

République Algérienne Démocratique et Populaire  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Mohamed El Bachir Elibrahimi « Bordj Bou Arreridj »

Faculté des Sciences et de la Technologie

Département Sciences de la Matière

جامعة محمد البشير الإبراهيمي « برج بوعريريج »  
كلية العلوم والتكنولوجيا  
قسم علوم المادة



# Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLOME DE : MASTER

**Filière :** Physique  
**Option :** Physique des Matériaux

## THÈME

*Contribution à l'étude des propriétés structurales, élastiques et  
électroniques, du semi-conducteur InN*

Préparé par :

Hellali Fatiha

Soutenu le : 15/09/2021

Devant le jury :

**Président :** Daoudi salim

MCA

Université de Bordj Bou Arreridj

**Rapporteur :** Khaldi Abd Elghani

MCA

Université de Bordj Bou Arreridj

**Examineur :** khelladi M<sup>ed</sup> Rédha

Pr

Université de Bordj Bou Arreridj

2020-2021

# **Remerciements**

*En préambule à ce mémoire je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères aux personnes qu'ils ont apportés leur aide et qu'ils ont contribué à l'élaboration de ce mémoire ainsi qu'à la réussite de cette formidable année universitaire*

*Je tiens tout d'abord à remercier **Dr. KHALDI ABDELGHANI**, mon encadreur au sien de la faculté de sciences et de la technologie de Bordj Bou Arréridj, de m'avoir si bien encadré, orienté et fait bénéficier de ses précieux conseils, sa riche expérience et de ses compétences, ce fut un immense plaisir de travailler avec vous docteur*

*Je tiens à remercier les membres de jury **Dr. DAOUDI SALIM** et **Dr. KHELLADI M<sup>ed</sup>.RIDA** qu'ils trouvent ici toute ma gratitude pour avoir accepté d'être des examinateurs de ma thèse.*

*Et finalement, je n'oublie pas à remercier tous ceux qui ont participé directement à l'aboutissement de ce travail.*

## ***Dédicace***

*Au nom d'ALLAH .le tout Miséricordieux le très Miséricordieux.*

*Je remercie ALLAH le Glorieux le Haut et a son paix et salut sur lui ainsi que sur ses compagnons sa famille et sur tous ceux qui s'investissent sur la voie droite avec sincérité*

*Je dédie ce mémoire*

### ***A Mes parents***

*Pour tout l'amour que vous j'apporte pour votre présence a chaque moment de la vie pour m'avoir toujours soutenus et encourages pour m'avoir permis den arriver la aujourd'hui pour avoir consacre beaucoup de votre tems.*

*Je ne trouverai jamais les mots pour vous exprimer tous l'amour et l admiration que Jai eue pour vous*

### ***A mes Sœurs***

*Pour leurs présences au quotidien leurs soutiens et leurs bonnes humeurs pour avoir été la dans les moments difficiles c'est l'occasion pour moi de vous exprimer toute mon gratitude*

## ***Dédicace***

*Au nom d'ALLAH .le tout Miséricordieux le très Miséricordieux.*

*Je remercie ALLAH le Glorieux le Haut et a son paix et salut sur lui ainsi que sur ses compagnons sa famille et sur tous ceux qui s'investissent sur la voie droite avec sincérité*

*Je dédie ce mémoire*

*A Mes parents*

*Pour tout l'amour que vous j'apporte pour votre présence a chaque moment de la vie pour m'avoir toujours soutenus et encourages pour m'avoir permis den arriver la aujourd'hui pour avoir consacre beaucoup de votre tems.*

*Je ne trouverai jamais les mots pour vous exprimer tous l'amour et l admiration que Jai eue pour vous*

*A mes Sœurs*

*Pour leurs présences au quotidien leurs soutiens et leurs bonnes humeurs pour avoir été la dans les moments difficiles c'est l'occasion pour moi de vous exprimer toute mon gratitude*

## ***Sommaire***

Introduction Générale.....	1
Bibliographie.....	2

### ***CHAPITRE I***

#### ***Les méthodes de premier principe***

<b>I.1.</b> Introduction.....	4
<b>I.1.2.</b> Equation de Schrödinger.....	4
<b>I.1.3.</b> Approximation de Born - Oppenheimer.....	5
<b>I.1.4.</b> Approximation de Hartree.....	6
<b>I.1.5.</b> Approximation Hartree-Fock.....	6
<b>I. 2.</b> La théorie de la fonction de la densité (DFT).....	7
<b>I.2.1.</b> Introduction.....	7
<b>I.2.2.</b> Théorèmes de Hohenberg et Khon.....	7
<b>I.2.3.</b> Les équations de Kohn-Sham.....	8
<b>I.2.4.</b> Approximation de la densité locale (LDA).....	9
<b>I.2.5.</b> L'approximation du gradient généralisé GGA.....	10
<b>I.3.</b> La méthode du pseudopotentiel.....	11
<b>I.4.</b> Le code CASTEP.....	12
Références Bibliographie.....	13

### ***CHAPITRE II***

#### ***Rappel sur les propriétés physiques des semi-conducteurs***

<b>II.1.</b> Introduction.....	17
<b>II.2.</b> La notion des semi-conducteurs.....	17
<b>II.3.</b> Les différents types des semi-conducteurs.....	17
<b>II.3.1</b> Semi-conducteur intrinsèque.....	17
<b>II.3.2</b> Semi-conducteur extrinsèque.....	17
<b>II.3.3</b> Semi-conducteurs dopés.....	17

<b>II.4. Propriétés structurale et élastique et électronique</b> .....	18
<b>II.4.1 Propriétés structurales</b> .....	18
<b>II.4.1.1 Structure zinc-blende</b> .....	18
<b>II.4.2. Propriétés élastique</b> .....	20
<b>II.4.2.1 .Introduction</b> .....	20
<b>II .4.2.2. Tenseur des déformations</b> .....	20
<b>II.4.2.3. Le tenseur des contraintes</b> .....	21
<b>II.4.2.4. Relation contrainte-déformation</b> .....	21
<b>II.4.2.5.Tenseur des Constant es élastique</b> .....	22
<b>II.4.2.6. Les conditions de stabilité mécanique</b> .....	22
<b>II.4.2.7. Facteur d'anisotropie</b> .....	23
<b>II.4.2.8. Modules élastiques isotropes</b> .....	23
<b>II.4.3. Propriétés électroniques</b> .....	24
<b>II.4.3.1. Structure de bande d'énergie électronique</b> .....	24
<b>II.4.3.2.Gap direct – Gap indirect</b> .....	24
<b>II.5 Applications</b> .....	25
<b>II.5.1 Les cellules photovoltaïque</b> .....	25
<b>II.5.2 le fonctionnement d une cellule photovoltaïque de bas</b> .....	25
<b>II.6 Les avantage des semi-conducteurs III-V</b> .....	26
<b>Références Bibliographie</b> .....	27

### ***Chapitre III***

#### ***Résultats et discussion***

<b>III.1. Propriétés structurales</b> .....	28
<b>III.2.1. Propriétés structurale à pression nulle</b> .....	29

<b>III.2.2.</b> l'Effet de la pression sur les propriétés structurales .....	31
<b>III.3.</b> Etude des propriétés élastique de l' <i>InN</i> à pression nulle .....	32
<b>III.3.1.</b> Constantes élastique $C_{ij}$ à pression nulle .....	32
<b>III.3.2.</b> Stabilité mécanique à pression nulle.....	33
<b>III.3.3.</b> Anisotropie élastique à pression nul .....	33
<b>III.3.4.</b> Ductilité / Fragilité à pression nulle .....	34.
<b>III.4.</b> Etude des propriétés élastique du <i>InN</i> sous l'effet de la pression .....	34
<b>III.4.1.</b> Effet de la pression sur les constantes élastiques $C_{ij}$ .....	34
<b>III.4.2.</b> Effet de la pression sur la stabilité mécanique .....	35
<b>III.4.3.</b> Effet de la pression sur l'anisotropie .....	36
<b>III.4.4.</b> Effet de la pression sur les modules d'élasticité $B$ , $G$ et $E$ .....	37
<b>III.4.5.</b> Effet de la pression sur la ductilité /fragilité .....	38
<b>III.5</b> Propriétés électroniques du l' <i>InN</i> .....	39
<b>III.5.1</b> structure de bande d'énergie électronique .....	39
Références Bibliographie.....	41
Conclusion générale.....	42

## *Liste de Symboles*

$\hbar$  : constante de Planck normalisée.

$m$  : La masse de l'électron

$e$  : La charge élémentaire d'un électron

$R$  et  $r$  : les coordonnées des noyaux et des électrons

$H$  : es l'Hamiltonien du cristal qui contient tous les termes d'énergie

$E$  : l'énergie total du système

$\Psi(r, R)$  : La fonction d'onde du système

$U$  : Energie interne

$T_z$  : L'énergie cinétique totale de noyaux

$T_e$  : l'énergie cinétique totale des électrons

$U_e$  : l'énergie d'interaction des électrons deux par deux

$U_z$  : l'énergie d'intraction des noyaux deux par deux

$U_{ze}$  : L'énergie d'interaction noyaux-électron

$M_\alpha$  : La masse des noyaux

$N_\alpha$  : le nombre d'atomes dans le cristal

$N_e$  : le nombre d'électrons

$Z_\alpha$  et  $Z_\beta$  : la charge des noyaux  $\alpha$  et  $\beta$

$\Psi_z(R)$  : La fonction d'onde nucléaire

$E_e$  : L'énergied'électrons

$\Omega_i(r_i)$  : L'énergie potentielle d'un électron  $i$  dépend.

DFT : Théorie de la fonctionnelle de la densité.

$E_{\text{tot}}$  : L'énergie totale d'un système d'électrons.

$V_{\text{ext}}(\vec{r})$ : Le potentiel externe.

LDA : Approximation de la densité locale.

GGA : Approximation du gradient générale.

$\vec{K}$  : est le vecteur d'onde,  $i$  est l'indice de bande

CFC : cubique a face centre

## **Table des figures**

<b>Figure I. 1.</b> Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) .....	10
<b>Figure II.1.</b> <i>La structure de bandes des semi-conducteurs type n et p</i> .....	18
<b>Figure II.2.</b> <i>structure zinc blende de ZnS avec le tétraèdre (group d'espace n°216, <math>F\bar{4}3m</math>)</i> .....	19
<b>Figure II.3.</b> <i>Structure zinc blende des composés binaires</i> .....	19
<b>Figure II.4.</b> <i>Les composantes du tenseur des contraintes</i> .....	21
<b>Figure II.5.</b> <i>Structure de bande d'InN</i> .....	24
<b>Figure II.6.</b> <i>Structure de bande d'énergie du :A-gap indirect et B-gap direct</i> .....	25
<b>Figure III.1.</b> <i>La cellule élémentaire du InN cubique à faces centrées</i> .....	29
<b>Figure III.2.</b> <i>Variation de l'énergie totale en fonction du volume</i> .....	31
<b>Figure III.3.</b> <i>Dépendance du (<math>a/a_0</math>, <math>V/V_0</math>, et <math>d/d_0</math>) et de la pression du composée InN</i> .....	32
<b>Figure III.4.</b> <i>Variation des constantes élastiques <math>C_{ij}</math> en fonction de la pression hydrostatique du composée InN</i> .....	35
<b>Figure III.5.</b> <i>Variation des critères de stabilité en fonction de la pression hydrostatique du InN</i> .....	36
<b>Figure III.6.</b> <i>Variation du facteur d'anisotropie élastique de Zener AZ avec la pression du InN</i> .....	38
<b>Figure III.7.</b> <i>La variation des modules B, G et E en fonction de la pression du InN</i> .....	39
<b>Figure III.8.</b> <i>Structure de bande d'InN</i> .....	40

### *Liste des Tableaux*

<b>Le tableau III.1.</b> Constantes élastiques et valeur du module de cisaillement $G$ , facteur d'anisotropie de Zener $A_Z$ du $InN$ en structure zincblende à $P = 0 \text{ GPa}$ en comparaison avec les autres valeurs expérimentales.....	30
<b>Le tableau III.2.</b> Représente les données d'énergie-volume total (E-V) résultantes.....	33

# ***INTRODUCTION GENERALE***

### **INTRODUCTION GENERALE**

Les semi-conducteurs ont une importance considérable en technologie. Ils forment la base de la plupart des dispositifs électroniques modernes pour le traitement de l'information et de la communication. Leur importance est née avec la découverte en 1948, du transistor [1]. Les propriétés physiques (électroniques, structurales, élastique...) des systèmes complexes ont attiré l'intérêt considérable pour la physique des matériaux ; alors qu'une grande quantité de travail a été concentrée sur la compréhension théorique d'une variété de semi-conducteurs Composés et de leurs propriétés relatives.

Les semi-conducteurs binaires de la famille *III-V* qui font apparaître des éléments des Colonnes III et V du tableau périodique, sont récemment intensivement étudiés et ils sont devenu le sujet de plusieurs recherches expérimentales et théoriques, soit à des conditions ambiantes ou à haute pression, en raison qu'ils sont largement utilisés pour la réalisation des dispositifs électroniques. Les cristaux III-V ont un caractère moins ionique que ceux de type I-VII et II-VI. Ils adoptent presque tous la structure de la blende caractéristique des cristaux covalents. La plupart se comportent comme des semi-conducteurs plutôt comme des isolants ; autrement dit, leurs bandes interdites sont relativement petites. Les composés III-V sont donc de bons exemples de substances qui sont partiellement ioniques et partiellement covalentes [2].

Ce mémoire à pour but d'étudier les propriétés structurales, élastiques et électroniques des matériaux binaires, c'est le Nitrure d'indium *InN* appartenant au groupe III-V des semi Conducteurs, à pression nulle et sous l'effet de la pression hydrostatique. en utilisant la Méthode des ondes planes pseudopotentiel (*PW - PP*) implémentée dans le code CASTEP [3]. Nous avons subdivisé notre travail en trois chapitres ; dans le premier chapitre, nous

## *Introduction générale*

---

décrivons brièvement la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), les équations de Kohn et Sham, et les différentes approximations utilisées pour la détermination du Potentiel d'échange et de corrélation.

Dans le deuxième chapitre on a parlé sur les principaux concepts théoriques des propriétés Structurale et élastiques et électroniques des matériaux semi-conducteurs,

Le troisième chapitre regroupe tous les calculs que nous avons effectués et les résultats que Nous avons trouvés.

Enfin, nous achèverons ce travail par une conclusion générale.

***Bibliographies***

[1] C. Ngo et H. Ngo, Les semi-conducteurs, Dunod, Paris, 2003.

[2] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Physique du solide, EDP Sciences, France, 2002.

[3] M.D. Segall, P.J.D. Lindan, M.J. Probert, C.J. Pickard, P.J. Hasnip, S.J. Clark, M.C. Payne, J. Phys: Condens. Matter 14, 2717 (2002).

# *Chapitre I*

## *Les méthodes de premier principe*

**I.1.Introduction:**

La description quantique non relativiste d'un système moléculaire ou cristallin est basée sur l'équation de Schrödinger. Une introduction à ce formalisme débute nécessairement par la présentation d'équation de Schrödinger (N-corps) qui sera simplifiée ultérieurement par diverses approximations de manière à ce qu'elle puisse être résolue. Le traitement de ce problème en mécanique quantique consiste à rechercher les solutions de cette équation. Mais, les électrons et les noyaux qui constituent le matériau fortement interagissant et ceci rend la résolution de l'équation de Schrödinger extrêmement difficile.

**I.1.2. Equation de Schrödinger :**

Tout corps cristallin peut être considéré comme un système unique composé de particules légères (électrons) et lourds (noyaux). L'état stationnaire de ces particules est décrit par l'équation de Schrödinger [1]:

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

Avec :  $H$  : est l'Hamiltonien du cristal qui contient tous les termes d'énergie :

➤ L'énergie cinétique totale de noyaux :

$$\hat{T}_z = \sum_{\alpha} \hat{T}_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\alpha}} \left( \frac{-\hbar^2 \Delta_{\alpha}}{2M_{\alpha}} \right) \quad (\text{I.2})$$

Avec :  $\hbar$  constant de Planck, et  $M_{\alpha}$  La masse du noyau

➤ L'énergie cinétique totale des électrons :

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{T}_i = \sum_{i=1}^{N_e} \left( \frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) \quad (\text{I.3})$$

Avec :  $m$  est la masse de l'électron.

➤ L'énergie d'interaction des noyaux deux par deux :

$$\hat{U}_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|R_\alpha - R_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{U}_{\alpha\beta} \quad (\text{I.4})$$

Avec :  $Z_\alpha$  et  $Z_\beta$  la charge des noyaux  $\alpha$  et  $\beta$

➤ L'énergie d'interaction des noyaux deux par deux :

$$\hat{U}_e = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{U}_{ij} \quad (\text{I.5})$$

➤ L'énergie D'interaction noyaux-électrons :

$$\hat{U}_{eZ} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{U}_{i\alpha} \quad (\text{I.6})$$

R et r : sont les coordonnées des noyaux et des électrons respectivement.

$$\left( \hat{T}_e + \hat{T}_z + \hat{U}_e + \hat{U}_z + \hat{U}_{eZ} \right) \Psi (r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) = E \Psi (r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) \quad (\text{I.7})$$

Cette équation contient  $3(Z+1) N_\alpha$  variables, et puisque on trouve dans un  $\text{cm}^3$ , d'un

E : L'énergie total du système

$\Psi ((R,r))$  a fonction d'onde du système fonction des coordonnées des noyaux et des électrons, et contient toute l'information du système Alors l'équation de Schrödinger Pourra Donc être représentée sous la forme :

Solide cristallin près de  $10^{22}$  atomes, il est plus qu'évident que l'on ne saurait obtenir une solution car il s'agit d'un problème à N corps qui n'est résolu qu'en moyennant un certain nombre d'approximation

### 1.1.3. Approximation de Born - Oppenheimer :

Cette approximation se base sur le fait que la masse d'un noyau quelconque est nettement supérieure à celle de l'électron. Pour cette raison, le mouvement des noyaux par rapport aux électrons peut être négligé, c'est-à-dire que les noyaux seront considérés comme figés. Dans ce contexte, l'énergie cinétique des noyaux est nulle ( $T_{\text{noy}}=0$ ) et l'énergie coulombienne ( $V_{\text{noy-noy}}$ ) due à la répulsion entre noyaux devient une constante [2]

$$H_{\text{total}} = T_{el} + V_{\text{noy-el}} + V_{el-el} \quad (\text{I.8})$$

La solution de l'équation de Schrödinger avec ce Hamiltonien

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{I.9})$$

$$H_e \Psi_e = [T_{el} + V_{noy-el} + V_{el-el}] \Psi_e \quad (\text{I.10})$$

L'équation obtenue (I.10) est plus simple que l'originale (I.1), mais elle reste toujours très difficile à résoudre à cause de la complexité des interactions électron-électron. C'est pourquoi elle est souvent couplée à l'approximation de Hartree [3].

#### ***1.1.4. Approximation de Hartree :***

En 1928, Hartree propose une méthode permettant de calculer des fonctions d'ondes poly électroniques approchées en les écrivant sous la forme de produits de fonctions d'ondes mono électroniques [3]. Hartree considère que chaque électron se déplace de façon indépendante dans le champ moyen créé par les noyaux et l'ensemble des autres électrons [3]. Qui permet de décrire la fonction d'onde du système électronique comme le produit direct des fonctions d'ondes mono-électronique [4] telle que :

$$\Psi_{approchee} = \Psi_{1(r_1)} \Psi_{2(r_2)} \dots \Psi_{N(r_N)} \quad (\text{I.11})$$

#### ***1.1.5. Approximation Hartree-Fock :***

En 1930, Fock a montré que la fonction d'onde de Hartree, est en contradiction avec le principe d'exclusion de Pauli, faute d'être antisymétrique (étant donné que les électrons sont des fermions) lors d'un échange de deux particules quelconque. Plus tard, la fonction d'onde de Hartree est remplacée par un déterminant de Slater [5] des fonctions d'onde monoélectroniques qui garantit l'antisymétrie de la fonction d'onde, conduisant au système d'équations de Hartree-fock suivant :

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext} + V_i \right] \phi_i(r) + V_{ext} \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \quad (\text{I.12})$$

$V_{ext} \phi_i(r)$  : Est le terme non-local d'échange ajouté. Son expression est la suivante:

$$V_{ext} \phi_i(r) = \sum_{i \neq j} \int dr' \frac{\phi_i^*(r') \phi_i^*(r')}{|r-r'|} \phi_i(r) \quad (\text{I.13})$$

Le système d'équations (II-6) se résout de manière auto cohérente dans la mesure où le potentiel dépend de la fonction d'onde.

Elle reste cependant insuffisante du fait qu'elle ne tient pas compte des effets de corrélations électroniques. Ces effets sont d'origine quantique. Cette méthode peut être améliorée en incluant les effets de corrélation à travers une méthode qui s'appelle « l'interaction des configurations » avec une combinaison de plusieurs déterminants de Slater, conduisant en principe à la fonction d'onde exacte mais très coûteuse en temps de calcul. En effet, le nombre de configurations augmente très vite avec le nombre d'électrons du système. Cependant, elle ne peut traiter que les systèmes avec peu d'électrons comme les petites molécules.

## ***I.2. La théorie de la fonction de la densité (DFT) :***

### **I.2.1.Introduction :**

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) décrit un système en considérant la densité  $\rho(r)$  comme la grandeur de base. Historiquement, les premières idées de la théorie de la fonctionnelle de la densité furent introduites dans les travaux de Thomas [6] et Fermi [7] en 1927. Notons cependant que la DFT a été réellement établie avec l'apparition des théorèmes exacts d'Hohenberg et Kohn en 1964 [8] qui relie l'énergie de l'état fondamental et sa densité de façon unique:

### **I.2.2. Théorèmes de Hohenberg et Kohn :**

Le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est basé sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn [8] :

Premièrement, Hohenberg et Kohn ont montré que l'énergie totale d'un gaz d'électrons en présence d'un potentiel extérieur est une fonctionnelle unique de la densité électronique  $\rho(r)$  :

$$E = E[\rho(r)] \quad (\text{I.14})$$

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. Les autres propriétés de l'état fondamental sont fonctionnelles de cette densité

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{I.15})$$

$\rho_0$  la densité de l'état fondamentale

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

$$E[\rho(r)] = \int V_{ext}(r)\rho(r) dr + F[\rho] \quad (I.16)$$

Où  $V_{ext}$  représente le potentiel externe agissant sur les particules.

La fonctionnelle  $F[\rho(r)]$  est universelle pour n'importe quel système à plusieurs électrons puisqu'elle ne dépend que de la densité des électrons. Si la fonctionnelle  $F[\rho(r)]$  est connue. Alors, il sera relativement facile d'utiliser le principe variationnel pour déterminer l'énergie totale et la densité électronique de l'état fondamental pour un potentiel extérieur donné. Malheureusement, le théorème de Hohenberg et Kohn ne donne aucune indication sur la forme de  $F[\rho(r)]$ .

### I.2.3. Les équations de Kohn-Sham :

Kohn et Sham[9] ont écrit la densité électronique comme étant la somme des densités des particules libres. Ils ont utilisé le principe variationnel pour obtenir l'énergie de l'état fondamental et la densité donnant la fonctionnelle  $E_{xc}[\rho]$ . Par conséquent, la fonctionnelle d'énergie  $E_{V_{ext}}[\rho]$  s'écrit sous la forme :

$$E_{V_{ext}}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho] + V_{ext}[\rho] \quad (I.17)$$

Où :

$T_0$ : est l'énergie cinétique du système sans interaction

$V_H$ : désigne le terme Hartree (l'interaction de Coulomb classique entre les électrons).

$V_{xc}$ : le terme qui comprend les effets de l'échange et de la corrélation.

$V_{ext}$ : inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux.

Le terme de Hartree et celui de l'énergie cinétique jouent un rôle important dans la description des états des électrons libres. Ces termes sont les plus importants dans la description des états des électrons libres. La différence entre l'énergie cinétique réelle et celle des électrons non interagissant ainsi que la différence entre l'énergie d'interaction réelle et celle de Hartree sont prises en compte dans l'énergie d'échange et corrélation  $E_{xc}[\rho]$ .

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(r) + \int \frac{d^3r_j}{|r_i-r_j|} \rho(r_j) + V_{ext}(r)\right]\Psi_i(r) = \varepsilon\Psi_i(r) \quad (\text{I.18})$$

Le potentiel d'échange et corrélation est donné par la fonctionnelle dérivée :

$$V_{xc}(r) = \frac{\partial E_{xc}[\rho]}{\partial \rho(r)} \quad (\text{I.19})$$

Et la densité de l'état fondamental est donnée par une somme sur l'ensemble des orbitales occupées :

$$\rho(r) = \sum_{occup} |\varphi_i(r)|^2 \quad (\text{I.20})$$

La détermination de l'état fondamental du système revient alors à résoudre d'une manière auto-cohérente, l'ensemble des équations (I-19), appelées équations de Kohn et Sham. La somme des trois termes  $V_H + V_{xc} + V_{ext}$  constitue un potentiel effectif  $V_{eff}$ . Cette méthode est formellement exacte, mais pour le calcul pratique de l'énergie d'échange et corrélation, qui est une fonctionnelle de la densité, nécessite l'introduction de certaines approximations.

#### I.2.4 Approximation de la densité locale (LDA) :

L'approximation de densité locale " LDA " [10] - [11] repose sur l'hypothèse que les termes d'échange et de corrélation ne dépendent que de la valeur locale de la densité  $\rho(r)$ . L'énergie d'échange et de corrélation s'exprime de la manière suivante :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] d^3r \quad (\text{I.21})$$

Où :

$\varepsilon[\rho(r)]$  : est la densité d'énergie d'échange et de corrélation par particule d'un gaz d'électrons uniforme. Elle est déterminée par des procédures de paramétrisation. Elle est divisée en deux contributions ; énergie d'échange et énergie de corrélation :

$$\varepsilon_{xc}(r) = \varepsilon_x(r) + \varepsilon_c(r) \quad (\text{I.22})$$

#### Remarque :

La LDA suppose qu'en un point  $r$ , l'énergie d'échange et de corrélation par atome, d'un gaz électronique homogène, notée  $\varepsilon_{xc}(r)$  est égale à l'énergie d'échange et de corrélation d'un gaz d'électrons non homogène, mais ayant la même densité  $\rho(r)$ .

Pour l'approximation locale de la densité de spin (LSDA) on prend en considération la polarisation de spin (spin haut et spin bas).

$$E_{xc}^{LDA}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] d^3r \quad (\text{I.23})$$

### I.2.5. L'approximation du gradient généralisé GGA :

Dans plusieurs cas, la LDA a donné des résultats fiables, mais dans d'autres cas, elle a été moins exacte comparée aux données expérimentales. La plupart des corrections introduites à la LDA reposent sur l'idée qui consiste à tenir compte des variations locales de la densité. Pour cette raison le gradient de la densité électronique a été introduit conduisant à l'approximation du gradient généralisé (GGA, generalized Gradient Approximations), dans laquelle l'énergie d'échange et de corrélation est exprimée en fonction de la densité électronique et de son gradient :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int \rho(r) f[\rho(r), \nabla\rho(r)] d^3r \quad (\text{I.24})$$

$F[\rho(r), \nabla\rho(r)]$  étant la fonction d'échange et de corrélation dépendante de la densité électronique et de son gradient.

Plusieurs paramétrisations sont utilisées pour la GGA. Parmi elles celles de Perdew et al. (1992) [12], et Perdew et al. (1996) [13]. Il existe plusieurs versions de la GGA les plus utilisées sont celles de Perdew et Wang [14] et Perdew [15].

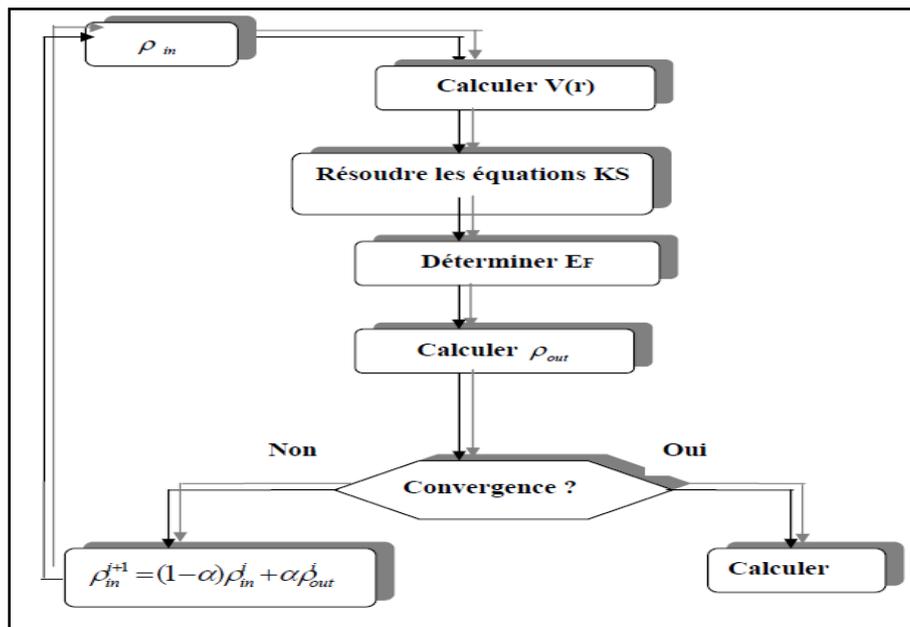


Figure I. 1: Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

**I.3. La méthode du pseudo-potentiel :**

L'utilisation de la fonctionnelle de la densité par les équations de Kohn et Sham fait intervenir pour chaque système chimique tous les électrons de chaque atome, ce qui a un impact sur le temps de calcul. Le principe des pseudopotentiels repose sur la séparation des électrons en deux parties : les électrons de valence et les électrons de cœur. En terme de fonction d'onde, cela revient à supposer que la probabilité de trouver un électron de cœur loin du noyau est quasiment nulle. La création d'un nouveau potentiel correspondant aux électrons de cœur supposés gelés dans une configuration atomique de référence augmente la vitesse de calcul de  $V_S(r)$  dans les équations de Kohn et Sham. Ce potentiel dépend peu de l'environnement qui entoure l'atome, il peut donc être calculé une fois pour toute.

En appliquant cette idée aux équations de Kohn et Sham, devient :

$$[-\nabla^2 + V_S(r)]\Psi_i = E_i\Psi_i \rightarrow [-\nabla^2 + V_S(r) + V_R(r)]\varphi_i = E_i\varphi_i \quad (\text{I.25})$$

Où  $\varphi_i$  représente les fonctions d'onde de valence et  $V_R$  et le potentiel ajouté à  $V_S$  qui donne le pseudopotentiel :

$$V_{\text{Pseudo}} = V_S + V_R \quad (\text{I.26})$$

Outre le fait que les valeurs propres des fonctions d'onde de valence  $E_i$  doivent être identiques à celles des fonctions d'onde du système total, un certain nombre de règles concernant les fonctions d'onde doivent être vérifiées :

1. Les pseudo-fonctions de valence sont sans nœuds et ne sont donc plus orthogonales aux fonctions de cœur.
2. Les pseudo-fonctions sont identiques aux fonctions du système total au de là d'un rayon de coupure  $r_c$
3. La continuité des fonctions d'onde est valide en tout point.
4. La continuité des dérivées des fonctions d'onde existe en tout point.
5. La conservation de la norme est de mise  $\int \varphi^*(r) \varphi(r) r^2 dr = \int \Psi^*(r) \Psi(r) r^2 dr$ .

Cette dernière condition trop restrictive en pratique sur la forme des pseudo-fonctions pour  $r < r_c$  peut être levée en introduisant des corrections a posteriori.

De nombreux travaux ont contribué à l'élaboration des pseudopotentiels qui amènent des fonctions d'onde de plus en plus proches de celles obtenues dans le cas où tous les électrons sont pris en compte (calcul tous-électron).

Trois grandes familles de pseudo potentiels ont ainsi été créées : les pseudo potentiels dits à conservation de norme, les pseudopotentiels de Vanderbilt appelés ultra-mous ou US [19] et les pseudopotentiels projetés PAW (Projector Augmented Waves) qui ne conservent pas la norme [20].

La non conservation de la norme dans les deux cas précédents est compensée a posteriori par l'ajout d'un terme d'augmentation (correction) à la densité électronique.

#### ***1.4. Le code CASTEP***

L'ensemble des calculs présentés dans le manuscrit ont été réalisés en utilisant le code de modélisation numérique appelé CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) développé à l'origine en 1988 par Payne et al [21-23]. Il s'agit d'un code de calcul ab-initio et il fait partie d'un ensemble de logiciels de simulation numériques nommé Material Studio commercialisés par Accélérés. CASTEP utilise la DFT pour la résolution de l'équation de Schrödinger et emploi des conditions périodiques, des supercelles, une intégration sur la zone de Brillouin, une base d'ondes planes et des pseudopotentiels pour calculer l'énergie totale d'un système donné. Les fonctions d'ondes électroniques sont développées dans une base d'ondes planes définie par l'utilisation des conditions aux limites périodiques et le théorème de Bloch. Le potentiel électron-ion est décrit au moyen de pseudopotentiels ab-initio avec les deux formulations ; pseudopotentiels à norme conservée et pseudopotentiels ultra-doux. Des procédures de minimisation directe de l'énergie sont utilisées pour obtenir, les fonctions d'onde électroniques et la densité de charge correspondante. Seules les orbitales de Kohn-Sham dont le vecteur  $G$  appartient à la partie irréductible de la zone de Brillouin sont calculées, car la densité électronique peut être construite uniquement à partir de ces états, avec une étape de symétrisation qui fait appel aux matrices du groupe d'espace. Une étape de symétrisation est aussi nécessaire pour les forces et le stress. En conséquence, la densité électronique est explicitement symétrisée. L'utilisation de la symétrie permet de réduire de manière importante le temps de calcul, en particulier pour les petites mailles contenant beaucoup de points- $k$  car CASTEP est efficacement parallélisé en fonction des points- $k$ . Comme mentionné précédemment, CASTEP utilise la méthode de Monkhorst-Pack pour l'échantillonnage de la zone de Brillouin. Cette méthode permet de générer un quadrillage uniforme le long des trois axes de l'espace réciproque. La symétrie du système est utilisée pour réduire le nombre de points- $k$  de la cellule primitive. Les forces exercées sur les atomes, le tenseur des contraintes et par conséquent les déplacements atomiques et les variations des paramètres de la maille cristalline sont toujours symétrisés.

**References Bibliographiques**

- [1] J. Chelikowsky and M.L. Cohen, *phys. Rev B*14, 552(1976)
- [2] M. Born and R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* 84, 457(1927)
- [3] D. R. Hartree, *Proc. Cambridge philos. Soc.*24, 89(1928)
- [4] M. Born, J. R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* 87, 457(1927)
- [5] J. C. Slater. *Phys. Rev*, 34 :1293, 1929.14
- [6] L. H. Thomas. *Proc. Camb. Philos. Soc.* 23, 542(1927)
- [7] E. Fermi, *Z. Phys.* 48, 73(1928)
- [8] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B*136, 864(1964)
- [9] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* 140, A 1133(1965)
- [10] W. Kohn, *Phys. Rev*, 34, 737(1986)
- [11] W. E. Pickett, « pseudo-potentiel méthode in Condensed matter. Applications », North-Holland \_ Amsterdam (1989)
- [12] J. P. Perdew , J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pedreson, D. J. Singh and C. Fiolhais, *Phys. Rev. B* 46, 6671 (1992)
- [13] J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865 (1996)
- [14] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B* 33, 8800 (1986)
- [15] J. P. Perdew in ‘Electronic Structure of Solids’, Academie Verlag, Berlin, 11(1991).
- [16] U. Von Barth, C.D. Gelatt. *Phys. Rev. B*, 21, 2222 (1980).
- [17] Warren E. Pickett, *Computer Physics Repport* 9, 115 (1989).
- [18] D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B*, 41, 7892 (1990).

[19] G. Kresse, D. Joubert, Phys. Rev. B, 59, 1758-1775 (1999).

[20] STEWART J. CLARK, MATTHEW D. SEGALL, CHRIS J. PICKARD, PHIL J. HASNIP, MATT I. J. PROBERT, KEITH REFSON AND MIKE C. PAYNE, Z. KRISTALLOGR. 220 567 (2005)

[21] M.D. SEGALL, P.J. D LINDAN, M.J. PROBERT, C.J. PICKARD, P.J. HASNIP, S.J. CLARK AND M. C.PAYNE, J. Phys. Cond. Matter. 14 2717.(2002).

[22] M.C. PAYNE, M.P. TETER, D.C. ALLAN, T.A. ARIAS AND J. D. JOANNOPOULOS, Rev.Mod. Phys. 64 1045. (1992)

[23] H. J. MONKHORST AND J. D. Pack. Phys. Rev. B 13 5188(1976).

## ***CHAPITRE II***

### ***Rappel sur les propriétés physiques des semi-conducteurs III-V***

## II.1. Introduction

Les propriétés structurales et élastiques sont importantes pour l'étude et l'analyse des autres propriétés physiques (électroniques...etc.) d'un matériau d'un point de vue microscopique. Dans cette partie on fait un rappel à quelques notions générales sur les différentes structures cristallines telles que, zinc-blende, ainsi que sur les propriétés élastiques et électronique des solides cubiques.

## II.2. La notion des semi-conducteurs :

Un semi-conducteur est un matériau caractérisé par des propriétés physique déterminées obéissant à des lois typiques évoquant l'ensemble des composants et dispositifs dont le fonctionnement est étroitement lié à l'utilisation de ces Semi-conducteurs [1]

## II.3. Les différents types des semi-conducteurs :

### II.3.1 Semi-conducteur intrinsèque :

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsqu'il ne possède aucun défaut physique, ni défaut physique. Sa structure ne présente aucune lacune, aucunes dislocations, et il n'y a aucune impureté dans le réseau (bonne qualité cristallographique). La résistivité d'un tel semi-conducteur est élevée, son usage est principalement de servir de matière première pour la fabrication des semi-conducteurs extrinsèques. En pratique, il subsiste toujours un certain nombre de défauts ou d'impuretés, et le semi-conducteur intrinsèque représente en fait un cas limite idéal. Ces semi-conducteurs ne conduisent pas ou très peu le courant sauf s'ils sont portés à haute température [2]. Dans un semi-conducteur intrinsèque, les porteurs de charge ne peuvent être fournis que par les atomes du réseau, un lien de valence est rompu par l'énergie d'agitation thermique, un électron est ainsi libéré, il vient d'effectuer une transition de la bande de valence à la bande de conduction, on parle de la conductivité intrinsèque qui augmente avec la température.

### II.3.2 Semi-conducteur extrinsèque :

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur pour lequel, à l'un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur pour lequel, à l'équilibre thermodynamique, la concentration en électrons est différente de la concentration en trous. Cette différence est obtenue le plus souvent en introduisant dans le matériau de manière intentionnelle une faible concentration d'impuretés de nature contrôlée. Cet ajout est appelé dopage. Il a une influence considérable sur les propriétés des semi-conducteurs. Les éléments physiques choisis comme dopant présentent une valence différente de celle du semi-conducteur. Ils se positionnent dans son réseau en site substitutionnel, c'est-à-dire en remplacement de certains atomes.

### II.3.3 Semi-conducteurs dopés :

Le dopage peut être créé de deux manières : Si le cristal est dopé avec des atomes possédant un électron de valence supplémentaire, cet électron ne sera pas lié à un atome en particulier et pourra se déplacer librement à travers le réseau : type-n Si le cristal est dopé avec des atomes possédant un électron de valence de moins, il y aura donc un trou parmi les électrons de valence. Ce trou peut être rempli par un électron de valence d'un atome voisin, mais cela créera un autre trou. Ce trou peut être vu comme une charge positive mobile type-p.

- a. **Type-n** : Les atomes d'impureté (appelés donneurs) produisent des niveaux remplis au-dessous de la bande de conduction. Les électrons de ces niveaux peuvent donc atteindre aisément ( $\sim 0,05$  eV) la bande de conduction. Ce sont les porteurs de charge mobiles. Les électrons sont dans ce cas appelés porteurs majoritaires. Cependant il existe aussi quelques trous créés par l'énergie thermique. Ces trous qui ne proviennent pas des impuretés sont appelés porteurs minoritaires.
- b. **Type-p** : Les atomes d'impureté (appelés accepteurs) produisent des niveaux vides au-dessus de la bande de valence. Les électrons de la bande de valence peuvent atteindre ces niveaux aisément ( $\sim 0,05$  eV). Les trous laissés derrière eux dans la bande de valence sont les porteurs de charge mobiles. Les trous sont dans ce cas appelés porteurs majoritaires. Cependant il existe aussi quelques électrons créés par l'énergie thermique. Ces électrons libres qui ne proviennent pas des impuretés sont appelés porteurs minoritaires [3] .

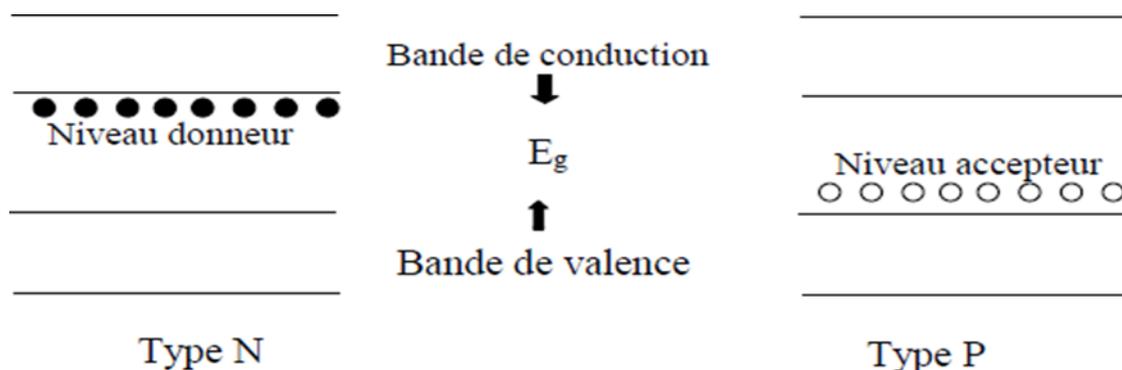


Figure II.1 : La structure de bandes des semi-conducteurs type n et p

### II.4 Propriétés structurale et élastique et électronique

#### II.4.1 Propriétés structurales :

La structure d'un matériau correspond au motif d'arrangement de ses éléments L'arrangement des atomes est aléatoire (verres) et l'état cristallisé où les atomes sont arrangés régulièrement

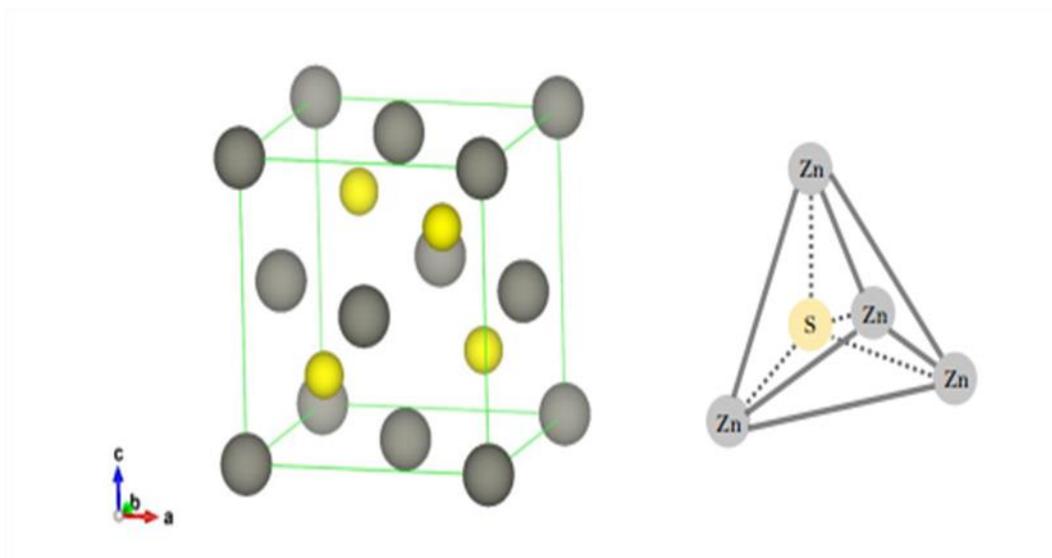
aux nœuds d'un réseau périodique (cristaux ioniques, cristaux covalents, métaux et cristaux moléculaires).

En générale, les semi-conducteurs se cristallisent dans l'une des structures suivantes : structure diamant (Si, Ge), structure cubique zinc blende (*AlP*, *InN*, *Bas*, ...etc), structure wurtzite, hexagonale (*AlN*, *GaN*, ...etc). [4]

### a. Structure zinc-blende :

Dans la structure zinc-blende (appelée aussi sphalérite), les quatre atomes de carbone placés à l'intérieur dans la structure diamant sont remplacés par quatre atomes d'un autre élément. Dans le cas de *ZnS* (semi-conducteurs de la classe II-VI) les quatre atomes de soufre S (en jaune) occupent les sites de coordonnées

$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ,  $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ ,  $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$  et  $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ . Les atomes du zinc occupent les nœuds du réseau cfc (en gris). Figure II.2



**Figure II.2 :** Structure zinc-blende de *ZnS* avec le tétraèdre (group d'espace n°216,  $F\bar{4}3m$ )

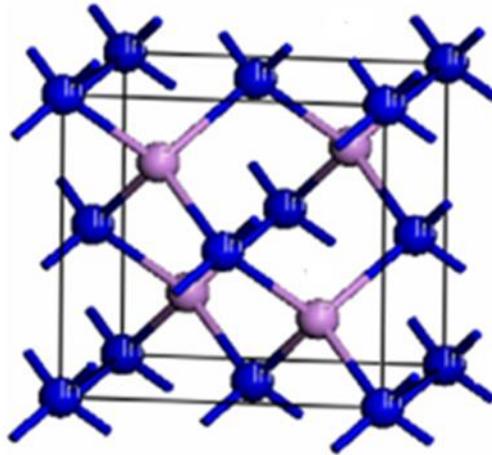


Figure II.3 : Structure zinc blende des composés binaires

## II.4.2. Propriétés élastiques :

### II.4.2.1 .Introduction :

Une contrainte est définie comme un état de pression dans lequel se trouve un matériau lorsqu'on lui applique une ou plusieurs forces. Il s'agit d'une réaction distribuée dans la matière, par conséquent, les atomes se réorganisent pour compenser les forces extérieures [5].

On peut distinguer deux types de déformations, la déformation élastique qui est réversible et la déformation plastique qui ne l'est pas. On s'intéresse pour l'élasticité linéaire qui concerne les petites déformations proportionnelles à la sollicitation, dans cette gamme, L'allongement est proportionnel à la force dans le cas d'un étirement.

De nos jours, il est possible de calculer l'élasticité en utilisant les calculs ab-initio, ces techniques sont avérés très puissant en fournissant non seulement des modules d'élasticités en bon accord avec des mesures expérimentales [6], mais, ils donnent des prédictions dans des conditions extrêmes qui ne sont pas facilement accessible à l'expérience, mais ayant des applications larges dans les champs s'étendant de la physique du solide à la séismologie [7,8].

### II .4.2.2. Tenseur des déformations :

Sous l'action de forces extérieures, les corps solides se déforment [9]. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position au repos de l'objet pour laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet. Les éléments du tenseur des déformations  $\epsilon_{ij}$  sont définis d'une façon générale par la relation suivante :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{II.1}$$

Avec ( $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ )

Le tenseur de déformation symétrique s'écrit :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{II.2}$$

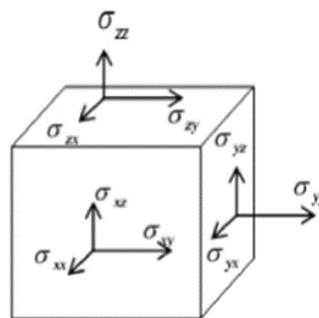
éléments diagonaux de ce tenseur définissent les déformations d'élongation, et expriment un changement de longueur dans les directions  $x$ ,  $y$  ou  $z$  alors que les déformations notées  $\varepsilon_{xy}$ ,  $\varepsilon_{yz}$ ,  $\varepsilon_{zx}$  représentent les variations d'angles entre les axes  $Ox$ ,  $Oy$  et  $Oz$ . Les composantes de la déformation sont des rapports de longueurs et par conséquent ils n'ont donc pas de dimension.

#### II.4.2.3 .Le tenseur des contraintes :

La contrainte est par définition, la force qui s'exerce sur l'unité de surface du solide. Le tenseur des contraintes, noté  $\sigma$ , est également représenté par une matrice  $3 \times 3$  symétrique, comme le tenseur des déformations.

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{II.3}$$

Dans cette notation, le premier indice ( $i$ ) indique la direction de la force et le deuxième indice ( $j$ ) indique la normale à la facette sur laquelle s'applique la force (voir figure 2.4, ci - dessous



**Figure II.3 :** Les composantes du tenseur des contraintes.

Les composantes  $\sigma_{ii}$  ont été appelées contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement à une facette de normale  $O_x$ ,  $O_y$  ou  $O_z$ . Les éléments  $\sigma_{ij}$  avec  $j \neq i$  sont les contraintes tangentielles puisque elles agissent dans le plan de la surface. Les composantes de la contrainte ont la dimension d'une force par unité de surface ou d'une énergie par unité de volume. [10]

#### II.4.2.4. Relation contrainte-déformation :

Deux tenseurs d'ordre 2 peuvent être définis : le tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  et le tenseur des déformations  $\varepsilon_{ij}$ . Ils sont tous les deux symétriques, c'est à dire que  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  et  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$  en théorie de l'élasticité linéaire, il existe une relation linéaire entre  $\sigma_{ij}$  et  $\varepsilon_{ij}$  donnée par la loi de Hooke généralisé

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad \text{II.4}$$

$C_{ijkl}$  est un tenseur d'ordre 4, appelé tenseur de rigidité élastique. Le nombre de combinaisons [11]

Dans le cas le plus général et par raison de symétrie de  $\sigma_{ij}$  et des  $\varepsilon_{ijkl}$  appliquant la relation de Maxwell  $C_{ijkl} = C_{klij}$  [12] les éléments  $C_{ijkl}$  se réduisent indépendants. En outre, la symétrie du solide cristallin réduit notablement ce nombre Les [13] constantes  $C_{ijkl}$  sont donc notées par une nouvelle notation (notation des Voigt), à savoir  $C_{\alpha\beta}$  [11;13], telles que les indices  $ij$  ou  $kl$  sont abrégés en remplaçant chaque initialement quadruplés par un seul indice  $\alpha$  ou  $\beta$ . Ainsi, les abréviations seront comme suit :

Notation tensorielle	Xx	yy	zz	Yz	xz
Notation matricielle	0	2	4	6	8

La loi de Hooke généralisée peut écrire sous la forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad \text{II.5}$$

#### II.4.2.5 Tenseur des Constantes élastiques :

Pour les cristaux de symétrie ; le tenseur des constantes élastiques se simplifie par symétrie [14] et prend la forme suivante ;

$$(C_{ijkl}) = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad \text{II.6}$$

#### II.4.2.6. Les conditions de stabilité mécanique :

L'étude de la dépendance en pression des constantes élastiques peut nous donner des informations sur l'instabilité mécanique qui est associée avec la transition de phase. A partir d'une certaine valeur de pression, un nouvel arrangement atomique devient impératif et une nouvelle structure est plus appropriée que la structure courante. Les critères de stabilité de BORN sont un ensemble de conditions qui doivent être satisfaites par les constantes élastiques pour que le cristal soit stable. Pour le système cubique ces critères sont donnés par les équations suivantes [15] :

$$C_{11} + 2C_{12} > 0, \quad C_{44} > 0, \quad C_{11} - C_{12} > 0 \quad \text{II.7}$$

Par la suite, il s'est avéré que les critères de Born ne sont valables que dans le cas de pression nulle. Les critères de stabilité sont ensuite généralisés pour donnés un ensemble de conditions valables à pression non nulle, et qui se ramènent aux conditions de Born à pression nulle. Ces critères généralisés pour le système cubique sont donnés maintenant par les équations suivantes.

$$K = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + P) > 0 \quad \text{(II.7-a)}$$

$$G = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12} - 2P) > 0 \quad \text{(II.7-b)}$$

$$G' = C_{44} - P > 0 \quad \text{(II.7-c)}$$

#### II.4.2.7. Facteur d'anisotropie :

L'anisotropie est la propriété d'une grandeur physique de dépendre de la direction, et représente le rapport entre la constante élastique et le module de cisaillement . On l'exprime en fonction des constantes élastiques par la relation [16]:

$$A = 2C_{44} / (C_{11} - C_{12}) \quad \text{II.8}$$

Pour un matériau isotrope,  $A = 1$ , alors que toute valeur différente de l'unité indique une anisotropie et l'écart traduit le degré d'anisotropie.

### II.4.2.8. Modules élastiques isotropes :

#### a. Module de Young

Le module de Young ou module d'élasticité longitudinale ou encore module de traction relie la contrainte de traction ou de compression ( $\sigma$ ) au début de la déformation ( $\epsilon$ ) d'un matériau isotrope. Ce paramètre s'exprime en fonction des coefficients de Lamé  $\lambda$  et  $\mu$  et des constantes élastiques par [17]

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{(\lambda + \mu)} = \frac{C_{12}(3C_{12} + 2C_{44})}{(C_{12} + C_{44})} \quad \text{II.9}$$

#### b. Coefficient de Poisson

Le coefficient de poisson  $\nu$  peut être donné en fonction des modules de rigidité  $B$  et de cisaillement  $G$  comme suit :

$$\nu = 0.5 \left( B - \frac{2}{3}G \right) / \left( B + \frac{1}{3}G \right)$$

#### c. Modules de rigidité, module de cisaillement :

La variation de volume pour une pression  $p$  est inversement proportionnelle à  $B$ , qui est appelé module de rigidité à la compression.

Plus  $B$  augmente plus le matériau est peu compressible, et si  $B = \infty$ , le matériau est dit incompressible.

Pour le système cubique le module de rigidité  $B$  peut être exprimé comme une combinaison linéaire des deux constantes élastique  $C_{11}$  et  $C_{12}$  donnée par [18]

$$B = (C_{11} + 2C_{12}) / 3 \quad \text{II.10}$$

Pour le système cubique le module de cisaillement  $C_s$  aussi peut être exprimé comme une combinaison linéaire des deux constantes élastique  $C_{11}$  et  $C_{12}$  qu'est donnée par [19]

$$C_s = (C_{11} - C_{12}) / 2 \quad \text{II.11}$$

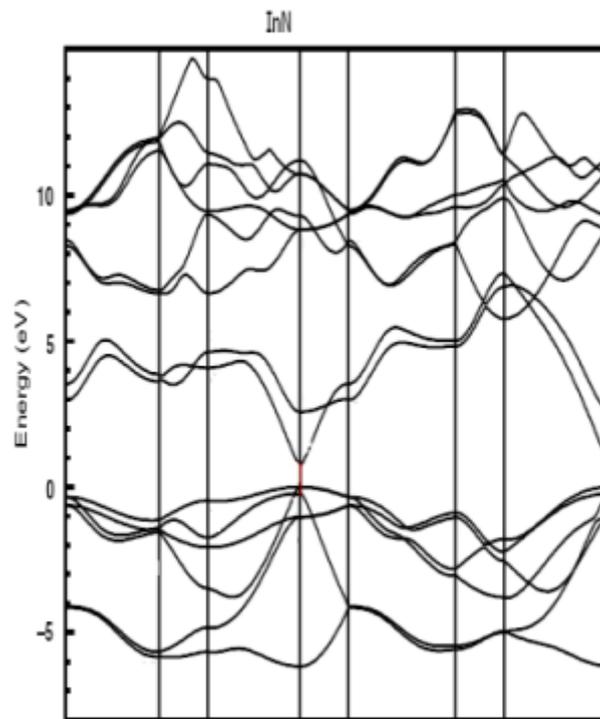
### II.4.3. Propriétés électroniques :

Les matériaux semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire Contribuant aux liaisons physique. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétéro structures. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome (comme exemple le gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As), et forment des liaisons Covalentes tétraédriques de type  $sp^3$ : 4 orbitales liantes et 4 orbitales anti-liantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence.

Cette bande est pleinement occupée par des électrons à  $T=0K$ , pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales anti-liantes donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur  $E_g$  (band gap en anglais). Pour les semi-conducteurs à gap direct [20] le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point  $\Gamma$ .

#### II.4.3.1. Structure de bande d'énergie électronique :

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction **Figure II.4** Ce sont la bande de valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute, et la bande interdite qui les sépare qui déterminent principalement les propriétés de transport du semi-conducteur.[21]



**Figure II-4 :** Structure de bande d'InN

#### II.4.3.2. Gap direct – Gap indirect :

Considérons le gap des différents semi-conducteurs. Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence. Les structures de bande

représentées dans la figure II.13 font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteur. Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des  $k$  et les semi-conducteurs à gap direct pour lesquels ces extrema sont situés au même point de l'espace des  $k$  (au centre de la zone de Brillouin, en  $k=0$ ).

Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre ceux qui ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité.

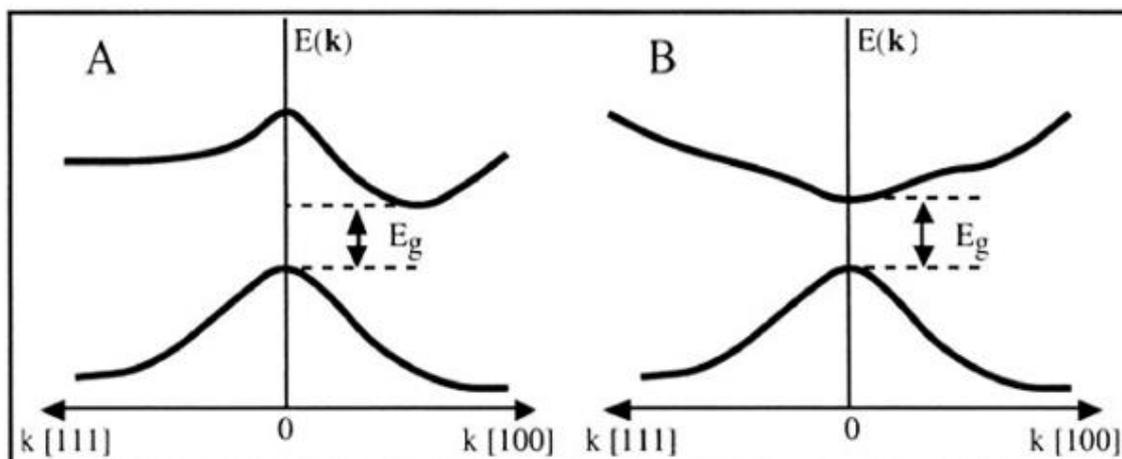


Figure II.5 Structure de bande d'énergie du : A-gap indirect et B-gap direct [22]

### II.5 Applications

Le composé semi-conducteur  $InN$  est utilisé pour de nombreuses applications dont :

- Cellules photovoltaïques à couches minces (construites sur le principe de  $PIN$ )  
Développe depuis les années 1960 ; ce type de cellule présente des avantages (prix inférieur) et des inconvénients (utilisation de matériaux rares et à la toxicité potentiellement élevée ) par rapport aux cellules a base de silicium [23]
- Modulateurs électronique.

### II.6 : Les avantages des semi-conducteurs III-V :

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants :

- Leur propriété semi-isolant (substrat  $SI$ ) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.
- Leur résistance aux radiations.

- Leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 *GHZ* à plus de 100 *GHZ*.

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque *Giga Hertz* [24]

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium

**Références bibliographiques**

- [1] Kara. Mohamed. Wahiba. Thèse de doctorat en physique. Univ de Biskra
- [2] F. Mezrag, Thèse de doctorat, université de Biskra (2012)
- [3] Th.L.Floyd «Électronique : composants et systèmes d'application» 5Ed. Reynald goulet (2004).
- [5] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College: Philadelphia (1976).
- [6] C. S. Zha, H. K. Mao, and R. J. Hemley, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **97**, 13494 (1999).
- [7] L. Stixrude and R. E. Cohen, Science 267, 1972 (1995).
- [8] G. Steinle-Neumann, L. Stixrude, and R. E. Cohen, Nature London 413, 57 (2001).
- [9] A. Gicquel, Diamond and Related Materials, 20(7) (2011) 875
- [10] T. Ouisse; D. Chaussende; L. Auvray, J. Appl. Crys., 43 (2010) 122
- [11] T. Chihi, Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas – Sétif. (2013).
- [12] E. Dieulesaint et D. Royer. Ondes élastiques dans les solides. Application au
- [13] P. Pavlov, A. Khokhlov, Physique du solide Ed.Mir, Moscou, (1989), page 416.
- [14] J Nye. Propriétés physique des cristaux edition dunod paris 1961.
- [15] J. Wang, S. Yip, Phys. Rev. Lett. 71, (1993) 4182.
- [16] R.E. Newnham, Properties of materials: anisotropy, symmetry, structure, Oxford University Press, London, 2005.
- [17] F. Gatt, Mémoire de Master, Université Med khider-Biskra, (2014)
- [18] T. Lei, M. Fanciulli, R. J. Molnar, T.D.Moustakas, Appl. Lett. 59, (1991) 944.
- [19] S. Adachi, Properties of group-IV, III-V and II-VI semiconductors, John Wiley&Sons, (2005).
- [20] S. Data and B. Das, Appl. Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [21] Henry Mathieu, physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Dunod, ISBN 2 10 005654 9, paris, 2001
- [22] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B14, 556 (1976)
- [23] [www.connaissancedesenergie.org](http://www.connaissancedesenergie.org). Org fiche-pédagogique solaire photovoltaïque
- [24] J.Zimmermann, thèse de doctorat d'état " Etude par la méthode Monté Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régime stationnaires et non stationnaire. Application à la simulation de composants submicroniques", université de l'île 1, (1980)

## *CHAPITRE III*

# *Résultats et discussions*

### III.1.Introduction :

Pour mieux comprendre les propriétés fondamentales des matériaux , l'étude sous pression a un effet importante sur les propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs et peut conduire à de nouveaux matériaux avec de nouvelles propriétés de comportement.

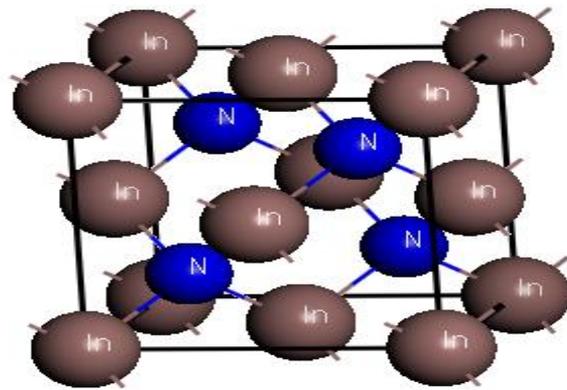
Le but de la présente étude est d'étudier les propriétés physiques du  $InN$  dans la structure zinc-blende, on s'intéresse sur leur dépendance à la pression hydrostatique. Afin d'étudier les propriétés structurales, en particulier le paramètre de maille et le volume, les propriétés élastiques: telles que les trois constantes élastiques et son effet sur la stabilité mécanique du système, le module de compressibilité et sa première dérivée, le module de cisaillement, le facteur d'anisotropie et le module de Young du composé semi-conducteurs  $InN$  dans la phases zinc-blende. Nous proposons d'étudier aussi les propriétés électroniques, à savoir le gap énergétique. L'étude a été faite à pression nulle et sous l'effet de la pression hydrostatique [1].

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) qui mise en œuvre dans le code CASTEP, La fonctionnelle d'échange-corrélation est traitée dans l'approximation du gradient généralisé ( $GGA-PBE$ ). Noter bien qu'on a basé sur les études précédentes tel que le travail A.khaldi et al [1] qui sont démontrés par le calcul DFT que la pression de transition de la phase zinc-blende à la phase  $NaCl$  pour le composé semi-conducteur  $InN$  est environ 8  $GPa$  pour c'est pour cela en a fixé notre plage de pression de notre calcul sous pression dans la phase zinc-blende est de 0 à 8  $GPa$ .

### III.2. Propriétés structurales :

#### III.2.1. Propriétés structurales à pression nulle :

Dans un premier temps, nous avons calculé les paramètres structuraux du composé semi-conducteur  $InN$  en phase zinc blende à l'équilibre c-à-d. à  $P = 0 \text{ GPa}$  et  $T = 0 \text{ K}$ . La figure III.1 présente un prototype de la cellule élémentaire du  $InN$  structure cubique à faces centrées.



**Figure III.1 :** La cellule élémentaire du  $InN$  cubique à faces centrées

La constante de réseau relaxée calculée ( $a_0$ ), le volume de cellule unitaire ( $V_0$ ) pour le  $InN$  en structure zincblende sont représentés dans le tableau III.1, qui contient également les données expérimentales et théoriques disponibles rapportées dans la littérature afin de pouvoir les comparer avec nos résultats actuels. On générale en peut dire que nos valeur des paramètres structuraux trouvés par l'approximation utilisé GGA sont légèrement surestimés par rapport à celle de l'expérience. Notez que l'écart entre notre valeur  $a_0$  calculé et celui rapporté par la valeur expérimentales est de l'ordre 2%.

**Tableau III.1** : Propriétés structurales du composé  $InN$  à l'équilibre, en comparaison avec les autres résultats des autres auteurs [2-7].

Paramètres	Présent calcul	Autres calculs
$a$ (Å)	5.08 <sup>a</sup>	4.92 - 4.98 [2-7]
	5.08 <sup>b</sup>	4.98 [8] Exp
$B$ (GPa)	118.81 <sup>a</sup>	137-161 [2-7]
	118.11 <sup>b</sup>	137 [9] Exp
$B'_0$ (GPa)	7,21	3.9 – 4.4 [2-7]
$V_0$ (Å)	32,9423	-

<sup>a</sup> BFGS

<sup>b</sup> By Murnaghan

La figure III.2 représente les données d'énergie-volume total (E-V) résultantes. Ces données sont adaptées à L'équation d'états de Murnaghan permet d'obtenir le module de compressibilité à l'équilibre noté  $B_0$  et sa dérivé par rapport à la pression noté  $B'_0$ . Les valeurs obtenues pour  $B_0$  et  $B'_0$  sont données dans le tableau III.1. Les données citées dans la littérature sont également présentées à titre de comparaison.

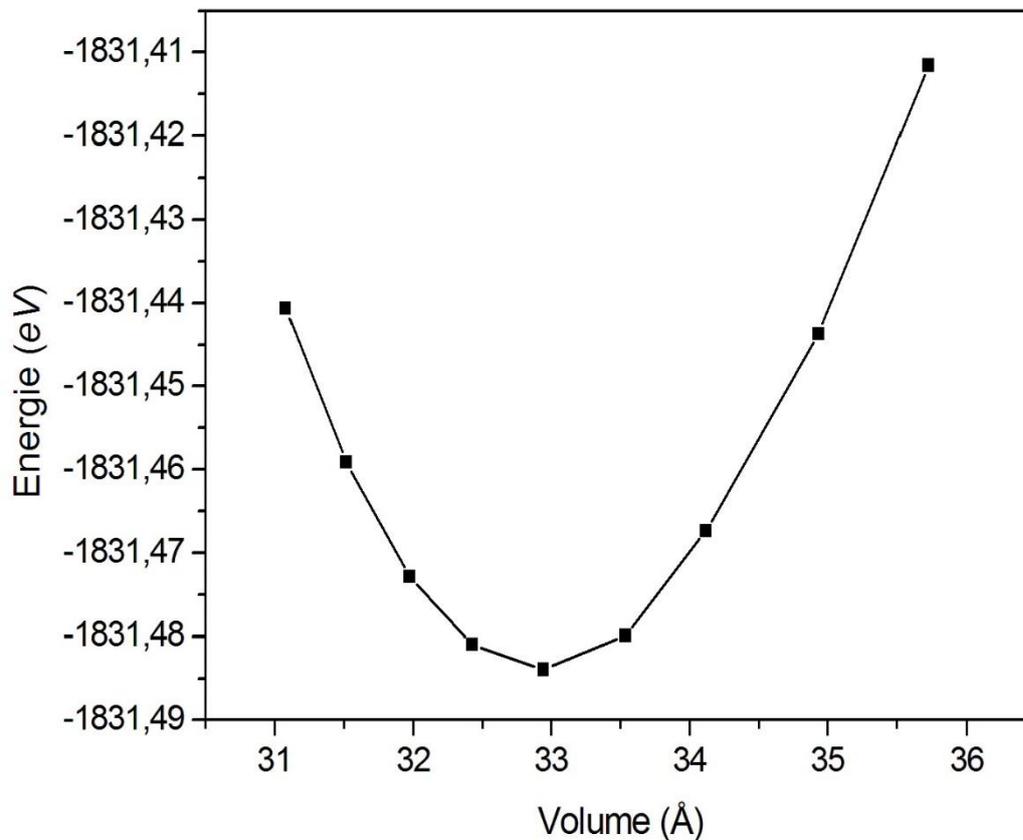
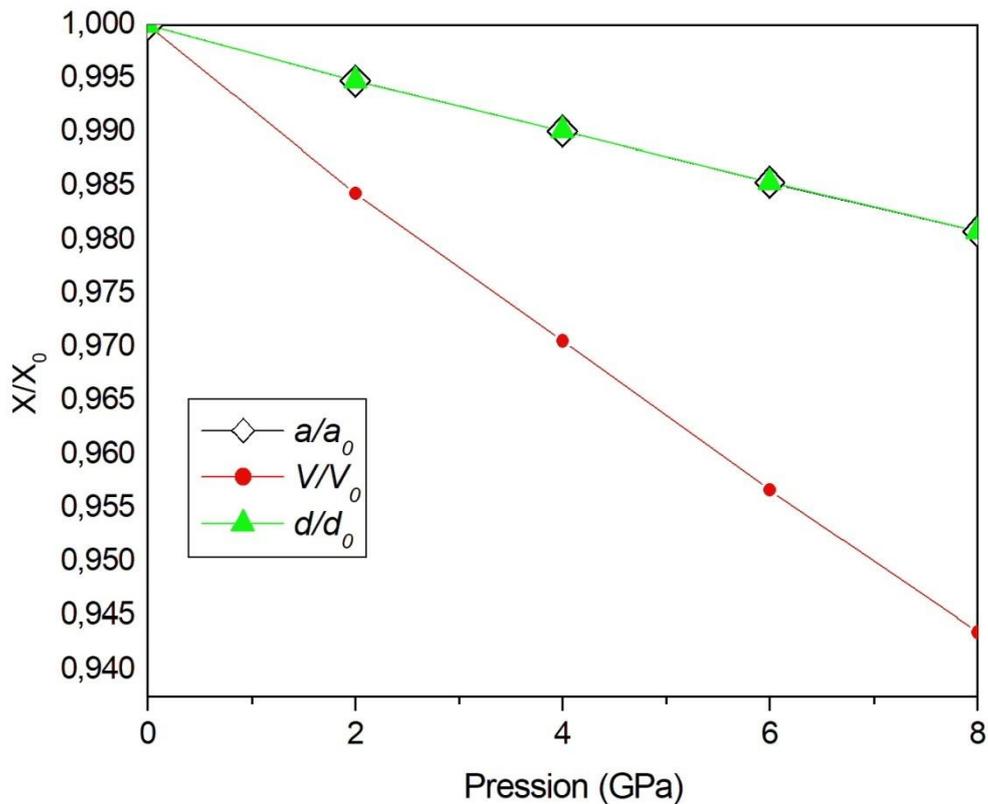


Figure III.2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume.

### III.2.2. l'Effet de la pression sur les propriétés structurales

Dans le but d'étudier la dépendance des paramètres relatifs de la structure en fonction de la pression hydrostatique, la constante de réseau relatif ( $a/a_0$ ), le volume relatif ( $V/V_0$ ) de la maille, ainsi que la distance interatomique relatif ( $d/d_0$ ) du composé  $InN$  en structure zincblende sont calculés pour une série de la pression hydrostatique (entre 0 et 8 GPa). Les résultats de calcul sont présentés sur la figure (III.3). A partir de cette figure ,on remarque qu'il y a une diminution monotone des trois paramètres ( $a/a_0$  , $V/V_0$  et  $d/d_0$  ) avec l'augmentation de la pression hydrostatique .



**Figure III.3 :** Dépendance du ( $a/a_0$ ,  $V/V_0$ , et  $d/d_0$ ) et de la pression du composé  $InN$

### III.3. Etude des propriétés élastiques du $InN$ à pression nulle

#### III.3.1. Constantes élastiques $C_{ij}$ à pression nulle

Dans le but d'étudier les propriétés élastiques du composé semi-conducteurs  $InN$  en structure zinc blende, nous avons besoin de calculer les valeurs des trois constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ , qui sont la base pour caractériser la majorité des paramètres mécaniques de notre composé semi-conducteurs  $InN$ , les valeurs trouvées sont regroupées dans le tableau III.2

En général on peut dire que nos résultats trouvés pour les constantes  $C_{12}$  et  $C_{44}$  à pression nulle sont en bon accord avec ceux trouvés expérimentalement [10] alors que la valeur trouvée de  $C_{11}$  est un peu loin par rapport à la valeur expérimentale

D'après les valeurs du tableau III.2 on remarque que la valeur de  $C_{11}$  est supérieure à  $C_{12}$  et  $C_{44}$  alors notre composé est plus résistant à la compression unidirectionnelle qu'aux déformations de cisaillement. Noter que la valeur élevée de la constante élastique  $C_{11}$  reflète la dureté de la liaison covalente  $In-N$  qui se trouve suivant les directions principales [100], [010] et [001].

	Présent calcul	Valeurs expérimentales
$C_{11}$	155.58	258.1 [10]
$C_{12}$	100.46	115.2 [10]
$C_{44}$	81.20	102.8 [10]
$G$	52.70	-
$A_Z$	2.946	-

**Tableau III.2** Constantes élastiques et valeur du module de cisaillement  $G$ , facteur d'anisotropie de Zener  $A_Z$  du  $InN$  en structure zincblende à  $P = 0$  GPa en comparaison avec les autres valeurs expérimentales.

### III.3.2. Stabilité mécanique à pression nulle

Pour déterminer la stabilité mécanique d'un système cubique il suffit d'obtenir les trois constantes élastiques indépendantes  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ , obéissent aux conditions de Born citées dans le chapitre II et données par les équations suivantes :

$$(C_{11} - C_{12}) > 0. (C_{11} + 2C_{12}) > 0. C_{11} > 0. C_{44} > 0$$

Et le module de compression  $B$  doit satisfaire le critère :

$$C_{12} < B < C_{11}$$

D'après les valeurs calculées des constantes élastiques pour le composé  $InN$ . On peut dire que le critère ci-dessus est vérifié. Indiquant que le composé élastiquement stable dans la phase zinc blende à pression nulle.

### III.3.3 Anisotropie élastique à pression nul

Pour déterminer l'anisotropie du  $InN$  en structure zinc-blende à pression nulle, on a calculé

le facteur d'anisotropie de Zener  $A_Z$ .

$$A_Z = \frac{2 C_{44}}{(C_{11} - C_{12})}$$

Pour un système isotrope  $A_Z = 1$ . Pour un système anisotropie élastique  $A_Z \neq 1$ . La valeur mesurée dans le tableau III.2. Nous avons trouvé que  $A_Z \neq 1$ , donc, on peut déduire qu'il est

élastiquement anisotropes et parce que,  $A_z > 1$ , donc le cristal est plus rigide suivant les directions diagonales  $\langle 111 \rangle$ .

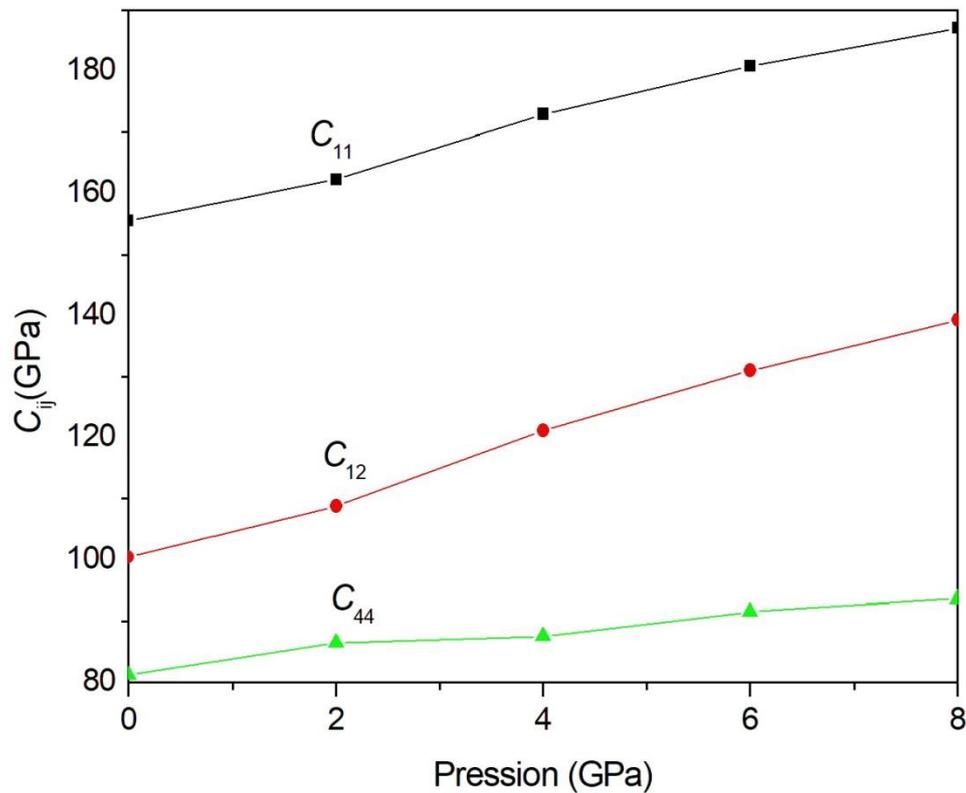
### III.3.4. Ductilité / Fragilité à pression nulle

La ductilité et la fragilité des matériaux sont deux propriétés mécaniques importantes qui sont déterminées directement à partir des constantes élastiques [12]. Une relation empirique entre les propriétés plastiques et les modules élastiques des matériaux semi-conducteurs a rapporté par *Pugh* [13]. Pour étudier le comportement mécanique des semi-conducteurs, on distingue deux paramètres thermodynamiques qui sont le module de cisaillement moyenné de Voigt dénommé  $G$  et le module de compressibilité  $B$ .  $G$  représente la résistance à la déformation plastique du matériau, alors que  $B$  représente la résistance à la fracture. Ainsi, si le rapport  $B/G$  est supérieur à 1.75, le matériau se comporte de manière ductile ; au contraire, lorsque  $B/G$  est inférieur à 1.75, le matériau se comporte de manière fragile. Dans notre cas et d'après nos valeurs calculées pour  $B$  et  $G$ , on a la valeur du  $B/G$  est supérieur à 1.75 ce qui indique que le matériau d'intérêt se comporte de manière ductile.

## III.4. Etude des propriétés élastique du *InN* sous l'effet de la pression :

### III.4.1. Effet de la pression sur les constantes élastiques $C_{ij}$

La variation des constantes élastiques indépendantes ( $C_{ij}$ ) en fonction de la pression hydrostatique du composé semi-conducteurs *InN* est représenté sur la figure III.4. Notez que l'augmentation de la pression jusqu'à 8 *GPa*, les valeurs des constantes  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  augmentent de façon monotone, présentant un comportement presque linéaire.



**Figure III.4 :** Variation des constantes élastiques  $C_{ij}$  en fonction de la pression hydrostatique du composé  $InN$

#### III.4.2 .Effet de la pression sur la stabilité mécanique :

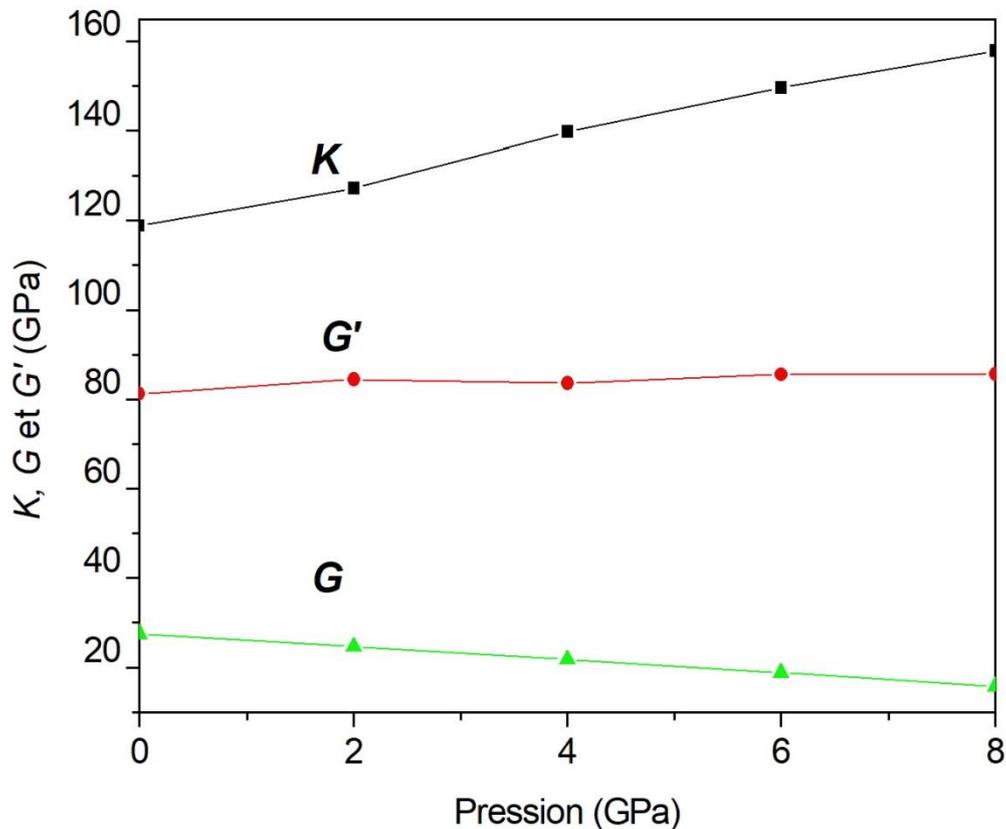
La stabilité mécanique de la structure cubique sous l'effet de la pression pour un tel système nécessite que ses trois constantes élastiques indépendantes  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  réalisent les conditions de stabilité suivantes [1] :

$$K = (C_{11} + 2C_{12} + P) / 3 > 0$$

$$G = (C_{11} - C_{12} - 2P) / 2 > 0$$

$$G' = C_{44} - P > 0$$

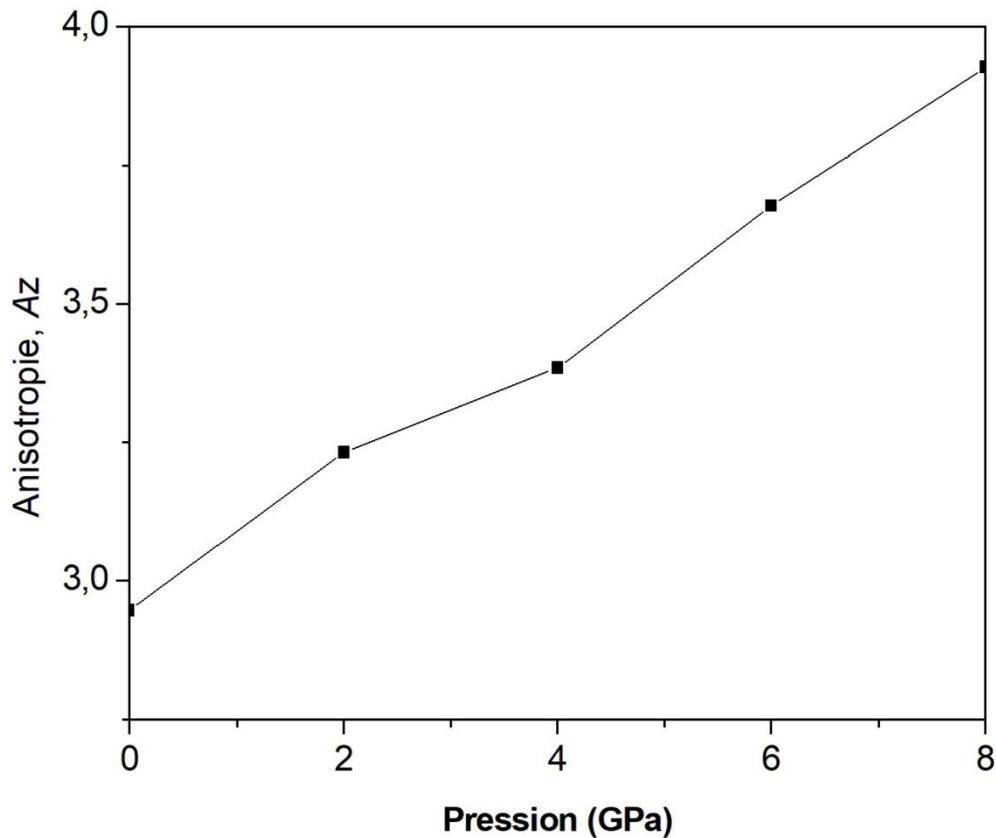
La Variation des critères de stabilité en fonction de la pression hydrostatique du  $InN$  est illustré sur la figure III.5 il est clair que lorsque la pression augmente, les paramètres  $K$  et  $G'$  augmentent aussi. Alors que le paramètre  $G$  diminue de façon monotone mais reste positive dans la plage de pression de 0 à 8 GPa ; ce qui montre que notre système est élastiquement stable dans la phase zinc-blende.



**Figure III.5 :** Variation des critères de stabilité en fonction de la pression hydrostatique du InN.

#### III.4.3. Effet de la pression sur l'anisotropie élastique

Pour étudier l'effet de la pression hydrostatique sur l'anisotropie élastique du InN, nous avons calculé la variation du coefficient d'anisotropie de Zener  $A_Z$  en fonction de la pression. Le comportement de  $A_Z$  sous pression pour le composé *InN* est illustré sur la figure III.6. Cette figure montre que le facteur d'anisotropie pour le composé *InN* à la pression nulle est supérieur à 1. L'augmentation de la pression provoque la croissance de la valeur du coefficient  $A_Z$ , et devient plus loin de 1. Cela suggère que le degré d'anisotropie augmente en fonction de la pression dans la gamme de la pression considérée (de 0 à 8 GPa), et qui reste toujours supérieur à 1, indiquant que le composé InN est plus dur dans la direction  $\langle 111 \rangle$ .



**Figure III.6 :** Variation du facteur d'anisotropie élastique de Zener AZ avec la pression du InN.

#### III.4.4. Effet de la pression sur les modules d'élasticité B, G et E

Afin de caractériser le comportement élastique du composé *InN* en phase zinc-blende dans l'état polycristallin sous l'effet de la pression, nous avons calculé et illustré la variation des modules d'élasticité B, G et E en fonction de pression hydrostatique sur la figure III.7. Nous illustrons la variation des modules B, G et E en fonction de la pression. Pour des pressions allant jusqu'à 8 GPa, le module de compressibilité *B* croient linéairement en fonction de la pression, il commence par une valeur de 118 GPa à  $P = 0$ , et il atteint une valeur de 155 GPa pour une pression de 8 GPa, et on remarque que le module de *Young E* diminue légèrement en fonction de la pression, il commence par une valeur de 115 GPa à  $P = 0$ , et il atteint une valeur de 60 GPa pour une pression de 8 GPa. Et la valeur de *G* à pression nulle est de 52 GPa et augmente légèrement avec l'augmentation de la pression et devient 55 GPa à pression  $P = 8$  GPa.

Les valeurs trouvées de  $B$ ,  $G$  et  $E$  montrent que notre composé est plus résistant à la déformation de compression qu'à la déformation de cisaillement suivant la direction principale [100]

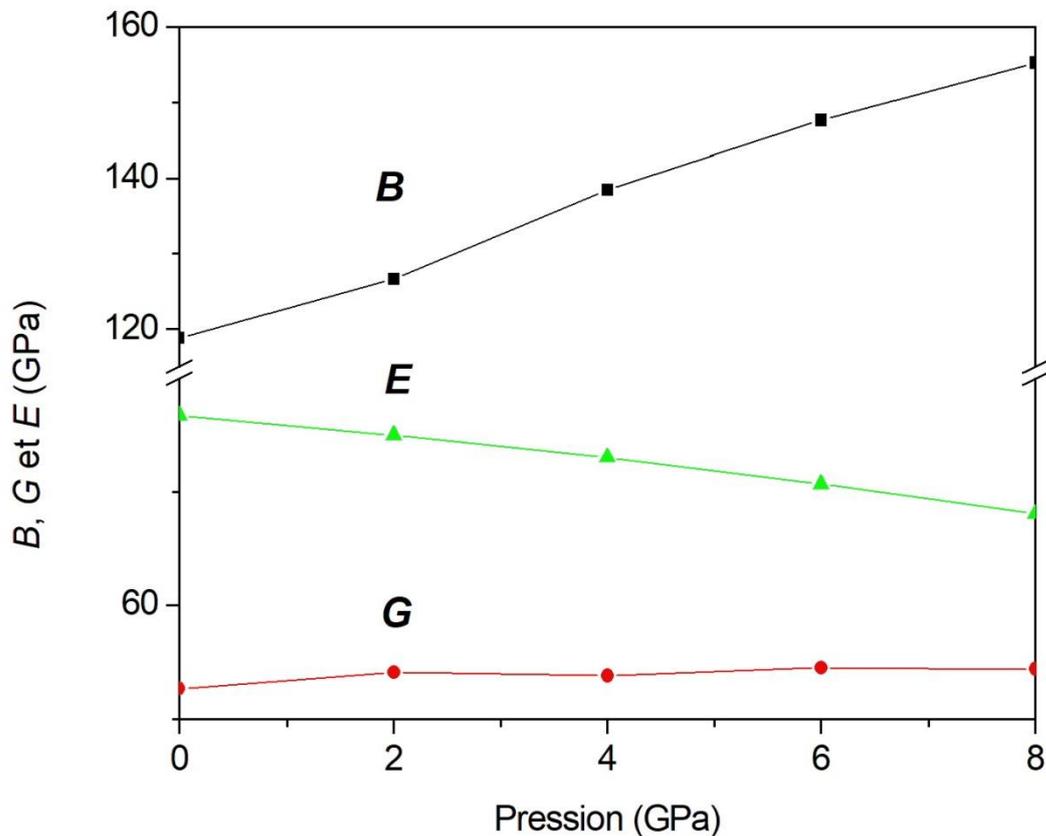


Figure III.7 : La variation des modules  $B$ ,  $G$  et  $E$  en fonction de la pression du  $\text{InN}$

#### III.4.5. Effet de la pression sur la ductilité /fragilité

L'évolution du rapport de Pugh  $B/G$  [13.1] en fonction de la croissance de la pression hydrostatique pour le  $\text{InN}$  est présentée sur la figure III.7. On constate une augmentation quasi-linéaire de  $B/G$  avec la pression. Les valeurs de  $B/G$  restent supérieures à la valeur limite de Pugh ( $B/G = 1.75$ ) qui distingue entre les matériaux fragiles et les matériaux ductiles, donc le  $\text{InN}$  est ductile dans la plage de pression considérée ( $0 - 8 \text{ GPa}$ ).

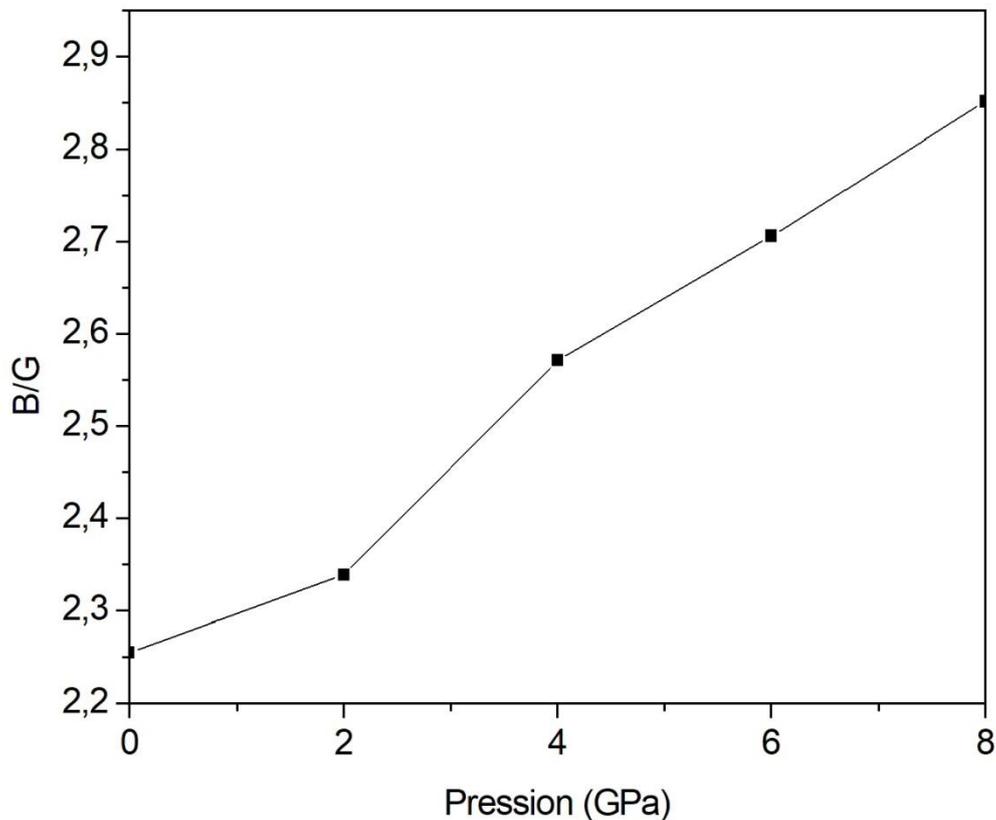


Figure III.7 : La variation du rapport B/G en fonction de la pression du InN

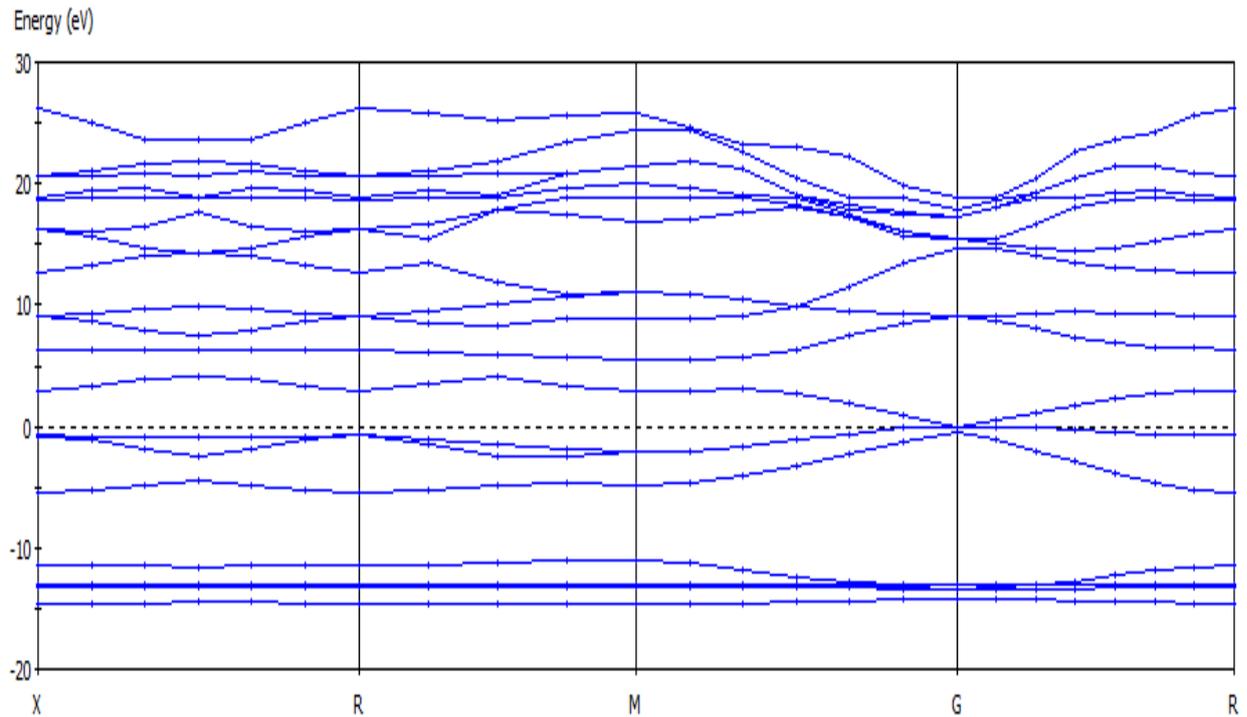
### III.5. Propriétés électroniques du InN

#### III.5.1. Structure de bande d'énergie électronique

Les structures des bandes d'énergie des composés *InN* dans la structure zinc-blende, a été calculées en utilisant la méthode du pseudo potentiel des ondes planes avec l'approximation du gradient généralisées (GGA). Les spectres d'énergie obtenus selon les directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin sont représentés sur les figures III.8.

Dans ces figures le sommet de la dernière bande de valence des composés étudiés est comme origine des énergies. A pression nulle , on remarque que le maximum de la bande de valence est situé au point de haute symétrie (nommé G) dans la zone de Brillouin et le minimum de la bande de conduction est situé aussi au point G. On peut conclure donc que le composé d'intérêts est un classé comme un semi-conducteurs à bande-interdite (gap) directe. [1.14]

Cependant, la bande de valence de ce composé est plus dispersées que les bandes de conduction. Cela est due au fait qu'elle est plus délocalisées. L'écart relevé entre le minimum de la bande de conduction et maximum de la bande de valence vaut 0.516 eV.



**Figure III.8** : Structure de bande d'InN

Une autre remarque peut observer, la présence de la pression déplace pratiquement toutes les bandes. Alors que les minimums de la bande de conduction au point *G* augmentent ce qui conduit pratiquement à une faible déplacement de toutes les bandes interdites fondamentales, mais le composé semi-conducteurs restent toujours à bande interdite (gap) directe.

***Références bibliographiques***

- [1] A. Khalid, thèse de doctorat en science, université de Biskra 2019.
- [2] Christensen NE, Gorczyca I. Phys Rev B 1994; 50:4397.
- [3] Kim K, Lambrecht WRL, Segall B. Phys Rev B 1996; 53(16):310.
- [4] Vogel D, Kruger P, Pollmann J. Phys Rev B 1997; 55(12):836.
- [5] Karch K, Wagner JM, Bechstedt F. Phys Rev B 1998;57:7043.
- [6] Stampfl C, Van de Walle CG. Phys Rev B 1999;59:5521.
- [7] Wright AF. J Appl Phys 1997;82:2833.
- [8] Trampert A, Brandt O, Ploog KH. In: Pankove JJ, Moustakas TD, editors. Crystal Structure of Group III Nitrides, Semiconductors and Semimetals, vol. 50. San Diego: Academic; 1998.
- [9] Sherwin ME, Drummond TJ. J Appl Phys 1991;69:8423.
- [10] Talwar DN, Sofranko D, Mooney C, Tallo S. Mater Sci Eng B 2002;90:269.
- [11] A. Bedjaoui, mémoire de magister en science, université de Setif 2011.
- [12] S. Daoud, N. Bioud, N. Bouarissa, Mater .Sci. Semicond. Proc. 31 124(2015).
- [13] S.F. Pugh, Phil. Mag. 45 823(1954).
- [14] A. khaldi, N. Bouarissa, L. Tabourot, J. Supercond. Now. Magn.31 1643( 2018)

# ***CONCLUSION GENERALE***

## ***Conclusion générale***

Ce travail est une contribution à l'étude des propriétés structurales, élastiques et électroniques du composé binaire semi-conducteur  $InN$  dans la structure zinc blende à l'équilibre et sous l'effet de la pression hydrostatique.

Les principaux résultats de ce travail peuvent être résumés comme suit :

➤ Tout d'abord nous avons réalisé une série de calculs ab-initio pour choisir l'énergie de coupure et un suffisant point  $k$  pour l'échantillonnage de la première zone de Brillouin afin d'avoir une bonne convergence de l'énergie totale pour notre composé dans la structure zincblende. L'utilisation de ces choix essentiels avec le formalisme de (DFT+PP+PW) nous donne des résultats légèrement surestimés des paramètres structurels ( $a_0$ ,  $B_0$  et  $B'_0$ ) et qui sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et les données théoriques rapportées dans la littérature.

Sous l'effet de la pression, on remarque qu'il y a une diminution monotone des trois paramètres ( $a/a_0$ ,  $V/V_0$ ,  $d/d_0$ ) avec l'augmentation de la pression.

➤ Nous avons calculé ensuite les matrices des constants élastiques. Nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus par d'autres méthodes théoriques et les résultats expérimentaux, Nous avons étudié aussi l'effet de la pression hydrostatique sur ces constantes, à savoir que ces constantes élastiques augmentent presque linéairement avec l'augmentation de la pression hydrostatique.

➤ D'après les valeurs trouvées des constants élastiques, on peut dire que le composé étudié ( $InN$ ) est caractérisé par une grande valeur de  $C_{11}$  par rapport à  $C_{12}$  et  $C_{44}$ , ce qui signifie qu'il est plus résistant à la compression unidirectionnelle qu'aux déformations de cisaillement.

➤ La stabilité mécanique des composés semi-conducteurs d'intérêt a été vérifiée à l'aide des constantes élastique et de la pression en utilisant les critères générale de la stabilité de Born. Nos résultats ont montré que le semi-conducteur sous investigation est mécaniquement stable dans la phase zincblende.

➤ En se basant sur la formule de Pugh, nos résultats ont montré que le composé semi-conducteur  $InN$  en question est classé comme un matériau ductile.

➤ Le facteur d'anisotropie  $A_z$  du composé  $InN$ , est supérieur à l'unité dans la phase zincblende ce qui signifie que notre composé semi-conducteur est élastiquement plus rigide le long du diagonale  $\langle 111 \rangle$ .

## *Conclusion Générale*

---

➤ Les calculs effectués sur la structure électronique, à travers la structure de bande électronique, ont montré que le composé semi-conducteur  $InN$ , est classé comme un semi-conducteur à gap direct avec un gap d'énergie environ  $0.516 \text{ eV}$

➤ Sous l'effet de pression le composé semi-conducteur  $InN$  est resté classé comme un semi-conducteur à gap direct avec une faible augmentation dans la valeur du gap d'énergie de  $0.1 \text{ eV}$ .

Comme perspectives, nous avons l'intention d'étudier d'autres propriétés physiques comme les propriétés thermodynamiques et optiques du semi-conducteur d'intérêt ainsi que leurs alliages ternaires et quaternaires.

## ملخص

في مرحلة مزيج الزنك (InN) في هذا العمل ، درسنا الخصائص الهيكلية والمرنة والإلكترونية لمركب أشباه الموصلات جنباً إلى جنب مع طريقة (DFT) بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية *ab-initio* في هذه الدراسة ، استخدمنا حساب الاحتمال الزائف

النتائج التي توصلنا إليها تتوافق جيداً مع البيانات تم إجراء الحسابات عند التوازن وتحت تأثير الضغط الهيدروستاتيكي التجريبية ومع القيم المحسوبة بواسطة الدراسات النظرية الأخرى

## Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, élastiques et électroniques du composé semi-conducteur *InN* (dans la phase zinc-blend). Dans cette étude nous avons utilisé un calcul *ab-initio* qui basé sur la théorie la fonctionnelle de la densité (*DFT*) combinée avec la méthode des pseudo-potentiel.

Les calculs ont été effectués à l'équilibre et sous l'effet de la pression hydrostatique

Nos résultats trouvés sont en très bon accord avec les données expérimentales et avec les valeurs calculées par d'autres études théoriques.

## Abstract

In this works, we have studied the structural, elastic and electronic properties of the semiconductor compound *InN* (in the zinc-blend phase). In this study we used an *ab-initio* calculation based on the density functional theory (*DFT*) combined with the pseudo-potential method.

Calculations were performed at equilibrium and under the effect of hydrostatic pressure

Our found results are in very good agreement with the experimental data and with the values calculated by other theoretical studies.