirect.....	15
II.4.La base des ondes planes.....	16
II.5.La DOS.....	17
II.6.Le pseudo potentiel.....	18
Chapitre III : Résultats et discussions	
III.1.Procédure de simulation.....	20
III.2.Simulation des propriétés structurales et électroniques.....	21
III.3.Etude du semi-conducteur InN.....	21

III.3.1. Les tests de convergence.....	21
a) l'énergie de coupure	21
b) Le nombre de points K.....	22
III.3.2. Les propriétés structurales d'indium d'Azote (InN).....	23
III.3.3. Les propriétés électroniques	24
III.3.3.1. Structure de bande d'énergie.....	24
III.3.3.2. DOS.....	26
III.4. Les semi-conducteurs de type InP, InAs et InSb.....	27
III.4.1. Les tests de convergence.....	27
III.4.2. Les propriétés structurales.....	27
III.4.3. Les propriétés électroniques InZ (Z=P,As, Sb).....	28
III.4.3.1. La structure de bande.....	28
III.4.3.2. DOS.....	30
Conclusion.....	33
Références Bibliographiques	34
Résumé	

Introduction Générale

La physique des matériaux est la base des applications technologiques, cette importance ne fera que progresser dans beaucoup de domaine ; comme la fabrication des matériaux avec des nouvelles propriétés constitue un domaine très actif de la recherche et de la technologie moderne [1].

La science de matériaux comporte un grand nombre de domaines comme les polymères et les semi-conducteurs, elle constitue à ce titre un domaine très actif de la recherche et technologie moderne [2, 3].

Dans notre mémoire l'étude sur les composés InX (X=N, P, As, Sb), dans la phase zinc blende, il y'a des divers utilisations de ses derniers matériaux à base de l'Indium, à partir des applications potentiels dans la réalisation et le développement des dispositifs optiques et photo électroniques [4].

Le phosphure d'indium InP par exemple depuis quelques années, ce semi-conducteur est utilisé pour fabriquer des boîtes quantiques (quantum dots) InAs/InP [5]. Ces matériaux semi-conducteurs présentent des applications comme détecteurs photoélectriques optiques, des lasers et des modulateurs. En outre, l'arséniure d'indium, matériau prometteur pour la miniaturisation des transistors [6].

Pour déterminer les propriétés électroniques et structurales de ces matériaux, nous avons utilisé un code de calcul ab initio nommé ABINIT basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Cette dernière est couplée à la méthode des pseudo-potentiels et approximativement résolue en utilisant une base des ondes planes.

Notre travail est composé de trois chapitres :

- Le premier chapitre a été consacré au cadre théorique des méthodes de premier principe d'une manière globale.
- Le deuxième chapitre présente l'étude des propriétés structurales et électroniques respectivement de nos matériaux cristallins
- le troisième chapitre vient pour détailler les procédures nécessaires de calcul après faire des discussions analytiques sur les résultats obtenues

Finalement, on termine notre travail par une conclusion générale.

Chapitre I :

La théorie de la fonctionnelle de la densité DFT

I.1.Introduction

La théorie de la fonctionnelle de la densité est une méthode basée sur la physique quantique et l'électromagnétisme, qui permet d'étudier les Structures électroniques des systèmes composés de plusieurs atomes et d'en déduire leurs propriétés physiques, tel que l'énergie totale du système utilisé comme une résolution mathématique de la mécanique quantique, donc en utilisant l'équation de **Schrödinger**.

I.2.Equation de Schrödinger (sans spin)

L'équation de **Schrödinger** est l'ensemble des études quantitatives du système quantique dans l'état stationnaire [7].

Soit un système de K noyaux de charge Z_k , et aux positions aux positions $\{R\} = R_1, \dots, R_k$ et N électrons aux positions $\{r\} = r_1, \dots, r_N$.

$$H\Psi(\{r\}, \{R\}) = E\Psi(\{r\}, \{R\}) \quad (\text{I.1})$$

H : Hamiltonien

Ψ : fonction d'onde du cristal

E : l'énergie de l'état fondamental du cristal

L'hamiltonien est un opérateur de l'énergie cinétique et du potentiel d'interaction, décrit comme suit :

$$H = T_n + T_e + V_{enu} + V_{nn} + V_{ee} \quad (\text{I.2})$$

$$T_e = - \sum_{i=1}^k \frac{\Delta_i}{2m_i} \quad (\text{l'énergie cinétique des électrons}) \quad ,$$

$$T_n = - \sum_{i=1}^N \frac{\Delta_i}{2} \quad (\text{l'énergie cinétique des noyaux})$$

$$V_{e-n} = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^K \frac{Z_i Z_j}{|r_i - R_j|} \quad (\text{Interaction répulsive noyau-électron})$$

$$V_{n-n} = \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \frac{Z_i Z_j}{|R_i - R_j|} \quad (\text{Interaction répulsive noyau-noyau})$$

$$V_{e-e} = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (\text{Interaction répulsive électron-électron})$$

r_i, r_j Définissent les positions des électrons

R_i, R_j Définissent les positions des noyaux

Z_i, Z_j Sont les nombres atomiques des noyaux n

Donc l'équation de **Schrödinger** (I.2) contient $3(Z+1)K$ variables, K étant le nombre d'atomes du cristal [8].

Alors la solution est considérée comme impossible sauf par approximation [9].

I.3.Approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer consiste à traiter de manière Semi-classique l'équation de **Schrödinger** associé à une molécule en utilisant la petitesse du rapport de masse entre électrons et noyaux. Dans cette approximation les particules incidentes et diffusées sont représentées par des ondes planes [10].

On peut dire que le mouvement des noyaux par rapport aux électrons peut être négligé car la masse d'un noyau quelconque est supérieure à celle de l'électron (les noyaux sont très lourds par rapport à ceux des électrons) d'après Born et Oppenheimer [11].

Alors l'hamiltonien total devient comme suit :

$$H_e = T_e + V_{ee} + V \quad (\text{I.3})$$

Donc l'équation de **Schrödinger** des électrons est :

$$H\Psi(R_n, r_n) = [T_e + T_N + V_{e-e} + V_{e-N}]\Psi(R_n, r_n) \quad (\text{I.4})$$

La difficulté à résoudre cette équation nous impose de faire appel à des autres approximations.

I.4.L'approximation de Hartree et Hartree-Fock

En physique et chimie numérique, la méthode de **Hartree-Fock** est une méthode de résolutions approchée de l'équation de **Schrödinger** d'un système quantique à N corps, à partir de fonction d'onde et l'énergie du niveau fondamental stationnaire.

$$H_e = \sum_i^{N_e} H_i \quad (I.5)$$

$$H_i \psi_i = E_i \psi_i \quad (I.6)$$

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + u_i(\mathbf{r}) + V_i \quad (I.7)$$

* $u_i(\mathbf{r}_i)$: l'énergie potentielle des électrons dans le champ des noyaux

* $V_i(\mathbf{r}_i)$: le potentiel efficace de Hartree

Le potentiel efficace est comme suit :

$$V_{\text{eff}} = V_H(\mathbf{r}_i) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) \quad (I.8)$$

On remplace dans l'équation de **Schrödinger**, elle devient comme suit :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}_i) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i \quad (I.9)$$

Quand l'équation de Hartree ne tient pas compte le principe de Pauli, donc si on dire l'intervention sur le principe de Pauli on aboutit l'équation de **Hartree-Fock** [12].

A partir le déterminant de Slater :

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \phi_2(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_n(\mathbf{r}_1) \\ \phi_1(\mathbf{r}_2) & \phi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_n(\mathbf{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\mathbf{r}_n) & \phi_2(\mathbf{r}_n) & \dots & \phi_n(\mathbf{r}_n) \end{vmatrix} \quad (I.10)$$

où $\frac{1}{\sqrt{n!}}$: est la constante de normalisation

Toutefois, ces approximations conduisent à des résultats qui ne sont pas toujours satisfaisants. Pour résoudre le système d'équation obtenue par ces approximations, plusieurs méthodes de résolutions peuvent être appliquées pour obtenir les états électroniques du cristal [13].

I.5.La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Le principe fondamental de cette théorie est que; toutes les propriétés d'un système à plusieurs particules en interaction peuvent être considérées comme une fonctionnelle de la densité de l'état fondamental [14].

La DFT a été à l'origine principalement développée dans le cadre de la théorie quantique non-relativiste, à la fin des années 1920 cette théorie trouve ses origines dans le modèle développé par **Lielwellyn Thomas** et **Enrico Fermi**, mais au milieu des années 1960 et les contributions de **Pierre Hohenberg**, **Walter Kohn** et **LuSham** pour que soit établi le formalisme théorique sur lequel repose la méthode actuelle, qui établissent une relation fonctionnelle entre l'énergie de l'état fondamentale et sa densité électronique,

Les deux théorèmes montrent l'existence d'une fonctionnelle de la densité qui permet de calculer l'énergie de l'état fondamental d'un système [15].

I.5.1.La théorème de Hohenberg et Kohn

Soit l'hamiltonien :

$$H = T_e + V_{ee} + V_{ext} \quad (I.11)$$

Le potentiel externe ;

$$V_{ext} = \sum_i u(ri) . \quad (I.12)$$

Le potentiel externe est déterminé à une constante près par la densité électronique de l'état fondamental.

La théorie fondamentale de Hohenberg-Kohn est basée sur deux théorèmes :

I.5.1.1.Premier Théorème

Si le potentiel externe n'est pas déterminé la densité électronique de l'état fondamental, alors on peut trouver deux potentiels différents V_{ext} et V'_{ext} qui donnent la même densité Electronique $n(r)$.

$$V_{ext} \rightarrow H, \Psi, E_0 = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (I.13)$$

$$V'_{ext} \rightarrow H', \Psi', E'_0 = \langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle \quad (I.14)$$

A partir du principe vibrationnel on peut écrire alors :

Prenant Ψ' comme fonction d'essai pour \mathbf{H} , et Ψ comme fonction d'essai pour \mathbf{H}'

$$E_0 = \langle \Psi' | \mathbf{H} | \Psi' \rangle = \langle \Psi' | \mathbf{H}' | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | \mathbf{H} - \mathbf{H}' | \Psi' \rangle = E'_0 + \langle \Psi' | V_{\text{ext}} - V'_{\text{ex}} | \Psi' \rangle \quad (\text{I.15})$$

$$E'_0 = \langle \Psi | \mathbf{H}' | \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \mathbf{H}' - \mathbf{H} | \Psi \rangle = E_0 + \langle \Psi | V'_{\text{ext}} - V_{\text{ex}} | \Psi \rangle \quad (\text{I.16})$$

En prenant la somme des intégralités :

$$0 < \int [V_{\text{ext}}(r) - V'_{\text{ext}}(r)] [n'_0(r) - n_0(r)] dr \quad (\text{I.17})$$

*Si $n(r) = n'(r)$ alors; $0 < 0$ ce qui est faux.

1.5.1.2 Deuxième Théorème

L'énergie fondamentale est minimale par rapport à la densité avec un potentiel externe V_{ext} , et cette dernière densité minimise d'autre côté la fonctionnelle universelle est la densité fondamentale exacte c'est le principe variationnel qu'on doit utiliser pour vérifier :

$$E = \min E(n) \quad (\text{I.18})$$

$$E(n) = \langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle \quad (\text{I.19})$$

$$E(n) = F_{\text{H,K}}(n) + \int [V_{\text{ext}}(r) n(r) dr] \quad (\text{I.20})$$

$$F_{\text{H,K}}(n) = \langle \Psi | \mathbf{T} + \mathbf{U} | \Psi \rangle \quad (\text{I.21})$$

En utilisant l'approximation de Hartree on trouve :

$$F_{\text{H,K}}(n) = \frac{1}{2} \iint 2 \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' + G(n) \quad (\text{I.22})$$

Les conditions de stabilité ont été dérivées pour les coefficients fonctionnels de la densité de **Kohn-Sham** liée, en étroite analogie avec la méthode de **Hartree-Fock** [16], donc les équations de **Kohn-Sham** rendent la DFT comme un outil pratique pour la résolution de l'équation de **Schrödinger** [17].

Aussi ces équations ont utilisé le principe variationnel, tel que l'énergie totale de l'électron et l'énergie de **Hartree**.

$$E_e = T + V \quad (I.23)$$

$$E_{H,K} = T_0 + (V_H + V_X) \quad (I.24)$$

$$V_X = V - V_H \quad (I.25)$$

$$V_c = T - T_0 \quad (I.26)$$

Alors la fonction s'écrit comme suit :

$$F_{H,K} = T + V + T_0 - T_0 = T + V_H + (V_X + V_C) \quad (I.27)$$

$$H_s \phi_i(r) = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(r) \right] \phi_i(r) = \epsilon_i \phi_i(r) \quad (I.28)$$

La densité est donnée par :

$$n(r) = \sum_{i=1}^n |\phi_i(r)|^2 \quad (I.29)$$

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ext}}(r) + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} d^3r' + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} \quad (I.30)$$

Avec
$$V_{xc} = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)}$$

$V_x(r)$: est le potentiel de corrélation d'échange.

I.5.3.Fonctionnelle D'échange et corrélation

I.5.3.1.L'approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité locale repose sur le principe de la négligence de l'effet des variations locales de la densité électronique sur l'énergie d'échange et corrélation, alors cette énergie est écrite comme suit :

$$E_{xc}^{\text{LDA}}[n] = \int n(r) \epsilon_{xc}[n(r)] d^3r = E_x n(r) + E_c n(r) \quad (I.31)$$

Par utilisation le principe de Spin :

$$E_{xc}^{\text{LDA}}(n\uparrow, n\downarrow) = \int n(r) \epsilon_{xc}(n\uparrow, n\downarrow) dr \quad (I.32)$$

Elle s'écrit aussi :

$$E_{xc}^{\text{LDA}}[n] = E_x n(r) + E_c n(r) \quad (I.33)$$

Où :

→ $E_{xc}^{LDA} [n]$: est l'énergie d'échange-corrélation par article d'un gaz électronique uniforme de densité n [18]

→ E_x : l'énergie d'échange

→ E_c : l'énergie de corrélation

La partie d'échange est élémentaire et donnée, dans les unités d'atome, par :

$$E_x = - \frac{0.458}{r_s} \quad (I.34)$$

Où ; r_s est le rayon d'une sphère contenant un électron et donné par

$$r_s = \left(\frac{4\pi}{3}\right) r_s^3 = n^{-1} \quad (I.35)$$

Et la partie de corrélation donnée par :

$$E_c = - \frac{0.44}{r_s + 7.8} \quad (\text{a d'abord été estimé par E.P.Wigner}) [19].$$

1.5.3.2.L'approximation de gradient généralisé GGA):

Dans cette approximation, le gradient de la densité $\nabla n(\mathbf{r})$ est introduit afin de rendre compte de la non homogénéité de la densité électronique réelle [20] , l'approximation de gradient généralisé est basée sur les corrections du **LDA** à partir les variations locales de la densité $n(\mathbf{r})$ à travers de son gradient [21] L'énergie d'échange de corrélation (GGA) est donnée par :

$$E_{xc}^{GGA} = \int \varepsilon_{EX} [n(\mathbf{r}), \nabla n(\mathbf{r})] n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (I.36)$$

Il y'a pas malles des formes de cette énergie, les plus utilisables sont celles introduites par Becke [22] , Perdew et Wang [23] ,et Burke et Ernzerhof [24].

Dans la figure suivante on a présenté les schémas d'un calcul ab initio en utilisant la DFT.

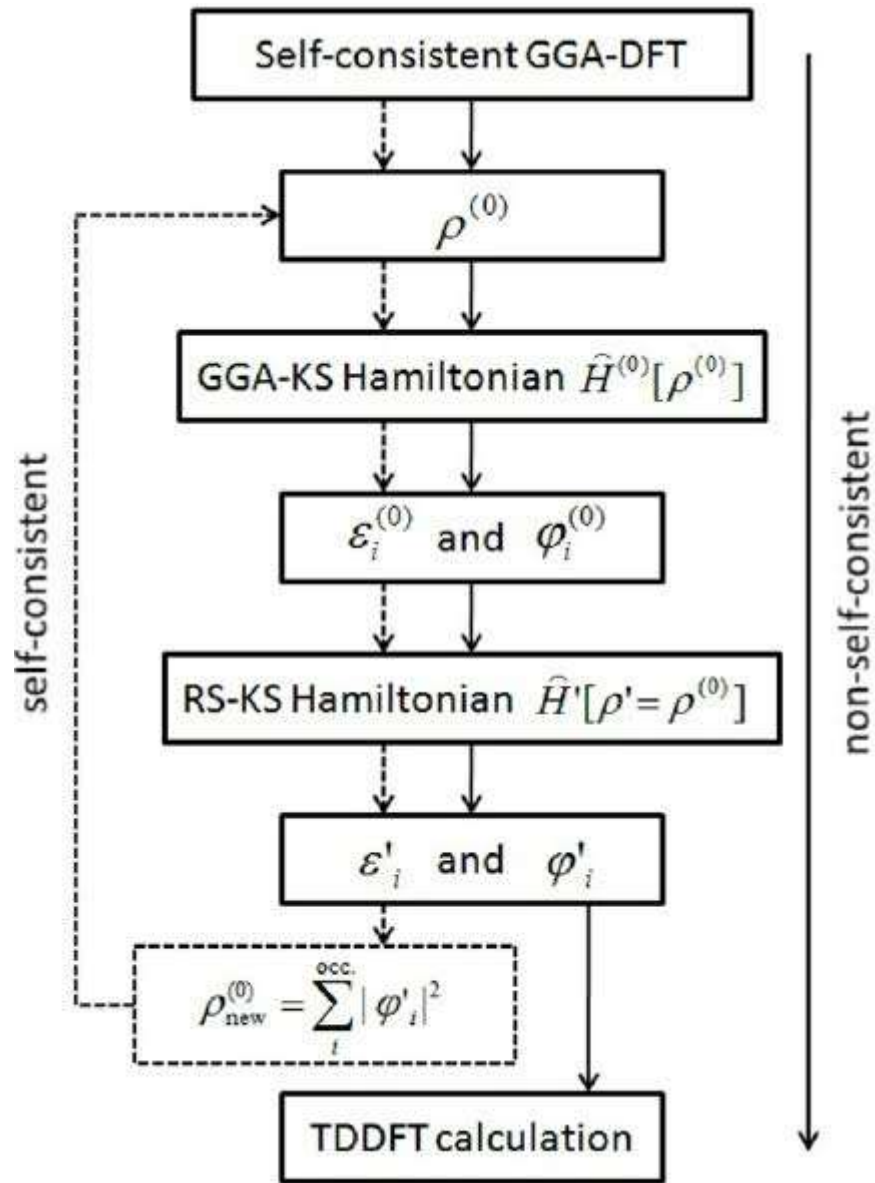


Figure .I.1 Le schéma des calculs auto cohérent de la fonctionnelle de la densité

Chapitre II

Etude des propriétés structurales et électroniques des matériaux cristallins.

II.1.Introduction :

Les différents types des métaux sont très utilisés dans notre vie quotidienne, leurs classement dépend certaines propriétés, dans ce chapitre on va faire l'étude sur les propriétés électroniques et structurales de Inx comme un **semi-conducteur**.

II.2.Les propriétés structurales :

Un cristal est un arrangement périodique tridimensionnel d'atomes, ce qui nous donne des propriétés physiques (structurales, électroniques, optiques, mécaniques...) bien précises par rapport à l'atome du cœur de ce cristal [25].

La stabilité de l'atome est assuré par certain couche électronique périphérique, si elle comporte 8 électrons (le cas des semi-conducteurs) on peut dire qu'elle est complète et saturée.

Réseau + Motif= Structure cristalline

Le réseau est défini par 3 Vecteurs de translation fondamentaux (ou primitifs) :

$$\mathbf{R}^{\rightarrow} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z} \quad (\text{II.1})$$

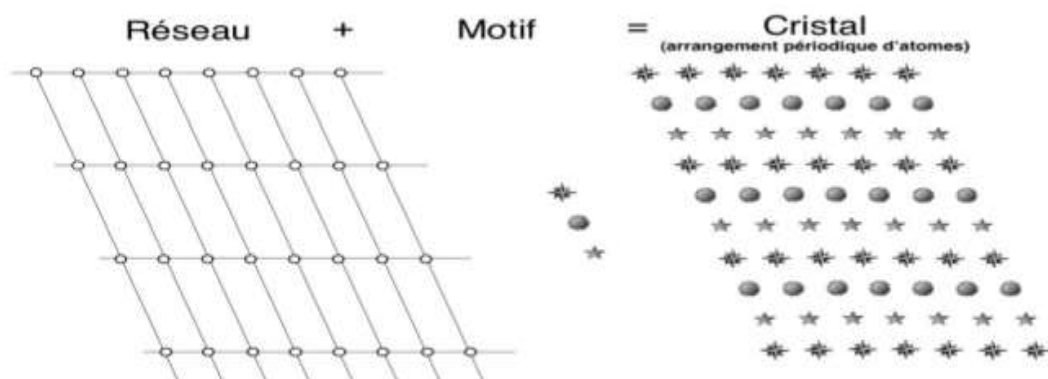


Figure II.1 : Schéma d'un cristal

II.2.1. Réseau de Bravais :

Bravais généralise les notions de motif atomique, de maille et de réseau, il simplifié la définition du réseau cristallin d’après le principe qui dis que :

Dans les corps cristallisés les molécules sont disposées en files rectilignes et que les centres de figures sont équidistants entre eux sur chacune de ces files ...on obtient que j’ai appelé un assemblage de points ou système réticulaire. [26]

En cristallographie, il existe une classification des cristaux selon leurs propriétés de symétrie en 14 réseaux de Bravais .**Figure. II.3**

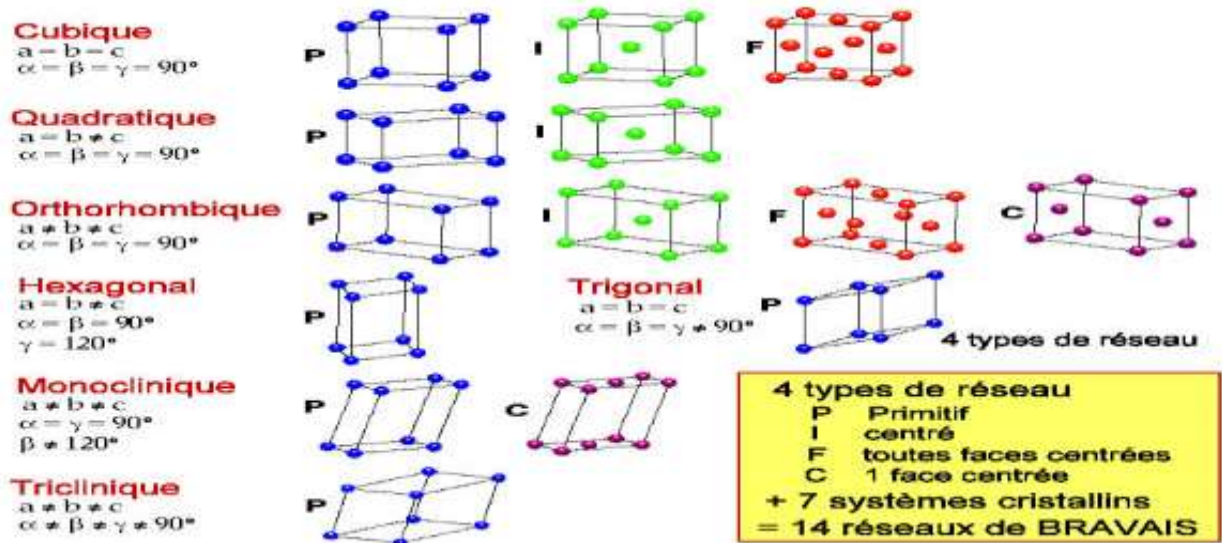


Figure II.2 :Les 14 réseaux de bravais

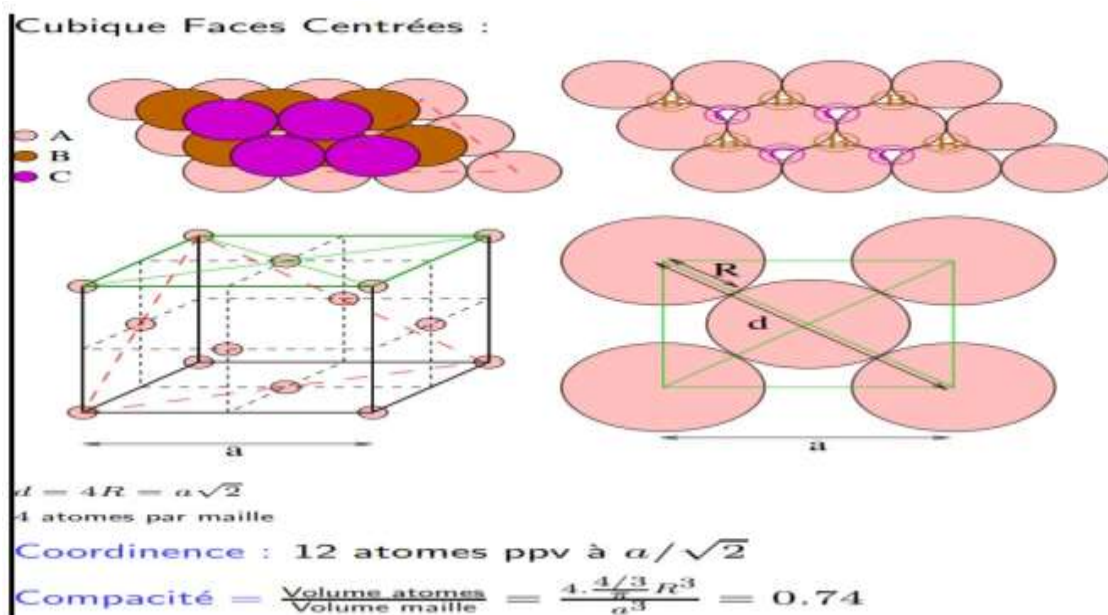


Figure II.3 : Structure Cubique Faces Centrées

II.2.2. La structure du matériau InX (X=N, P, As et Sb):

La structure des semi-conducteurs InX est semblable à celle du diamant et la structure du **Zinc Blende Figure II.1**, donc la structure du matériau InX est une forme centrée dérivée du cristal cubique à face centré (CFC).

Chaque atome va prendre une position centrale régulier sur les tétraèdres et l'autre atome de l'autre espèce va occupée les sommets [27] ; la maille d'un cristal CFC dont quatre des 8 sites tétraédriques sont occupés ;c-à-d 2 dans la moitié basse du cube ,suivant une petite diagonale, et 2 dans la moitié haute ,suivant l'autre petite diagonale. **Figure II.3**.

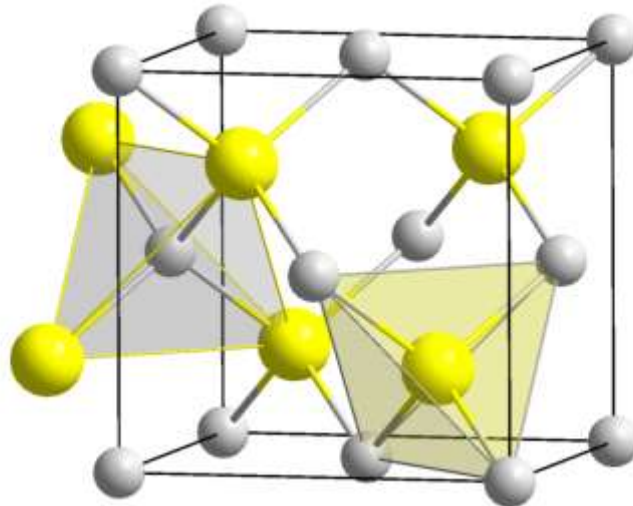


Figure. II.4:Structure cristalline du Zinc Blende

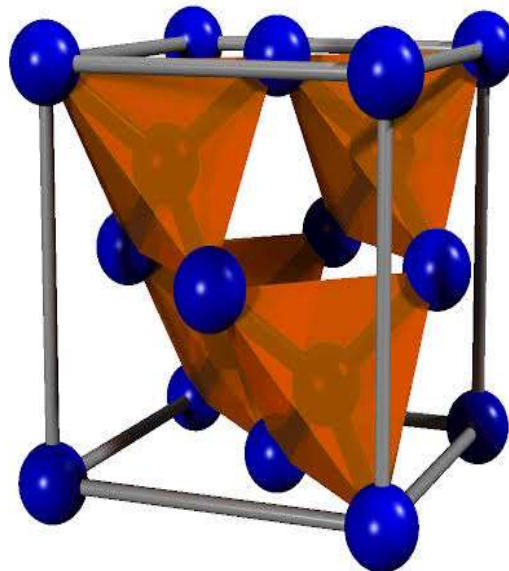


Figure II.5 :Structure diamant (CFC)

II.2.3. Théorème de Bloch

Le théorème de Bloch permet d'obtenir les états propres d'énergie d'un électron dans ce réseau, d'après Bloch ; les solutions de l'équation de Schrödinger sont sous la forme de ce produit :

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r}) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II.2})$$

$$\text{Avec : } u_i = u_i(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (\text{II.3})$$

Tel que $u_i(\mathbf{r})$: c'est une onde plane

On prend en compte la périodicité du cristal pour mieux décrire précisément les propriétés électroniques de ce cristal [28].

L'objectif de cette théorème est de connaître Ψ sur la maille élémentaire du cristal, et les vecteurs \mathbf{k} et les ondes \mathbf{u} sont appelés respectivement les vecteurs de Bloch et les ondes de Bloch[29].

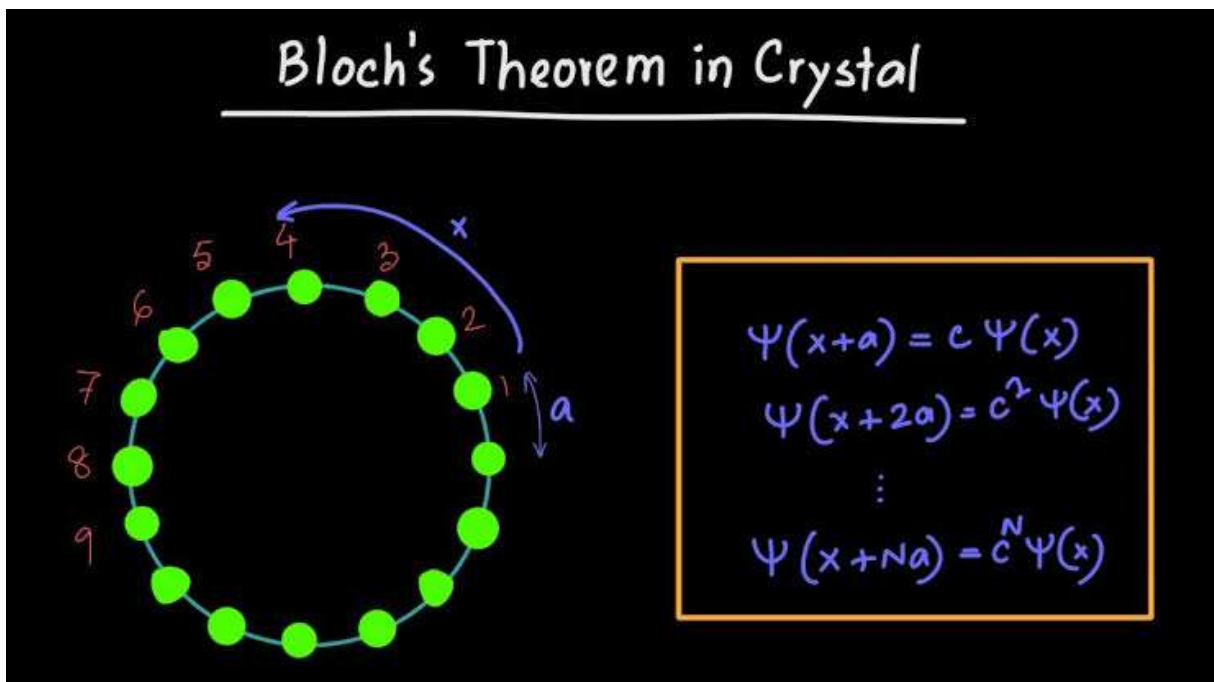


Figure II.6: Le théorème de Bloch dans les cristaux

II.2.4. Le réseau réciproque

Alors maintenant on peut parler sur le **réseau réciproque** d'après une définition générale du réseau cristallin qui est basé sur la périodicité triple du cristal [30], donc le réseau réciproque est l'ensemble des interactions entre les cristal et la sonde extérieure représenté par la variation des fréquences de vibration du cristal.

Par définition mathématique du réseau réciproque, a toute famille de plans (hkl) correspond nœud noté hkl est un vecteur du RR noté G_{hkl} ou G_{hkl}^* défini par suit :

$$G_{hkl} = G^*_{hkl} = h a^* + k b^* + l c^* \quad (\text{II.4})$$

$G_{hkl} \perp$ à tous les plans de la famille (hkl)

La distance interarticulaire d'une famille de plans (hkl) est égale à l'inverse de la norme du vecteur du RR correspondant :

$$D_{hkl} = |G^*_{hkl}|^{-1} \quad (\text{II.5})$$

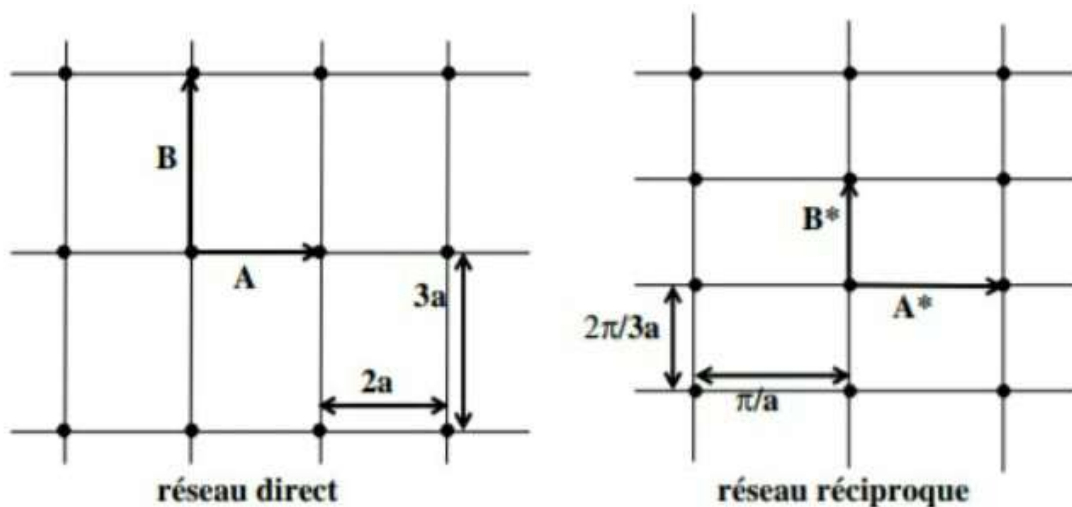


Figure II.7: exemple de réseau réciproque

Remarques

Il n'y a pas d'atomes dans le réseau réciproque, c'est un ensemble des points.

Deux cristaux de même réseau direct avec des motifs différents ont le même réseau réciproque.

La dimension du réseau direct est homogène à une longueur (L) et celle du réseau réciproque est homogène à l'inverse de cette longueur (L^{-1}).

II.2.5. La zone de Brillouin

La zone de Brillouin est l'équivalent de la maille élémentaire de Wigner Seitz dans le réseau réciproque. La première zone de Brillouin d'un atome représente le minimal volume délimité par des surfaces issues de l'ensemble des points équidistants de l'atome et de ses plus proches voisins [31]. Elle joue le rôle de la description des ondes de Bloch dans un milieu périodique

II.2.5.1. Zone de Brillouin de type cubique de face centrée CFC

Et quand notre matériau a une structure CFC, on peut spécialise l'étude sur cette zone dans le cas de structure CFC tel que :

Les vecteurs primitifs du réseau direct sont :

$$a_1 = \frac{a}{2} (1.1.1)$$

$$a_2 = \frac{a}{2} (-1.1.1)$$

$$a_3 = \frac{a}{2} (-1.-1.1)$$

Les vecteurs de réseau réciproques sont :

$$a_1^* = \frac{2\pi}{a} (1.0.1)$$

$$a_2^* = \frac{2\pi}{a} (-1.1.0)$$

$$a_3^* = \frac{2\pi}{a} (0.-1.1)$$

a : le paramètre de maille

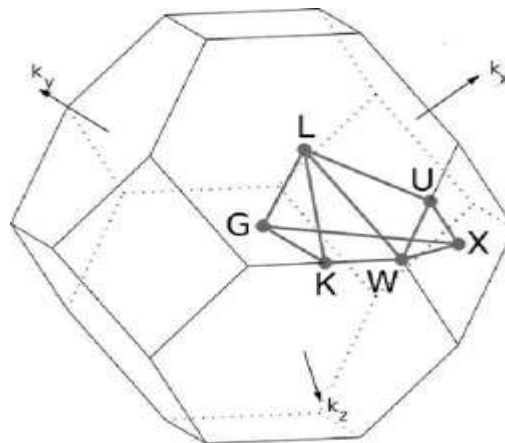


Figure II.8 : Première zone de Brillouin du réseau CFC

II.3 les propriétés électroniques

II.3.1. Structure des bandes

La théorie des bandes est l'explication des différences comportements entes les différents matériaux, c'est la modélisation des valeurs d'énergies permises pour faciliter l'occupation des électrons dans un solide dans certains intervalles qui sont séparées par d'autres qui basées sur l'interdiction de l'occupation (dites interdites) ou le Gap [32].

Dans ce modèle d'énergie, un électron dans un solide forme des bandes permises, séparées par d'autres bandes appelées bande d'énergies interdites ou GAP, tel que ce Gap besoin une énergie nécessaire pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

Pour les semi-conducteurs, On distingue alors :

Bande de valence : c'est la dernière bande énergétique permise remplie (BV).

Bande de conduction : c'est la première bande énergétique permise vide (BC).

Bande interdite : c'est la bande qui sépare entre la BV et BC ,dite aussi le Gap interdit.

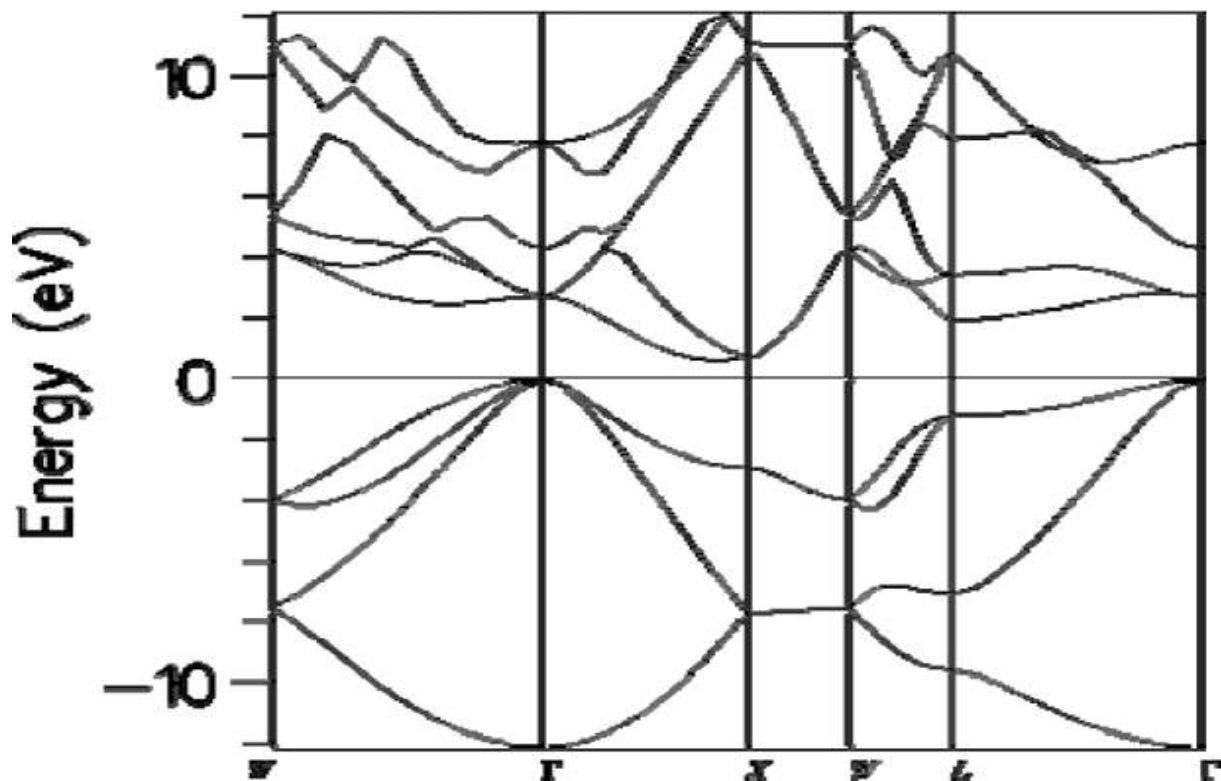


Figure II.9 : Structure de bande d'énergie réelle d'un semi-conducteur

II.3.2. Gap direct et gap indirect :

Le Gap est la largeur de la bande interdite ; c-à-d : la différence d'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence.

On distingue deux types de semi-conducteurs :

⇒ **Semi-conducteur a 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.

⇒ **Semi-conducteur a gap indirect :** si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent ne correspondre pas au même vecteur d'onde K.

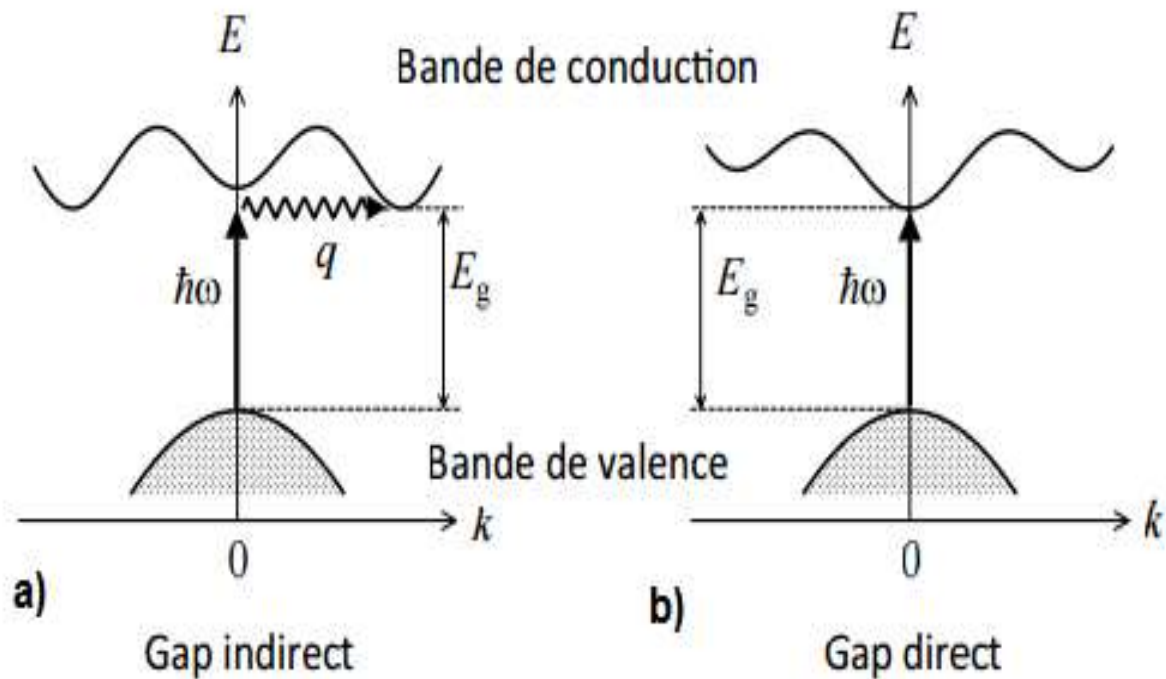


Figure .II.10 : Schéma de Gap direct (a) et indirect (b).

II.4.La base des ondes planes :

La méthode des ondes plane orthogonalisées (O.P.W) fut mise au point par Herring en (1940)[33], elle est utilisée pour la détermination des structures de bandes des semi-conducteurs, des isolants et des métaux.

D'après le théorème de Bloch, utilisant une base discrète d'ondes planes afin de représenter une fonction d'onde en chaque point K , ces procédures sont basées sur le besoin d'un très grand nombre d'ondes planes.

Le problème le plus connue dans le développement de la fonction d'onde plane est la convergence ; c-à-d l'importance du nombre des ondes planes est proportionnelle aux états localisés.

Si $L \rightarrow$ désigne un vecteur du réseau cristallin, le potentiel $V_{\text{eff}}(\mathbf{r} \rightarrow)$, la densité électronique $\rho(\mathbf{r} \rightarrow)$ et les fonctions d'ondes $\psi(\mathbf{r} \rightarrow)$

D'après l'application d'invariance par symétrie de translation aux solutions des équations de Kohn-Sham permet d'écrire les fonctions d'ondes ψ_i sous forme de fonction de Bloch [34] :

$$\psi_i(\mathbf{r} \rightarrow) = f(\mathbf{r} \rightarrow) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tag{II.6}$$

Où k est un vecteur d'onde de la 1^{ère} zone de Brillouin.

La fonction périodique $f_i(\mathbf{r} \rightarrow)$ peut être écrit comme suite :

$$f_i(\mathbf{r} \rightarrow) = \sum C_{i,G} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \tag{II.7}$$

On peut écrire la fonction d'onde ψ_i comme une somme d'ondes planes :

$$\psi_i(\mathbf{r} \rightarrow) = \sum C_{i,\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{II.8})$$

Les calculs de cette méthode ont les retrouvent dans de nombreux codes comme : **ABINIT** , la résolution des équations de **Kohn-Sham** en base d'ondes planes , cette méthode employée devrait être infinie et les ondes planes étant des fonctions propres de l'opérateur énergie cinétique. Tel que, les coefficients $C_{i,\mathbf{k}+\mathbf{p}}$ pour les ondes planes de petite énergie cinétique

$\frac{\hbar}{2me} |\mathbf{k}+\mathbf{G}|$ sont plus importantes que ceux associés aux ondes planes avec grande énergie cinétique [35]

On peut écrire :

$$\frac{\hbar}{2me} |\mathbf{k}+\mathbf{G}| < E_{\text{cut}} \quad (\text{II.9})$$

L'énergie cinétique doit être augmentée jusqu'à ce que l'énergie totale converge, ce qui signifie que le choix de E_{cut} détermine le degré d'exactitude du calcul.

Qui impose l'expression suivant pour le nombre d'ondes planes :

$$N_{\text{pw}} = N_k \times \frac{1}{2} \Omega E_{\text{cut}}^{3/2} \quad (\text{II.10})$$

N_k : est le nombre de vecteur K

Ω : le volume de la cellule de simulation

E_{cut} : l'énergie de coupure

N_{pw} : le nombre d'onde plane

II.5.La densité d'états électronique DOS :

En physique du solide, la densité d'états électronique, (en anglais Density Of States), ou DOS, notée par g , p , n ou N , elle quantifiée le nombre d'états électroniques par rapport une certaine valeur d'énergie donnée dans un matériau.

Malgré la généralisation de la DOS des plusieurs systèmes, les calculs DFT ne permettent pas de connaître facilement la DOS, donc on spécialise les études sur les niveaux d'énergies associés aux orbitales de Kohn-Sham et pas de parler de structure de bande [36].

On définit la densité d'états $N(E)$ par le fait que $N(E) dE$ est le nombre d'états électroniques disponibles, avec une énergie comprise entre E et $E+dE$, par unité de volume du solide ou par maille élémentaire du cristal étudié.

La DOS s'écrit dans le cas d'un système de 3 dimensions comme suite :

$$D(E) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(k, E) \quad (\text{II.11})$$

La DFT permet d'obtenir une bonne approximation de la DOS pour de nombreux matériaux.

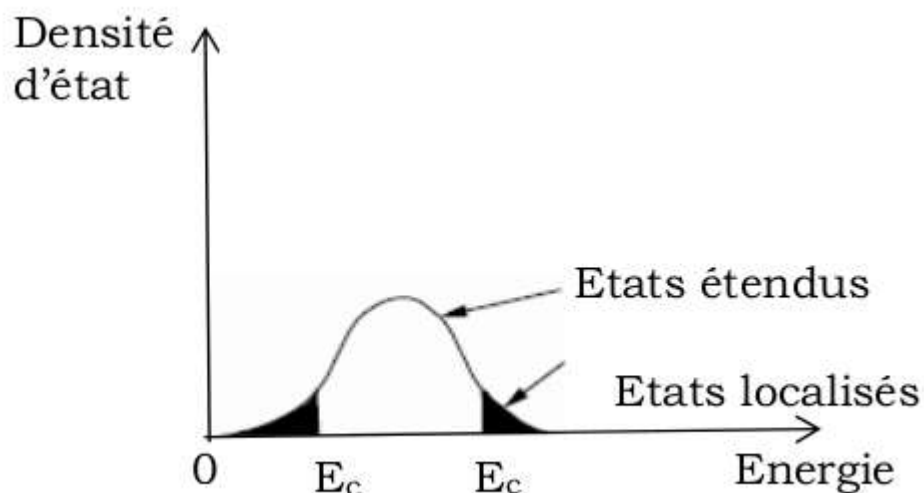


Figure II.11: Densité d'état dans un semi-conducteur.

Les états localisés : ce sont les états qui peuplent la bande interdite.

Les états non localisés : ce sont les états dans la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC).

II.6. Le pseudo Potentiel

Un pseudo potentiel est un outil puissant qui permet de modéliser l'ensemble (noyau + tous les électrons), tel que les électrons de valence dans cette méthode sont composés du potentiel du noyau et des électrons de cœur [37], donc généralement elle utilise une description quantique pour les interactions électroniques dans le cadre de la **DFT**. L'efficacité de cette méthode a été démontré à partir

de l'étude de plusieurs types de matériaux ; elle basé sur des résultats raisonnables et rapide pour la simulation des matériaux [38].

Il faut calculer une fonction d'onde pour chaque électron parmi un nombre infini dans le système (dans le cas des interactions des nombre infini des électrons ou d'ions dans un potentiel statique), ça qui nous obligent à appliquant le théorème de Bloch à la fonction d'onde électronique.

Ce qui va nous conduire à utiliser une base d'ondes planes et la technique des points spéciaux dans l'espace réciproque spontanément [39]

Cette approximation a des avantages dans le cadre théorique de la structure électronique de la matière,puisque elle est basé sur l'importance du gain qui explicité par les électrons de valence dans les ressources informatiques nécessaires aux calculs [40]

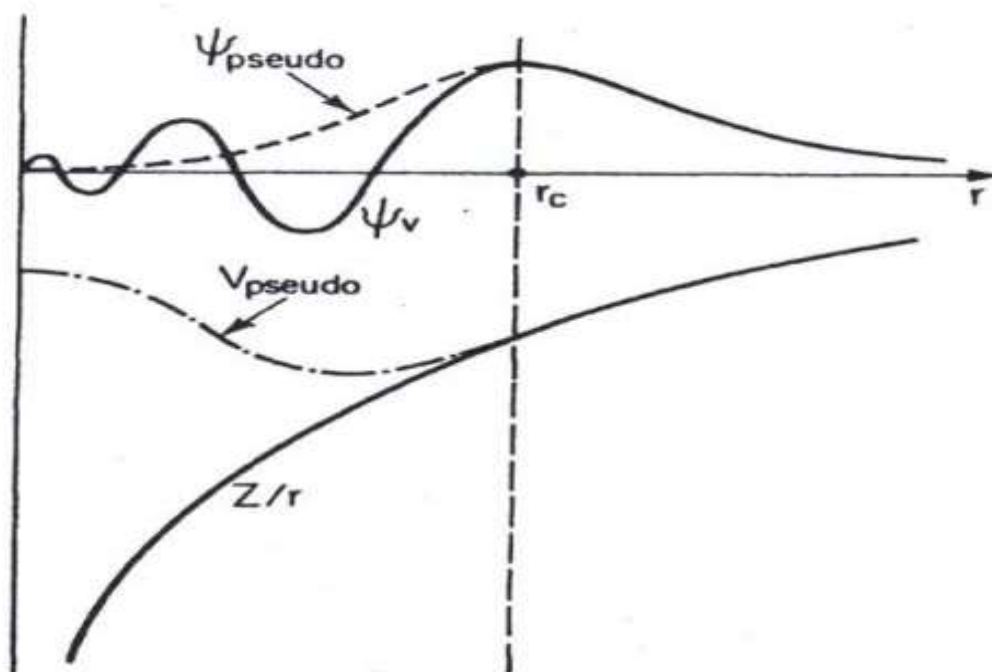


Figure II.12 : Pseudisation des fonctions d'ondes du valence du potentiel

Chapitre III

Résultats et Discussions

III.1. PROCEDURE DE SIMULATION

Nos calculs consistent à étudier les propriétés électroniques et structurales des composés **InN**, **InP**, **InAs** et **InSb** en utilisant le code **ABINIT**. Ce dernier est un logiciel qui utilise la DFT en se basant sur la méthode du pseudo-potentielle et la base d'ondes planes. L'Abinit a été développé par Xavier Gonze et Jean-Michel Beuken [41]. En outre, il présente les résultats du système périodique par cellule avec des conditions aux limites bien précises.

L'utilisateur de ce code doit tout d'abord effectuer des tests de convergence avant de commencer aucun calcul quoi que ce soit.

Les fichiers utilisés par le code ABINIT, en général, sont comme suit :

Fichier. files : le fichier le plus nécessaire car il joue le rôle de fichier principale par rapport les autres fichiers (il fait appel à tous les fichiers nécessaires pour faire le calcul)

Fichier.in : c'est le fichier d'entrée (input files)

Fichier exécutable : c'est le fichier responsable sur l'exécution de calcul sur l'invite de commande (abinis.exe, optic.exe, annadb.exe, ...)

Fichier pseudo-potentiel : chaque atome a un pseudo-potentiel bien spécifique. Les approximations LDA et GGA sont incorporées dans ce fichier.

La figure suivante résume le chemin d'un calcul ab initio en utilisant ce code.

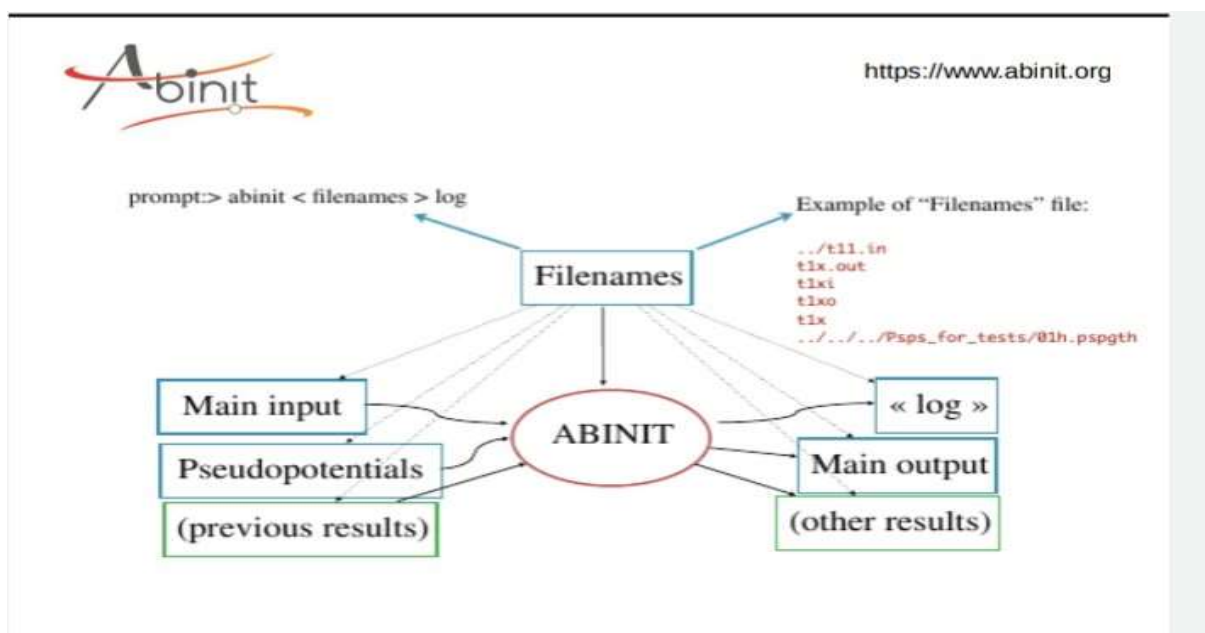


Figure (III.1) : schémas du code ABINIT [1]

Les calculs de notre travail commencent par l'assurance de la stabilité du code ABINIT qui doit respecter la convergence des paramètres suivants:

- Le nombre des points k du maillage de la zone de Brillouin (notée dans le code Abinit par l'instruction `ngkpt`). Le nombre de points k désigné par `ngkpt` est pris en compte dans l'intégration à travers de la 1^{ère} zone de Brillouin.
- Le nombre d'ondes planes lié à l'énergie de coupure (notée dans le code Abinit par l'instruction `Ecut`) est utilisé dans le développement des fonctions d'ondes électroniques. L'énergie de coupure ou Cut-off energy est une valeur arbitraire maximale de l'énergie cinétique minimisant l'énergie totale du système. En effet, elle délimite le nombre des fonctions d'ondes planes de la base.
- Le paramètre de maille d'équilibre du réseau direct (notée dans le code Abinit par l'instruction `acell`).
- Sans oublier que l'atteinte des 6 chiffres après la virgule de la valeur de l'énergie totale est nécessaire.

III.2. SIMULATION DES PROPRETES STRUCTURALES ET ELECTRONIQUES

Les semi-conducteurs III-V binaires à base de l'indium « *In* » sont souvent des cristaux qui sont stable dans la phase « Zinc Blende ». Donc, dans la suite de notre travail, toutes les propriétés de nos matériaux *InX* ($X=N, P, As$ et Sb) en question sont étudiées dans cette structure cristallographique.

On a commencé tout d'abord par une étude détaillé sur l'indium d'azote (*InN*) puis nous avons étudié le reste des matériaux en suivant la même procédure de calcul et d'interprétation des résultats obtenus.

III.3.1. ETUDE DU SEMI CONDUCTEUR *InN*

III.3.1.1. Les tests de convergence

a) L'énergie de coupure

On sait qu'il y'a une proportionnalité entre le temps d'exécution et le nombre des ondes planes utilisées dans les calculs, ce qui implique que l'énergie de coupure (`Ecut`) doit être bien déterminée pour obtenir des résultats précis.

Nous avons calculé l'énergie totale du système en fonction de l'énergie de coupure (`Ecut`) de 20 à 160 eV avec un pas de 10 Ha.

Cette variation est représentée sur la **figure III.2**.

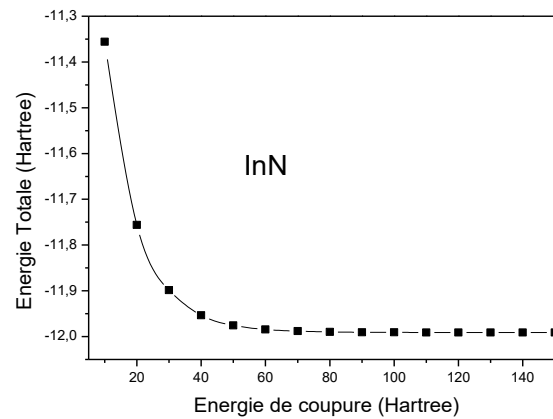


Figure III.2: La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure

D'après la **figure III.2** on note que : lorsque l'énergie de coupure augmente, l'énergie totale diminue rapidement puis elle devient presque constante à partir de la valeur de 140 Hartree

Donc il est raisonnable de choisir la valeur $E_{cut}=150$ Hartree comme énergie de coupure dans le cas de l'indium d'azote InN pour bien rassurer la convergence.

b) Le nombre de points K

Le calcul se fait de la même façon précédente dans le cas de l'énergie de coupure où on a utilisé les mêmes fichiers mais avec la nouvelle valeur $E_{cut} = 150$ Ha et on a varié le nombre de points K.

Le tableau (III.1) et la figure (III.3) résument nos résultats de l'énergie totale en fonction du nombre de points k utilisé dans le maillage de la 1^{ère} zone de Brillouin.

Tableau (III.1) : L'énergie totale en fonction du nombre de points k.

Nombre de points K		Energie totale (Hartree)	
2	2	2	- 1 . 1 9 8 8 9 1 2 8 2 3 E + 0 1
3	3	3	- 1 . 1 9 9 0 8 5 4 0 2 4 E + 0 1
4	4	4	- 1 . 1 9 9 1 0 2 6 2 0 1 E + 0 1
5	5	5	- 1 . 1 9 9 1 0 5 4 1 1 4 E + 0 1
6	6	6	- 1 . 1 9 9 1 0 6 1 1 9 8 E + 0 1
7	7	7	- 1 . 1 9 9 1 0 6 3 6 9 7 E + 0 1
8	8	8	- 1 . 1 9 9 1 0 6 4 7 8 9 E + 0 1

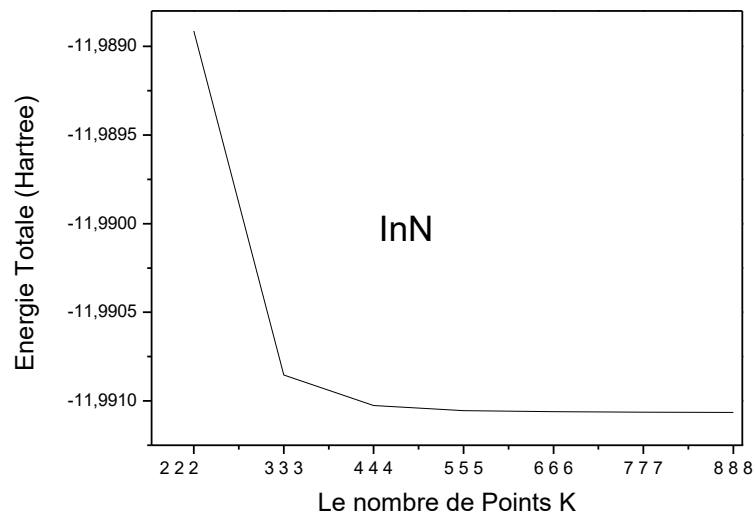


Figure III.3 : La variation de l'énergie totale en fonction de nombre de points K.

D'après la figure (III.3) on voit bien que l'énergie totale décroît avec le nombre de point k et devient presque constante à partir du nombre $7 \times 7 \times 7$, c.-à-d. elle atteint la précision 10^{-6}

Pour bien rassurer la précision de nos calculs on a pris $ngkpt = 8 \times 8 \times 8$.

III.3.1.2. Les propriétés structurales de l'indium d'Azote (*InN*)

L'indium d'azote est un semi-conducteur structuré dans la phase zinc blende.

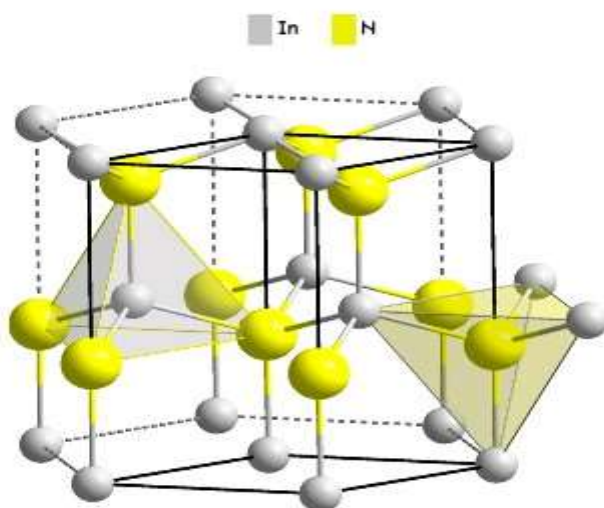


Figure. III.4: Structure cristalline du Zinc Blende de InN

Pour calculer son paramètre de maille on a suit les étapes suivantes :

Après avoir fixé l'énergie de coupure et le nombre de points K qui nous donnent une meilleure convergence de l'énergie totale, maintenant on peut continuer notre travail en suivant les mêmes procédures précédentes, avec un petit changement dans le fichier input (Fichier in).

On a calculé l'énergie totale en fonction du paramètre de maille en allant de **8.0** à **9.8 Bohr** avec un pas de 0.2 Bohr où on a trouvé les résultats présenté sur la Figure III.3

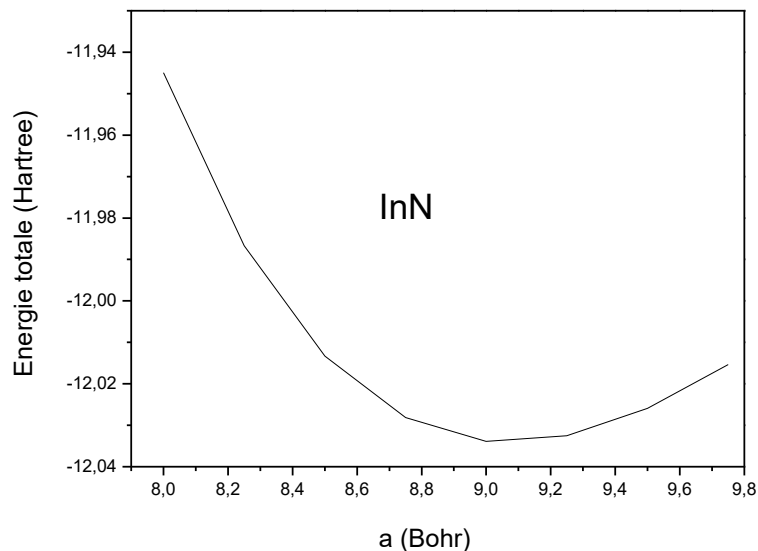


Figure III.5 : La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille

La figure III.4 montre que l'énergie totale du système en fonction du paramètre de maille décroît rapidement jusqu'à une valeur minimale où le paramètre de maille est entre **8.9 Bohr** et **9.1 Bohr** puis augmente avec le paramètre de maille. Nos calculs montrent que la valeur du paramètre de maille optimal est égale à : **$a = 9.0693\text{Bohr} = 4.799 \text{ \AA}$**

La valeur expérimentale qui existe dans la littérature est 4.98 \AA . Donc la déviation de nos résultats par rapport à celle de l'expérience est de 3.6 %. Cette valeur malgré qu'elle est bonne mais on générale la DFT donne des précisions mieux que ça. Ça revient au fait que le InN est en état méta stable dans la phase zinc blende car il est plus stable dans la phase Wurtzite (hexagonale) [42].

III.3.1.3. Les propriétés électroniques :

III.6.1. Structure de bande d'énergie :

Les calculs des structures des bandes, ont été réalisés dans la 1^{ère} zone de Brillouin, les bandes de conduction et de valence sont séparées par une bande interdite (Gap).

On utilise les paramètres d'équilibre des résultats précédents et aussi l'approche du gradient généralisé LDA, la figure III.4 représente les structures des bandes électroniques calculées.

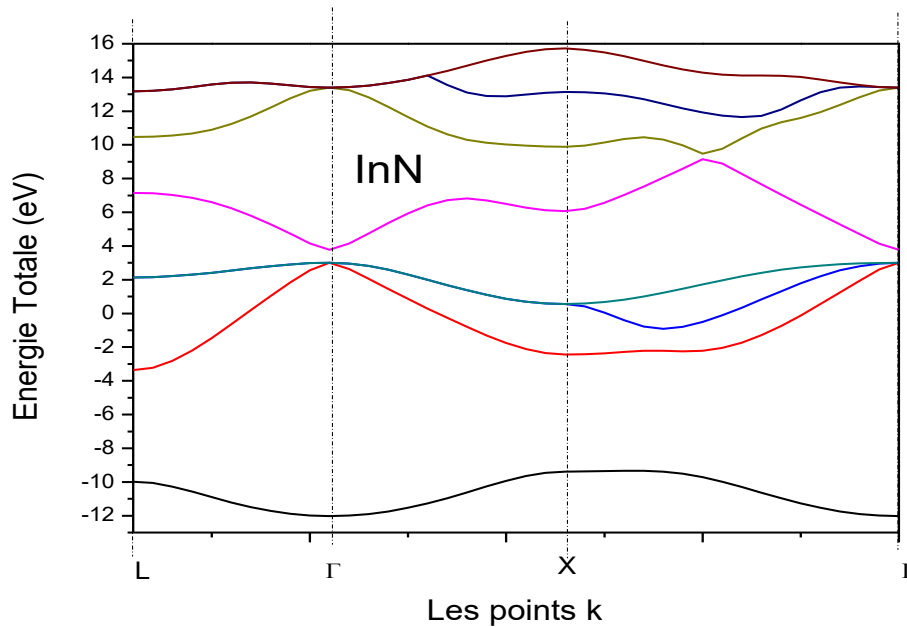


Figure III.6 : Structure de bande électronique de composé InN

On note que le maximum de la bande valence est au point Γ et le minimum de la bande de conduction est au point Γ , donc InN est un semi-conducteur à bande interdite directe.

Le gap optique qu'on a trouvé est 0,7647 eV alors la valeur expérimentale est 1.8. Donc la divination de nos résultats par rapport à celui de l'expérience est 76.5% qui est une très grande déviation. Ça revient au fait que la DFT en générale sous-estime le gap d'une part et que notre étude vise la structure zinc blende qui est un état métastable pour le InN.

Dans la littérature on trouve généralement le gap expérimental est environ 0.7 eV. Mais cette valeur correspond à la structure Wurtzite. Sachant qu'au début, les chercheurs trouvent ce gap égale environ 1.4 eV et par la suite et après une série de mesures très précises ils ont trouvé à la fin que ce gap est 0.692 eV [43].

III.7.DOS :

Après avoir calculer la densité d'état des orbitales électronique (DOS), nous avons les présentés dans la figure suivante :

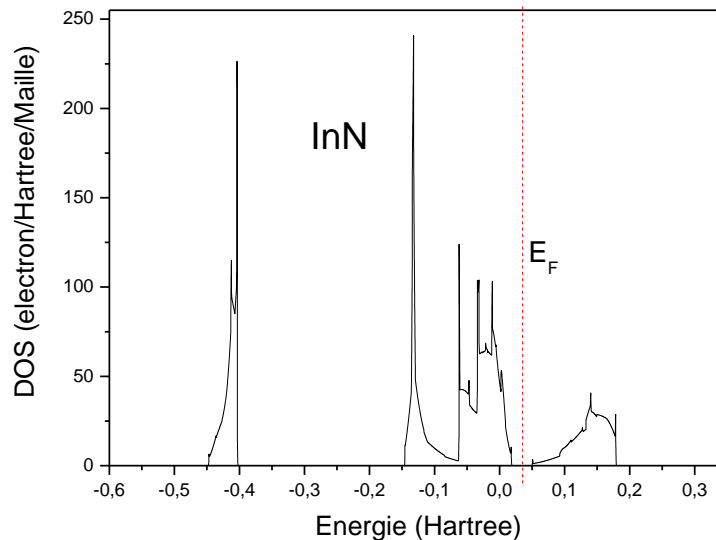


Figure III.7 : La densité d'états de semi-conducteur InN

La figure III.6 montre que la population des électrons est très dense dans la bande de valence et en particulier entre -0.15 Ha à 0.2 Ha (-4.08 à 5.44 eV).

Davantage, on voit que les grands pics sont autour des énergies : -0.41 Ha, -0.13 Ha et -0.05Ha. Ça veut dire que les électrons se rassemblent énormément dans ces régions.

La fin de la bande de valence représente le rencontre des trois bandes de valence au point Gamma dans la structure de bande mais avec une très faible population (DOS=8e/Ha/Maille)

La bande de conduction est presque un triangle normal dans l'extrémité de la bande; ce qui montre que la majorité des électrons excités sont partis aux frontières de la bande conduction. Par conséquent, ces électrons sont fortement prêts aux phénomènes de conduction par l'application d'un champ externe. Ça se peut que celui-là soit la raison de la bonne conductivité de ce matériau par rapport aux autres semi-conducteurs InX (comme il est noté par plusieurs chercheurs) [44].

III.3.1. LES SEMI CONDUCTEURS DE TYPE *InP, InAs et InSb*

III.3.1.1. Les tests de convergence :

On a suit les mêmes étapes que dans le cas du InN. Nos calculs ont conduit aux résultats suivants :

Tableau (III.2) : les paramètres de convergences obtenus pour Ecut et ngkpt

	I n N	I n p	I n A s	I n S b
E c u t	150 Ha	60 Ha	60 Ha	60 Ha
N g k p t	8x8x8	8x8x8	8 x 8 x 8	8 x 8 x 8

Nous remarquons que la seule différence entre le InN et ces matériaux c'est que l'énergie de coupure pour le *InN* est 150 Ha. Par contre dans ce cas nous voyons quelle est seulement à 60 Ha. Ça revient au fait que l'azote est un élément très léger par rapport à l'indium ce qui implique une grande base d'ondes planes.

III.3.1.2. Les propriétés structurales :

Ces matériaux se cristallisent dans la phase zinc blende. En suivant les mêmes étapes précédentes dans le cas de l'InN on trouve ce qui suit :

Tableau (III.3) : les paramètres de mailles obtenus et expérimentales et leurs déviations.

Matériau	<i>InN</i>		<i>InP</i>		<i>InAs</i>		<i>InSb</i>	
	Nos résultats	Exp.	Nos résultats	Exp.	Nos résultats	Exp.	Nos résultats	Exp.
La valeur	4.7995	4.98	5.7294	5.8686	5.9217	6.0584	6.3470	6.4794
Déviations	3.62%		2.37%		2.26%		2.04%	

Nos résultats montrent que dans le cas des semi-conducteurs de type InX plus que le nombre atomique de l'atome X augmente plus que le paramètre de maille augmente. Ceci est très évident, puisque plus que le nombre atomique de l'atome augmente plus que son rayon atomique augmente et par conséquent le paramètre de maille augmente (le chevauchement des électrons est exclu par effet quantique « le principe de Pauli » et par effet électrique d'une part et il est en corroboration avec l'approximation des sphères dures) [45]. Davantage, la déviation de nos résultats par rapport à ceux de l'expérience est petite et montre leurs validités.

III.3.1.2. Les propriétés électroniques NiZ (Z=P, As, Sb)

III.3.1.2.a. La structure de bande :

Les figures (III.8-III.10) représentent la structure des bandes d'InP, InAs et InSb respectivement.

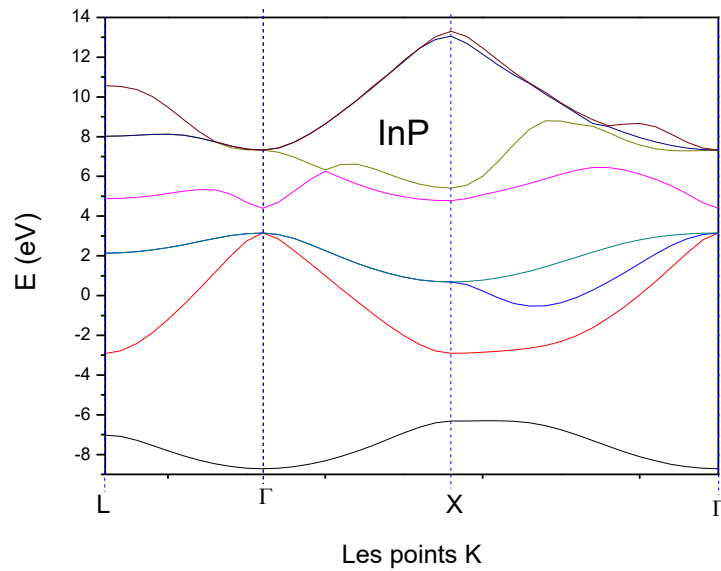
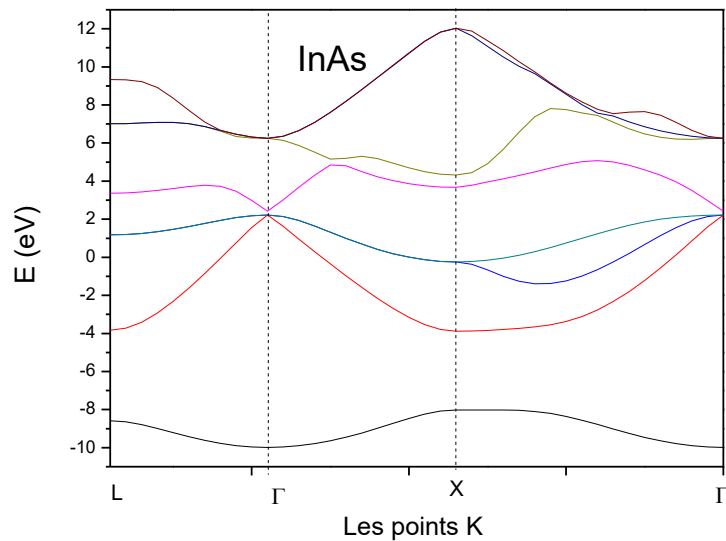


Figure (III.8) :Structure de bande électronique de composé InP



Figure(III.9) :Structure de bande électronique de composé InAs

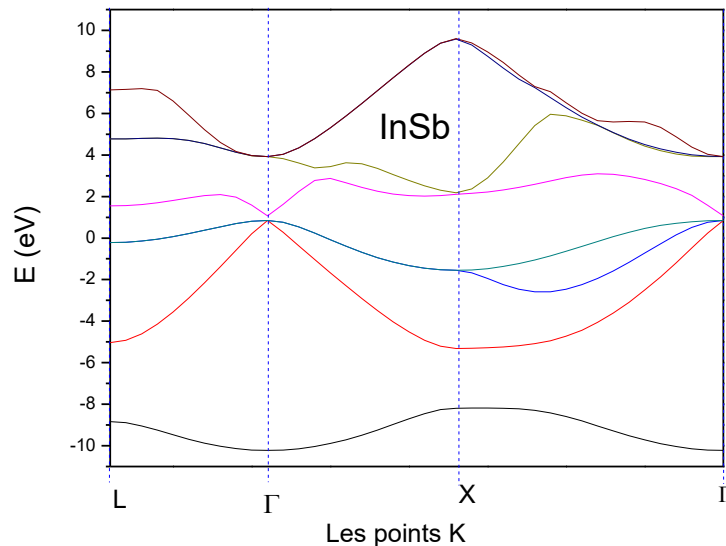


Figure (III.10):Structure de bande électronique de l'InSb

Les figures (III.8-III.10) ci-dessus montrent que les matériaux binaires de type InZ (Z=P, As et Sb) sont des semi-conducteurs à gap direct ce qui montre son grand intérêt en optoélectronique.

Après avoir calculé les gaps, nos résultats trouvés sont présentés dans le tableau (III.3) comme suit:

Tableau (III.3):Les Gaps optiques obtenus et expérimentales et ses déviation

Matériau	<i>InN</i>		<i>InP</i>		<i>InAs</i>		<i>InSb</i>	
	Nos résultats	Exp.	Nos résultats	Exp.	Nos résultats	Exp.	Nos résultats	Exp.
La valeur	0.765	1.8	1.233	1.344	0.202	0.354	0.223	0.17
Déviation	76.5%		8.24%		42.9%		31.01%	

Les résultats trouvés montrent ce qui suit :

- Le gap augmente puis diminue puis augmente puis diminue en allant de Z=N à Z=Sb. En d'autre terme ; ça montre que le gap n'a aucune relation directe avec le nombre atomique des atomes.
- Les gaps calculés sont fortement inférieurs aux gaps expérimentaux. Ça revient au fait que la DFT sous-estime le gap.
- La déviation d'InN est la plus grande par rapport aux autres résultats. Ça revient, à notre avis, à la méta stabilité de la structure de InN dans la phase zinc blende. Par contre le reste des composés en question sont plus stables à cette structure (zinc blende).

III.1.2.b .DOS :**1) InP**

La figure (III.11) représente la DOS en fonction de l'énergie des électrons.

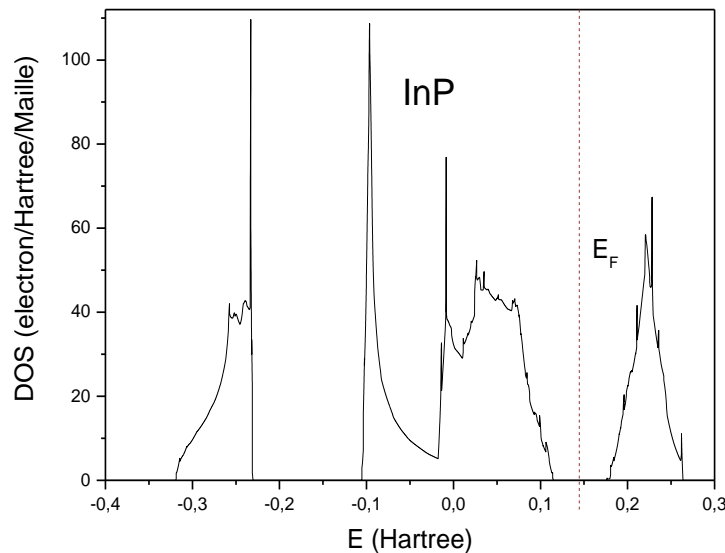


Figure (III.11) : La densité d'état (DOS) du semi-conducteur InP.

La figure (III.11) montre plusieurs constats :

- L'existence de plusieurs pics dont deux sont extrêmement grands: le premier se trouve autour de l'énergie -0.29 Ha (-8.16 eV) et le deuxième autour de -0.13 Ha (-3.54 e). Dans ces régions, les électrons sont très probablement existés.
- La bande valence est plus large et même dépasse en amplitude du DOS celle de la bande de conduction. Ce qui montre la majorité des électrons sont situés à la bande de valence.
- La bande de conduction a la forme presque d'un triangle équilatérales ce qui montre que la majorité des électrons de la bande de conduction sont situés au milieu de la bande.
- Les électrons les plus énergétiques dans la bande de conduction ont une DOS égale à environ $10(\text{é}/\text{Ha}/\text{Maille})$ qui est une valeur n'est pas négligeable ce qui montre que ce matériau contribue favorablement dans les phénomènes de conduction.

2) InAs

La figure (III.12) représente la DOS en fonction de l'énergie des électrons.

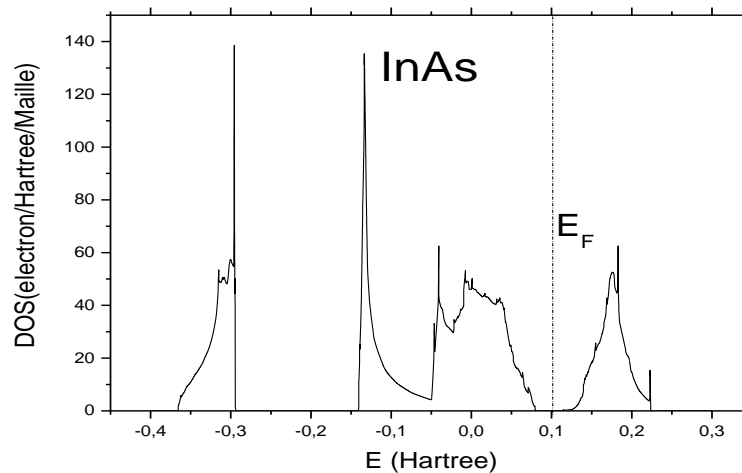


Figure (III.12) :La densité d'état de semi-conducteur InAs

De la même manière du cas InP on a traité l'arséniure d'indium où on a constaté ce qui suit :

- L'existence de plusieurs pics dont deux sont extrêmement grands: le premier se trouve autour de l'énergie -0,29 Ha (-8,16 eV) et le deuxième autour de -0,13 Ha (-3,54 e). Dans ces régions, les électrons sont très probablement existés.
- On constate que la DOS de l'InP est semblable à celle d'InAs. Ça veut dire que leur distribution des électrons au-dessous de l'énergie 0,08H (21 eV) est semblable.
- La bande valence est plus large et même dépasse en amplitude du DOS celle de la bande de conduction. Ce qui montre la majorité des électrons sont situés à la bande de valence.
- La bande de conduction a la forme presque d'un triangle équilatérales ce qui montre que la majorité des électrons de la bande de conduction sont situés au milieu de la bande.
- Les électrons les plus énergétiques dans la bande de conduction ont une DOS égale à environ 18(e/Ha/Maille) qui est une valeur n'est pas négligeable ce qui montre que ce matériau ne peut contribuer favorablement dans les phénomènes de conduction comme celui de InN à cause de sa faible charge.

3) InSb

La figure (III.13) représente la DOS en fonction de l'énergie des électrons.

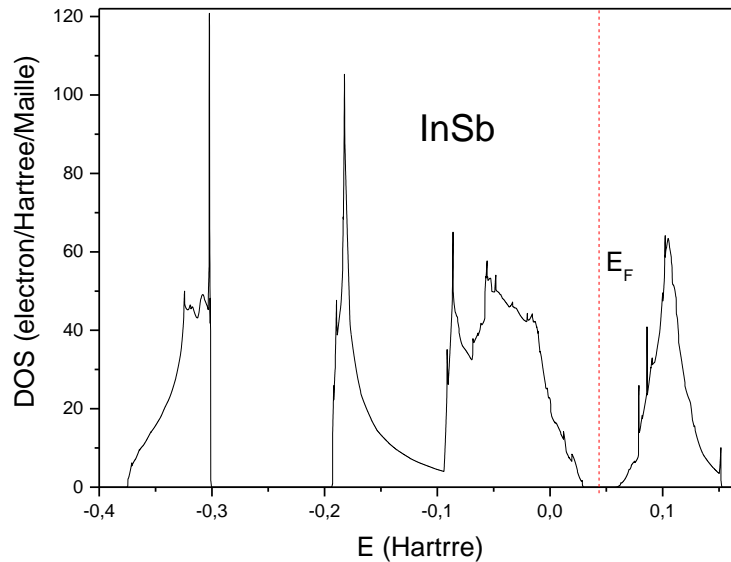


Figure (III.12) :La densité d'état de semi-conducteur InSb

De la même manière des cas InP et InA sont a traité InSb où on a constaté ce qui suit :

- La forme du DOS d'InSb est semblable à celles d'InP et InAs sauf les valeurs des pics en fonction de l'énergie : le premier se trouve autour de l'énergie -0.305 Ha (-8.3 eV) et le deuxième autour de -0.18 Ha (-21.8 eV).
- La bande valence est plus large et même dépasse en amplitude du DOS celle de la bande de conduction. Ce qui montre la majorité des électrons sont situés à la bande de valence.
- La bande de conduction a la forme presque d'un triangle équilatérales ce qui montre que la majorité des électrons de la bande de conduction sont situés au milieu de la bande.
- Les électrons les plus énergétiques dans la bande de conduction ont une DOS égale à environ 10(e/Ha/Maillage) qui est une valeur n'est pas négligeable ce qui montre que ce matériau ne peut contribuer favorablement dans les phénomènes de conduction comme celui de InN à cause de sa faible charge.

Conclusion Générale

Ce travail avait pour objectif l'étude des propriétés structurales et électroniques des composés semi-conducteurs binaire à base d'indium de type InX ($X=\text{N, P, As, Sb}$) en utilisant un code de calcul ab initio dite ABINIT. Pour ce faire, notre étude est basée sur la DFT en utilisant la LDA pour le potentiel d'échange et de corrélation.

Les matériaux semi-conducteurs qu'on a étudiés sont stables à la phase zinc blende à l'exception de l' InN qui est méta stable dans cette structure.

Avant d'entamer l'étude des propriétés physiques en question, on a fait les tests de convergence et on a trouvé que la convergence de l'énergie de coupure est E_{cut} égale à 150 Ha pour InN et 60Ha pour InZ ($Z=\text{P,As, Sb}$)=60 Ha. Par ailleurs, le nombre de points K atteint la convergence pour tous les matériaux qu'on a étudiés pour un nombre de point $K=8 \times 8 \times 8$.

Après avoir effectué les tests de convergence on a étudié les propriétés structurales et électroniques.

Pour les propriétés structurales ; nous avons remarqué que plus le nombre atomique de l'atome X augmente plus que le paramètre de maille augmente. Ceci est tout à fait légitime, puisque plus que le nombre atomique augmente plus que le rayon atomique de l'atome X augmente.

Alors, pour les propriétés électroniques, on a remarqué que les semi-conducteurs de type InX sont à gap direct. Ce qui montre leur importance dans l'application optoélectronique.

En ce qui concerne la DOS, on a constaté que les trois matériaux InP , InAs et InSb ont presque la même forme soit celle de la bande de valence ou la bande de conduction (mais différent en valeurs seulement) avec deux grands pics. Leurs électrons de la bande de conduction se rassemblent énormément autour du milieu de leur bande de conduction.

Par contre dans le cas d' InN , les électrons de la bande de conduction se rassemblent à la frontière de cette bande, ce qui rend ce matériau plus favorable dans les phénomènes de conduction.

Références Bibliographiques

- [1] P.Arnoud, “chimie physique “ édition Dunod (2001)
- [2] A.Zaoui .Thèse de magister.Univ Djilali Liabes, Sidi Bel Abbes (2000)
- [3] Kara Mohamed Wahiba. Thèse de doctorat .Univ Mohamed Khider de Biskra
- [4] Youssef Traore, Thèse de Doctorat, Université de Grenoble ,(7 Aout 2006).
- [5] Jihene Zribi, Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, Canada,(26 Novembre 2014)
- [6] Arnaud CROS-GAGNEUX, Thèse de Doctorat, Université de Toulouse.
- [7] P.Kireev, la physique des semi-conducteurs, 2 ème édition Moscou (1975)
- [8] Frédéric Faure, Notes de cours sur la Mécanique Quantique, Master physique M1, Université Joseph Fourier, Grenoble (version : 11 novembre 2015)
- [9] Seraiche Fatiha, Mémoire de Master 2, université Mohamed Boudiaf, M’sila,(27/06/2018).
- [10] A.Martinez, Séminaire Equations Aux Dérivées Partielles, Ecole Polytechnique de la France,(1994/1995).
- [11] M, Borb, j, R, Oppenheimer Ann, phys 87, (1928).457
- [12] Lebgaa Noudjoud, Thèse Doctorat, Université Ferhat Abbes-Sétif (2011)
- [13] Kara Mohamed Wahiba, thèse de doctorat, univ Mohamed Kheider de Biskra (2012)
- [14] Samia Chelli, thèse de doctorat, Univ Badji Mokhtar de Anaba (2015)
- [15] Slimani Rebiha, thèse de master2,univ de BBA Mohmed El Bachir El Ibrahimy (2019)
- [16] R.Bauernschmitt, R Ahbichs. The journal of chemical physics, (1996)
Aip.Scitation.org
- [17] Soudia Zohra, thèse de doctorat, univ Ferhat Abbes de Sétif1
- [18] Maricarmen Crisolia, thèse de doctorat, univ de Toulouse III ,physico-chimie théorique (2010)
- [19] W.Kohn and L,J Sham , phys,53,603 (1981)
- [20] Nobel Lecture by Wolter Kohn, Department of physics, University of California ,Santa Barbata , CA 931006-9530 USA , January 28 ,1999
- [21] Hadrien Perron , HAL, 15 oct. 2007
- [22] Lebgaa Noudjoud, Thèse Doctorat, Université Ferhat Abbes-Sétif (2011)
- [23] A.D .Becke, “Density-functional exchange –energy approximation with correct asymptotic behavior“, phys. Rev .A 38 (1988) 3098

- [24] J.P.Perdew and Y. Yang, "Accurate and simple analytic representation of the electron –gas correlation energy, Phys.Rev B45 (1992) 13244
- [25] J.P.Perdew, K. Burke, and M Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", Phys.Rev.Lett 77 (1996) 3865
- [26] M.C Warren, G.J. Ackland, B.B Karhi, S.JClarck, "Phase Transitions in Silicate Pervskites from first principles", Mineral, Mag 62,585-598 (1998)
- [27] Christian Ngo, Hèlène Ngo, Physique des semi-conducteurs.
- [28] Philip Jaussaud, Auguste Bravais et cristallins, 2014. Halshs-00990953.
- [29] Mme Baghdali Nawel née : Korti, thèse de Doctorat en physique, université de Tlemcen, (2013).
- [30] Christophe Adessi, Matériaux et Ingénierie des Surfaces 3 ème année, Cours du physique du solide , (2020/2021).
- [31] Mohamed Riad Beghoul, thèse de Doctorat, Université Mentouri de Constantine (2008).
- [32] Cécile Malgrange, Cristian Ricolleau and Françoise Le fauchaux, Symétrie et propriétés physiques des cristaux (2011).
- [33] Lebel 'Chimie Théorique ' niveau M2, 20Janvier 2012, Paris.
- [34] C.Kittel. Introduction à la physique de l'état solide, Dunode (1972).
- [35] Guillaume Barras, thèse de doctorat, université de lill1, 1 Février 2012
- [36] P. Palacios, I Aguilera , P, Wahnon, 'Electronic structure and optical properties in ZnO :M(Co,Cd) Effect of band-gap variation', Thin Solid Films 518 (2010)
- [37] Warren E, Pikett, Computer Physics Report 9,115 (1989)
- [38] Kara Mohamed Wahiba, thèse de Doctorat, université de Biskra,(2012).
- [39] M.C Warren, G.J Ackland, B.B Karhi, S.J Clarck "Phase Transition in Silicate Pervskites from First Principles", Mineral Mag 62,585-598 (1998).
- [40] M.Mattessini, thèse de Doctorat "Proposition et modélisation de nouveaux matériaux ultras-durs", université de Bordeaux (2002)
- [41] C. Payne, M.C Teter, M.Pallan, D C, Arias, T, A. Joa,opoulos, T.D. Interatives, Minimisation Techniques for AB-Initio Total Energy Calculations : Molecular Dynamics and conjugte Gradients, Rev, Mod Phys, 64,1045-1097 (1992).
- [42] S.H.W.Pierre Carrier, 'Theoretical study of the band gap of InN', E.Kurimoto, Journal of Applied Physics, 97(2005) 033707.
- [43] Radouane Graine, Thèse de doctorat , Université de Anaba (04/05/2016).
- [44] Semi-conducteur sur NSM , Institut Fiziko-Tekhnicheskyy A.F. Ioffe.n.d,Récupéré 29/12/2019.
- [45] Guillaume Jeanmairet, Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 16 Juillet 2014.

في هذه المذكرة , درسنا الخصائص البنيوية و الالكترونية لمركبات أشباه النواقل الثنائية InX ($X=N, P, As, Sb$) بناء على نوع الانديوم في مرحلة خليط الزنك. تم إجراء الحسابات لما يسمى بطريقة الحساب باستخدام *ab initio*

برنامج Abinit, للقيام بذلك تستند دراستنا إلى DFT

انثناء استخدام الكثافة المحلية (LDA) لتحديد إمكانية التبادل و الارتباط. لقد قمنا بحساب اختبارات التقارب الخصائص الهيكلية و كذا الخصائص الالكترونية (هياكل النطاق كثافة الحالة الالكترونية) Dos لمركبات أشباه النواقل $InN, InP, InAs, InSb$.

أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها أن هذه الأنواع من المواد عبارة أشباه نواقل ذات فجوات مباشرة مما يبرر تطبيقها في المجال الالكتروني البصري. بمقارنة نتائجنا مع النتائج التجريبية و مناقشتها, لوحظ الانحراف الكبير لنتائجنا في حالة InN حيث تم تبرير ذلك من خلال الاستقرار الحرج لهذه المادة في مرحلة مزيج الزنك.

الكلمات المفتاحية: نظرية دالية الكثافة، أشباه النواقل ذات الفجوة المباشرة، تقريب الكثافة الموضعية، أشباه النواقل ذات النوع InX ($X=N, P, As, Sb$). كثافة الحالة.

Résumé

Dans ce mémoire, nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des composés semi-conducteurs binaire à base d'indium de type InX ($X=N, P, As, Sb$) dans la phase zinc blende. Les calculs ont été effectués par la méthode de calcul dite *ab initio* en utilisant le code Abinit. Pour ce faire, notre étude est basée sur la DFT tout en utilisant l'approximation de la densité locale (LDA) pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation. Les tests de convergence, les propriétés structurales et les propriétés électroniques (Structures de bandes, la densité d'état électronique DOS) des composés semi-conducteurs $InN, InP, InAs, InSb$, ont été calculés.

Les résultats obtenus montrent que ces types de matériaux sont des semi-conducteurs à gap direct ce qui justifie son application dans le domaine optoelectronique. Nos résultats sont comparés à ceux de l'expérience et discutés. La grande déviation de nos résultats est constaté dans le cas de InN où on a justifié ça par la méta stabilité de ce matériau dans la phase zinc blende.

Mots clés : DFT, LDA, DOS, semi-conducteurs de type II-V, semi-conducteurs à gap direct, InX ($X=N, P, As, Sb$).

Abstract

In this thesis, we studied the electronic and structural properties of binary semiconductor compounds based on indium type InX ($X=N, P, As, Sb$) in the zinc blende phase. The calculations were carried out by the so-called *ab initio* calculation method using the Abinit code. To do this, our study is based on DFT while using local density approximation (LDA) to determine the exchange and correlation potential.

Convergence tests, structural properties and electronic properties (band structures, Dos electronic state density) of semiconductor compounds $InN, InP, InAs, InSb$ have been calculated. The results obtained show that this type of materials are direct gap semiconductors which means its application in the optoelectronic field. Our results are compared with those of the experiment and discussed. The great deviation of our results is noted in the case of InN where we justified this viewpoint by the Meta stability of this material in the zinc blende phase.

Keywords: DFT, LDA, DOS, semi-conductors III-V, semi-conductors with direct gap, InX ($X=N, P, As, Sb$).