



Mémoire de fin d'études

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

Filière : Physique
Option : Physique des Matériaux

THÈME :

*Etude ab-initio des propriétés structurales, électroniques
et dynamiques des semiconducteurs type III-V (GaN)*

Présenté par : Hammache Oum El Kheir

Soutenu publiquement le : 08/07/2019

Devant le jury :

| | | | |
|---------------------|-------------------|------------|-------------------|
| Président : | Kahoul abdelhalim | Professeur | Université de BBA |
| Rapporteur : | Benamrani Ammar | MCB | Université de BBA |
| Examineur : | Moula Baghdadi | MCB | Université de BBA |
| Examineur : | Boudjemaa Sofiane | MCB | Université de BBA |

Année Universitaire 2018-2019

Dédicaces :

Je dédie ce travail :

A mes parents

A mes frères et mes sœurs

A Mon mari

A mes amies

Hammache Oum El Kheir

Remerciements

Je tiens à remercier le tout puissant ALLAH qui m'a donné la force et la patience pour terminer ce modeste travail.

Je tiens à remercier mon encadreur Mr. Benamrani Ammar, Maître de conférences à l'université de Bordj Bou Arréridj, de m'avoir proposé le sujet de ce mémoire. Je le remercie aussi pour ses orientations et ses précieux conseils à propos mon travail.

Mes remerciements vont également à Monsieur Kahoul Abd El Halim, Professeur à l'université de Bordj Bou Arréridj, qui a accepté de présider le Jury.

Je remercie également Messieurs : Moula Baghdadadi et Boudjemaa Sofiane, maîtres de conférences à l'université de Bordj Bou Arréridj d'avoir accepté le jugement de mon travail et d'être membres de Jury.

Mes remerciements sont adressés également à tous les enseignants du département des Sciences de la matière (SM).

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à mes chers parents, mes frères et mes sœurs ainsi que mon mari qui m'a toujours encouragé.

Je ne saurais aussi oublier mes amies et mes collègues et toute la famille, ainsi que tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

Hammache Oum El Keir

Liste des figures

Liste des figures

| | | |
|----------------------|---|-----------|
| Figure I.1 | <i>Organigramme montrant la méthode de résolution de l'équation de Kohn-Sham</i> | 12 |
| Figure III.1 | <i>Maille Conventiionnelle du w-GaN (Wurtzite)</i> | 30 |
| Figure III.2 | <i>Structure de w-GaN avec les polyèdres</i> | 31 |
| Figure III.3 | <i>Maille primitive du GaN (Wurtzite)</i> | 31 |
| Figure III.4 | <i>Zone de Brillouin de la structure Wurtzite</i> | 32 |
| Figure III.5 | <i>Maille conventionnelle de GaN (Zinc blende)</i> | 33 |
| Figure III.6 | <i>Maille primitive du GaN (Zinc blende)</i> | 33 |
| Figure III.7 | <i>Zone de Brillouin de la structure Zinc blende</i> | 34 |
| Figure III.8 | <i>Variation de l'énergie totale de GaN (phase ZB) en fonction du nombre de points k</i> | 36 |
| Figure III.9 | <i>Variation de l'énergie totale de GaN (phase Zinc Blende) en fonction du Cut-off d'énergie</i> | 36 |
| Figure III.10 | <i>Variation de l'énergie totale de GaN (phase Wurtzite) en fonction du nombre de points k</i> | 37 |
| Figure III.11 | <i>Variation de l'énergie totale de GaN (phase Wurtzite) en fonction du Cut-off d'énergie</i> | 37 |
| Figure III.12 | <i>Variation de l'énergie totale du GaN en fonction du rapport des volumes ($\frac{V}{V_{exp}}$) dans les phases Zinc blende et wurtzite</i> | 40 |
| Figure III.13 | <i>Structure de bandes d'énergie de GaN dans la phase Zinc blende (B3) à l'équilibre hydrostatique ($P = 0$ GPa)</i> | 41 |
| Figure III.14 | <i>Structure de bande de GaN dans la phase Wurtzite (B4) à l'équilibre hydrostatique ($P = 0$ GPa)</i> | 42 |

Liste des tableaux

Liste des tableaux

- Tab III.1** *Comparaison des valeurs calculées théoriquement et expérimentalement des propriétés structurales du composé GaN dans les deux phases zinc blende et wurtzite : paramètres de maille a_0, a , rapport $\frac{c}{a}$, module de compressibilité B_0 , et sa dérivée B' .* **39**
- Tab III.2** *: Comparaison des gaps électroniques directs du composé GaN dans les phases Zinc blende (B3) et Wurtzite (B4) avec ceux obtenus théoriquement et expérimentalement* **43**
- Tab III.3** *Charge effective de Born Z^B et constante diélectrique à haute fréquence $\epsilon(\infty)$ pour le GaN dans la phase zinc blende (B3) au volume d'équilibre.* **45**
- Tab III.4** *Fréquences des phonons du composé GaN (phase B3) calculés aux points de haute symétrie Γ, X et L (les unités sont en cm^{-1})* **46**

Sommaire

Sommaire

| | |
|---|------|
| Introduction générale | (1) |
| Références | (3) |
| <i>Chapitre I : Théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)</i> | |
| I.1) -Introduction..... | (4) |
| I.2) - L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin..... | (4) |
| I.3) - L'approximation de Born Oppenheimer..... | (5) |
| I.4) - L'approximation de Hartree-Fock | (6) |
| I.5) - L'approche de Thomas et Fermi | (7) |
| I.6) – La théorie de la fonctionnelle de la densité | (7) |
| I.6.1) Principe de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) | (7) |
| I.6.2) But de la DFT | (8) |
| I.6.3) Le théorème de Hohenberg et Kohn | (8) |
| 1.6.3.a) La densité comme variable fondamentale | (8) |
| 1.6.3.b) Le premier théorème | (9) |
| 1.6.3.c) Le deuxième théorème (principe variationnel) | (9) |
| I.6.4) Approche de Kohn-Sham | (9) |
| I.6.5) Potentiel d'échange et de corrélation | (13) |
| I.6.5.1) Approximation de la densité locale (LDA) | (13) |
| I.6.5.2) Approximation du gradient généralisé (GGA) | (15) |

Sommaire

| | |
|-----------------------|------|
| I.7) Conclusion | (15) |
| I.8) Références..... | (16) |

Chapitre II : Ondes planes et Pseudopotentiels

| | |
|---|------|
| II.1) Introduction..... | (18) |
| II.2) Ondes planes et théorème de Bloch | (18) |
| II.3) Echantillonnage de la première zone de Brillouin..... | (19) |
| II.4) Méthode de Philips et Kleinman | (19) |
| II.5) Familles de pseudopotentiels | (20) |
| II.5.1) Pseudopotentiels à norme conservée..... | (21) |
| II.5.1.1) Pseudopotentiels de Troullier et Martins..... | (21) |
| II.5.1.2) Pseudopotentiels de Hartwigsen Goedecker Hutter | (23) |
| II.5.2) Pseudopotentiels à norme non conservée..... | (24) |
| II.5.2.1) Pseudopotentiels ultra-doux (USPP)..... | (24) |
| II.5.2.2) Pseudopotentiels PAW..... | (26) |
| II.6) Conclusion | (27) |
| II.7) Références | (28) |

Chapitre III : Résultats et discussions

| | |
|--|------|
| III.1) Introduction..... | (30) |
| III.2) Structures cristallographiques de GaN | (30) |
| III.2.1) Structure Wurtzite (B4) | (30) |
| III.2.2) Structure Zinc blende (B3) | (33) |
| III.3) Descriptions des codes de calcul | (34) |
| III.3.1) Code CASTEP | (34) |
| III.3.1) Code ABINIT | (35) |

Sommaire

| | |
|---|------|
| III.4) Paramètres de Convergence | (35) |
| III.5) Propriétés structurales | (38) |
| III.5.1) Paramètre de maille et équation d'état (EOS) | (38) |
| III.6) Propriétés électroniques | (41) |
| III.6.1) Structure des Bandes d'énergie | (41) |
| III.6.2) Gaps d'énergie électronique | (42) |
| III.7) Propriétés dynamiques | (44) |
| III.7.1) Introduction | (44) |
| III.7.2) Propriétés diélectriques | (44) |
| III.7.3) Propriétés vibrationnelles | (46) |
| Références | (48) |
| Conclusion générale | (51) |

Introduction générale

Introduction générale

Introduction générale

Les Nitrures de l'élément III sont des matériaux polaires qui se cristallisent dans la structure Wurtzite. Leur polarisation spontanée est due au non centrosymétrie [1], c'est-à-dire que les barycentres des anions et les cations ne coïncident pas.

Les Nitrures de l'élément III ont démontré leurs nombreux avantages pour les dispositifs optoélectroniques et électroniques (les diodes laser (LD) émettant dans la gamme des rayons bleues et UV, les diodes électroluminescentes (LED) et les transistors de haute puissance et de fréquence élevée [2].

Le Nitrure de Gallium est un semi-conducteur appartenant à la famille des semi-conducteurs type III-V, caractérisé par une large bande interdite directe, haute conductivité thermique, sa grande stabilité mécanique (matériau très dur) et sa résistance aux radiations ce qui lui rend un matériau candidat recommandé pour la fabrication des composants électroniques [3].

Dans ce mémoire, on s'est intéressé à l'étude des propriétés structurales, électroniques et dynamiques du matériau GaN à l'équilibre thermodynamique en utilisant des codes de calcul basés sur la fonctionnelle de la densité DFT et la fonctionnelle de la densité perturbée DFPT. Cette dernière (i.e DFPT) est la base des calculs que nous avons fait pour l'étude des propriétés dynamiques du GaN.

Notre mémoire est divisé en trois chapitres :

Dans le premier chapitre, On rappelle quelques approximations du premier principe utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger pour un solide cristallin telles que les approximations de Born-Oppenheimer, Hartree-Fock et Thomas suivie par une introduction à la théorie de la fonctionnelle de densité qui prouve son efficacité à travers des approximations pour résoudre l'équation équivalente à l'équation de Schrödinger (équation de Kohn et Sham).

Le deuxième chapitre sera consacré à la notion d'un pseudopotentiel et l'importance des ondes planes. Nous expliquerons dans ce chapitre le concept d'un pseudopotentiel et son rôle majeur dans la simplification du problème de la structure électronique et on citera les grandes familles de pseudopotentiels.

Introduction générale

Dans le troisième chapitre, on présentera les résultats de calcul obtenus à l'aide des codes ab-initio (CASTEP et ABINIT) utilisés pour étudier les propriétés structurales, électroniques, et dynamiques du matériau semi-conducteur Nitrure de Gallium (GaN) dans deux phases : Zinc blende et Wurtzite.

Finalement, notre travail sera clôturé par une conclusion générale.

Références

Références

Références

- [1] H.Masui, S. Nakamura, S.P. DenBaars, U.K.Mishra, IEEE Trans Electron Dev **57**(1), 88–100 (2010)
- [2] Gérald Roosen, « Matériaux semi-conducteurs III-V, II-VI et nitrures pour l'optoélectronique », éditeur Lavoisier, (2003).
- [3] F. Bechstedt, Ulrike Grossner and J. Furthmuller, Phys. Rev. B, vol 62, N 12, 2000.

Chapitre 1 :
Théorie de la fonctionnelle de densité
(DFT)

I.1) Introduction

En matière condensée, les modèles servants au traitement des problèmes atomiques, moléculaires et des solides sont développés pour permettre un calcul avec un nombre réduit d'atomes non-équivalents tout en intégrant le plus grand nombre possible d'interactions. Les méthodes mises en œuvre sont réparties en trois catégories :

Les méthodes ab-initio sont entièrement basées sur la mécanique quantique et les constantes physiques fondamentales. Elles sont largement utilisées en chimie quantique et permettent de résoudre l'équation de Schrödinger associée à un Hamiltonien . En particulier les méthodes post Hartree-Fock sont connues pour une description précise de la solution de l'équation de Schrödinger non-relativiste [1].

Une deuxième catégorie constituée de méthodes du premier principe basées sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). Elles sont souvent considérées comme des méthodes ab-initio pour la détermination de la structure électronique moléculaire, même si un grand nombre des fonctionnelles plus courantes utilisent des paramètres dérivés de données empiriques ou de calculs plus complexes [1].

Les méthodes semi-empiriques sont basées sur des paramètres d'ajustement par interpolation des données expérimentales. Elles recouvrent la théorie **k.p** [2].

Un solide est constitué d'un certain nombre d'électrons en interaction qui obéissent aux lois de la mécanique quantique, on peut avoir accès aux propriétés d'un tel système en résolvant l'équation de Schrödinger appropriée. Une telle équation est très complexe alors on est obligée de faire appel à des approximations [3].

I.2) L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin :

L'équation fondamentale à résoudre pour décrire la structure électronique d'un système à plusieurs noyaux et électrons est la fameuse équation établie par Erwin Schrödinger, appelée équation de Schrödinger :

$$H\Psi = E\Psi \quad (I-1)$$

Ψ est la fonction d'onde du système fonction des coordonnées des noyaux et des électrons et contient toutes les informations du système.

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) \quad (I-2)$$

$r_i (i = 1 \dots N)$ représente les coordonnées des électrons, N est le nombre d'électrons et $R_i (R = 1 \dots N_\alpha)$ sont les coordonnées des noyaux, N_α est le nombre d'atomes dans le système.

Où \hat{H} est l'opérateur Hamilton pour un système moléculaire constitué de M noyaux et de N électrons en l'absence de champs magnétique ou électrique. \hat{H} est un opérateur différentiel représentant l'énergie totale :

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2(r_i) - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla^2(R_i) - \sum_{i=1}^{N_\alpha} \sum_{j=1}^N \frac{Z_i e^2}{|R_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|} \quad (I-3)$$

Où : M_i est la masse du noyau i , m_e : la masse de l'électron, Z_i et Z_j les numéros atomiques des noyaux i et j respectivement. $-e$ est la charge de l'électron.

Les deux premiers termes décrivent l'énergie cinétique des électrons et des noyaux, où l'opérateur laplacien ∇^2 est défini comme une somme d'opérateurs différentiels (en coordonnées cartésiennes)

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (I-4)$$

Les trois derniers termes de l'équation (I-3) définissent les interactions électron-noyaux, électron-électron et noyaux-noyaux respectivement [4].

I.3) L'approximation de Born-Oppenheimer :

Dans les calculs de la structure électronique d'un système à plusieurs particules l'approximation de Born Oppenheimer [5] considère la position des noyaux atomiques comme fixes ; leur énergie cinétique peut donc être négligée et le terme d'interaction entre noyaux considérés comme une constante qu'on peut choisir comme la nouvelle origine des énergies. Cette approximation se justifie par le rapport de masse entre les noyaux et les électrons. Selon cette approximation, l'Hamiltonien du système se réduit à :

$$H = T_n + V_{ne} + V_{ee} \quad (I-5)$$

L'approximation de Born-Oppenheimer est qualifiée d'adiabatique car elle consiste à séparer le problème électronique de celui des vibrations du réseau. [6]

I.4) L'approximation de Hartree – Fock :

L'approximation de Hartree consiste à remplacer l'interaction de chaque électron de l'atome avec tous les autres par l'interaction avec un champ moyen créée par les noyaux et la totalité des autres électrons, c'est-à-dire que l'électron se déplace indépendamment dans un champ moyen créée par les autres électrons et noyaux [7].

La fonction d'onde du système est le produit de fonctions d'onde à une particule, orthogonales entre elles :

$$\psi = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3) \dots \psi_N(r_N) \quad (\text{I-6})$$

Dans l'approximation de Hartree-Fock [4] les états du spin sont pris en compte dans la résolution de l'équation de Schrödinger (principe de Pauli). La fonction d'onde est écrite sous forme d'un déterminant de Slater :

$$\Psi^{HF}(x_1 \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_N(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(x_N) & \dots & \varphi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad (\text{I-7})$$

$\varphi_i(r) = \varphi_i(r)\sigma_i$: (la spinorbitale) est une fonction monoélectronique des variables d'espace $\varphi_i(r)$ et de spin σ_i .

Les spin orbitales $\varphi_i(x_i)$ sont les solutions d'un système d'équations différentielles couplées appelées équations de Hartree-Fock :

$$F|\varphi_i\rangle = \sum_{k=1}^N \lambda_{ik} |\varphi_k\rangle \quad (\text{I-8})$$

Où F est un opérateur mono électronique qui a pour expression :

$$F = -\frac{1}{2}\nabla^2 + \sum_A \frac{Z_A}{|r_i - r_A|} + \sum_{j=1}^N (J_j - K_j) \quad (\text{I-9})$$

L'opérateur J_j est l'opérateur coulombien qui représente le potentiel moyen créé par les autres électrons et K_j est l'opérateur d'échange. La correction à ce potentiel est due à l'antisymétrie. Ces opérateurs sont définis à partir de leur action sur un spin orbitale quelconque [6].

$$J_j(1)\varphi(1) = \left(\int \varphi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \varphi_j(2) \right) \varphi(1) \quad (\text{I-10})$$

$$K_j(1)\varphi(1) = \left(\int \varphi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \varphi(2) \right) \varphi_j(1) \quad (\text{I-11})$$

La méthode de Hartree-Fock reste un point de repère indispensable qui conduit en principe à la fonction d'onde exacte. Malgré ça, elle avait du mal quelle est couteuse car l'augmentation du nombre de configurations est proportionnelle avec l'augmentation du nombre d'électrons donc elle ne peut traiter que des systèmes avec peu d'électrons comme des petites molécules [8].

I.5) L'approche de Thomas et Fermi :

Utiliser la densité comme variable en lieu et place de la fonction d'onde est l'idée qui a été suggérée par Thomas et Fermi en 1927 [9]. Ils ont proposé de modéliser le terme cinétique de l'équation de Schrödinger par une fonctionnelle particulière explicite de la densité. Cette approche pose quelques problèmes majeurs (elle ne permet pas d'expliquer la liaison covalente par exemple) : plusieurs extensions ont donc été proposées, mais elles ont toutes l'inconvénient de rajouter des termes au fur et à mesure des approximations successives considérées (souci déjà présent dans l'approche d'Hartree-Fock).

Néanmoins, utiliser la densité conduit à des solutions plus simples que dans le cas de la fonction d'onde [9].

I.6) La théorie de la fonctionnelle de la densité :

I.6.1) Principe de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) :

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une théorie basée sur le théorème Qui montre que toutes les propriétés (les états propres de N corps) d'un système de particules En interaction sont déterminées par la densité $\rho_0(r)$ de l'état fondamental. Ainsi toute observable décrivant le système est une fonctionnelle de la densité $\rho_0(r)$. Cette affirmation a été démontrée par Hohenberg et Kohn [10]

I.6.2) But de la DFT :

L'objectif considérable de la DFT fut évident compte tenu de la simplicité de l'équation de la densité comparée à l'équation de Schrödinger complexe. L'approche de Thomas-Fermi a été appliquée, à titre d'exemple, aux équations d'état des éléments, et d'abandonner la fonction d'onde multiélectronique qui dépend de $3N$ variables (ou N est le nombre total de particules du système), et la remplacer par la densité qui est seulement fonction de trois variables [12].

I.6.3) Le théorème de Hohenberg et Kohn :

L'approche développée par Hohenberg et Kohn est de reformuler la théorie de la fonctionnelle de la densité proposée par Thomas et Fermi [13-14] par une théorie exacte d'un système à plusieurs corps. La formulation est applicable pour tout système de particules en interaction évoluant dans un potentiel externe et repose sur deux théorèmes essentiels qui furent énoncés et démontré par Hohenberg et Kohn [15].

I.6.3.a) La densité comme variable fondamentale :

La densité électronique, définie pour un système à N électrons par :

$$\rho(r) = N \int dr_1 \dots \int dr_{n-1} \Psi^*(r_1, \dots, r_{n-1}, r) \Psi(r_1, \dots, r_{n-1}, r) \quad (\text{I.12})$$

ne dépend que de trois paramètres de position $r = (x, y, z)$. L'intérêt de l'approche de Hohenberg-Kohn est de prouver que la densité électronique est une variable pertinente dont la connaissance suffit à déterminer les propriétés du système dans son état fondamental, ce dont on peut initialement douter vu la complexité de la fonction d'onde à N -corps.

Cette approche est basée sur les théorèmes suivants :

I.6.3.b) Le premier théorème :

Pour un système de particules en interaction dans un potentiel extérieur V_{ext} , Hohenberg et Kohn ont montré que ce dernier est une fonctionnelle unique de la densité électronique $\rho(\mathbf{r})$ [10]

I.6.3.c) Le deuxième théorème (principe variationnel) :

Il existe une fonctionnelle universelle $E[\rho(\mathbf{r})]$ exprimant l'énergie totale en fonction de la densité électronique $\rho(\mathbf{r})$, valide pour tout potentiel externe V_{ext} . L'énergie de l'état fondamental du système est la valeur qui minimise cette fonctionnelle et la densité $\rho_0(\mathbf{r})$ correspondante est la densité exacte de l'état fondamental. De ce fait l'énergie totale du système qui est une fonctionnelle de la densité électronique prend la forme suivante [10] :

$$E(\rho) = T[\rho] + \int V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r d^3r' + E_{xc}[\rho] \quad (\text{I.13})$$

Les théorèmes de Hohenberg-Kohn n'ont pas une grande valeur pratique. Ils déclarent fondamentalement qu'une fonctionnelle exacte de la densité existe cependant ils ne disent rien au sujet de la façon de l'obtenir. Dans cette expression les formules de l'énergie cinétique et d'échange - corrélation restent toujours inconnues. Puisque la contribution du premier terme à l'énergie totale est importante il ne peut pas être exprimé par une expression approximative contrairement au terme d'échange et de corrélation E_{xc} [16].

I.6.4) Approche de Kohn-Sham :

On vient de voir que l'expression de la fonctionnelle de l'énergie cinétique dans (I.20) est inconnue. En 1965 et pour pallier à ce problème, Kohn et Sham ont proposé de remplacer le système réel de particules en interaction par un système fictif sans interaction et qui possède une densité électronique identique à celle du système réel. Dans ce cas l'opérateur de l'énergie cinétique sera connu. La fonctionnelle exacte d'énergie prend la forme suivante [9] :

$$E[\rho] = T_0[\rho] + V_{ee}[\rho] + V_{ext}[\rho] + V_{xc}[\rho] \quad (I.14)$$

Où V_{ee} est l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons et V_{ext} est l'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons avec :

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (I.15)$$

$$V_{ext}[\rho] = \sum_{i=1}^{Nn} \int \frac{Z_i \rho(r)}{|r-R_i|} dr \quad (I.16)$$

L'énergie cinétique de l'état fondamentale $T_0[\rho]$ de notre système fictif est :

$$T_0 = \sum_{i=1}^{Ne} \int \phi_i^{KS}(r) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2\right) \phi_i^{KS}(r) dr \quad (I.17)$$

Où ϕ_i^{KS} sont les orbitales de Kohn et Sham. La densité électronique de système est :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^{Ne} |\phi_i^{KS}|^2 \quad (I.18)$$

L'énergie cinétique du système réel prend la majeure partie de l'énergie cinétique exacte. La différence entre les énergies cinétiques du système réel et du système fictif de l'état fondamental $\Delta T = T_{Réel} - T_0$ est petit devant $T_{Réel}$.

Il est constitué de deux termes l'énergie d'échange et l'énergie de corrélation et il contient :

- la différence, ΔT , entre l'énergie cinétique du système, $T_{Réel}$, et l'énergie cinétique calculée à partir du système fictif. Les orbitales de Kohn-Sham qui minimisent l'énergie totale doivent satisfaire à l'équation mono-électronique :

$$H^{KS} \phi_i^{KS}(r) = E_i \phi_i^{KS}(r) \quad (I.19)$$

Sous forme détailler :

$$(T + V_{ee} + E_{xc} + V_{ext}) \phi_i^{KS}(r) = E_i \phi_i^{KS}(r) \quad (I.20)$$

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N \int \frac{Z_i \rho(r)}{|r-R'_i|} dr + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + V_{xc}(r)\right] \phi_i^{KS}(r) = E_i \phi_i^{KS}(r) \quad (I.21)$$

V_{xc} est le potentiel d'échange corrélation qui est la dérivée de la fonctionnelle d'énergie d'échange et de corrélation :

$$V_{xc} = \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (I.22)$$

Les fonctionnelles E_{xc} sont souvent exprimés en termes de densité d'énergie ε_{xc} qui dépend de la densité d'électrons :

$$E_{xc}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] dr \quad (I.23)$$

Si nous connaissons la fonctionnel exacte l'approche Kohn-Sham doit être une théorie exacte.

Sachant que :

$$E_{xc}[\rho(r)] = E_x[\rho(r)] + E_c[\rho(r)] \quad (I.24)$$

Pour déterminer le terme d'échange et de corrélation, on doit faire recours à des approximations. En supposant que ce terme est défini, la résolution des équations de Kohn-Sham se fait d'une manière itérative et self-consistante en utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent. Ceci est nécessaire parce qu'au début le potentiel à introduire dans les équations de Kohn-Sham dépend de la densité. Cette dernière est à son tour inconnue au début, et ne sera déterminée qu'après résoudre des équations de Kohn Sham. [17]

L'organigramme schématisé sur la figure I.1 nous montre les étapes de résolution de l'équation de Kohn Sham :

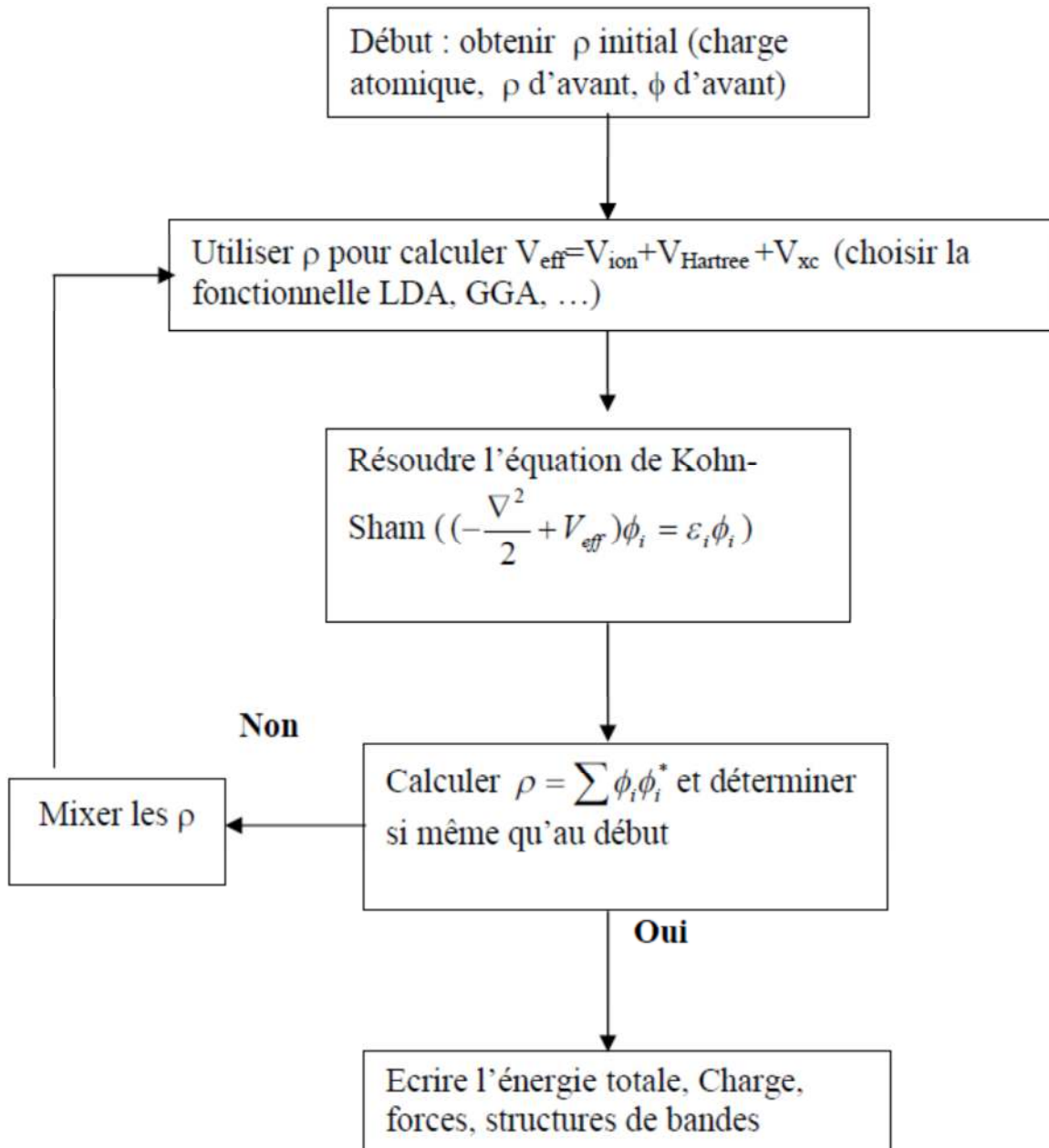


Figure I.1 Organigramme montrant la méthode de résolution de l'équation de Kohn-Sham [17]

Afin d'éviter le problème de l'augmentation du rayon de la convergence avec l'augmentation de la taille de la cellule (volume de la maille élémentaire), un algorithme sophistiqué de mixage qui tient en compte toute information précédente dans les itérations précédentes est utilisé. Pour accélérer la convergence, l'algorithme de Broyden [18] est utilisé. Ainsi la procédure itérative se poursuit jusqu'à ce que la convergence soit réalisée [17].

I.6.5) Potentiel d'échange et de corrélation :

En principe la DFT nous donne une bonne description des propriétés de l'état fondamental, ses applications pratiques sont basées sur des approximations pour le potentiel d'échange-corrélation qui décrit les effets du principe de Pauli et du potentiel de coulomb au-delà d'une interaction électrostatique pure entre électrons.

La connaissance exacte du potentiel d'échange corrélation signifie que nous avons résolu exactement le problème de N corps.

Parmi les approximations les plus utilisées actuellement est l'approximation locale de densité (LDA) qui substitue localement la densité d'énergie ϵ_{XC} d'échange corrélation d'un système non homogène par celle d'un gaz d'électrons de même densité [19]

I.6.5.1) Approximation de la densité locale (LDA) :

L'approximation la plus répandue pour calculer le terme d'échange et de corrélation est l'approximation de Densité Local (LDA, Local Density Approximation, ou LSDA, Local Spin-Density Approximation). Cette approximation est basée sur le fait que la densité électronique fluctue assez lentement. Elle remplace donc le potentiel d'échange-corrélation en chaque point de l'espace par celui d'un gaz uniforme d'électrons en interaction. Le gaz d'électrons est pris avec la même densité que la densité au point calculé permettant d'en donner une expression exacte. Ceci a été fait au début des années 80 [20] et l'énergie d'échange-corrélation est donnée par :

$$E_{XC}[\rho] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}[\rho(r)] dr \quad (I.25)$$

Avec :

ε_{xc} est l'énergie d'échange-corrélation par \bar{e}

La LDA est souvent une approximation efficace, même quand la densité fluctue de manière non négligeable. Elle est basée sur le fait que dans le cas d'un gaz homogène d'électrons la densité de charge change lentement sur une échelle atomique (c.-à-d. chaque région d'une molécule ressemble réellement à un gaz homogène d'électrons) [20].

Dans le cas des spins polarisés l'énergie d'échange et de corrélation s'exprime sous la forme suivante :

$$E_{XC}^{LDA} = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho \uparrow, \rho \downarrow] dr \quad (I.26)$$

$\varepsilon_{xc}[\rho \uparrow, \rho \downarrow]$ est la densité d'énergie d'un gaz homogène d'électrons de la densité $\rho(r)$.

En d'autres termes, on postule qu'autour de chaque point r , on peut remplacer le système réel par un gaz homogène d'électrons de densité de charge $\rho(r) = \rho \uparrow + \rho \downarrow$. Le terme d'échange-corrélation d'un tel gaz a été déterminé exactement par des techniques Monte-Carlo par Ceperley et autres [20]. Cette représentation locale du potentiel d'échange-corrélation est considérée comme une des descriptions disponibles les plus précises [21]. C'est une Approximation assez radicale, elle consiste à utiliser directement la densité d'énergie dans le cas général, ce qui revient à négliger la variation et les effets de variation de la densité. En d'autres termes, elle repose sur l'hypothèse que les termes d'échange-corrélation dépendent Uniquement de la valeur locale de $\rho(r)$. Le terme d'échange-corrélation $\varepsilon_{xc}[\rho(r)]$ est une fonction du rayon de Wigner- Seitz :

$$r_s = \left[\frac{3}{4\pi} \rho(r) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad (I.27)$$

Il existe de nombreux travaux de paramétrisation de $\varepsilon_{xc}[\rho(r)]$ comme par exemple ceux de Vosko, Wilk et Nusair [21], ou encore de Perdew, Zunger et autres [22, 23]. Toutes ces fonctionnelles conduisent généralement à des résultats très similaires.

En effet, il est connu que la LDA commet une erreur sur les états localisés [22] ainsi les états pour un semi-cœur. Cette erreur est principalement due aux effets d'auto-interaction électronique : à cause de l'approximation de la fonctionnelle d'échange-corrélation, un électron interagit avec lui-même, ce qui n'est pas physique.

C'est pour cela que dans nos calculs, pour les hautes pressions, l'approximation (LDA) a des estimations moins bonnes que celle de (GGA).

I.6.5.2) Approximations du gradient généralisé (GGA) :

L'approximation LDA donne de bons résultats pour plusieurs systèmes (homogènes), mais ce n'est pas le cas pour d'autres systèmes où la densité possède une variation spatiale. Dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) [6], l'énergie d'échange et de corrélation est en fonction de la densité d'électron et de son gradient :

$$E_{XC}^{GGA} = \int f[\rho(r), \nabla\rho(r)] d^3r \quad (I.28)$$

Les fonctionnelles les plus répandues dans les programmes de la DFT sont celles de J. Perdew et Wang [22], A.P. Becke [24], J. Perdew [25]. Il faut cependant noter que l'approximation GGA ne mène pas obligatoirement à de meilleurs résultats que la LDA, tout dépend des propriétés que l'on calcule et du système que l'on traite.

I.7) Conclusion :

On conclut que la théorie de la fonctionnelle de la densité est un outil très efficace pour l'étude des systèmes d'électrons en interaction. En réalité, elle ramène le problème à N corps en interaction à celui de N corps indépendants qui se déplacent dans un potentiel effectif. L'introduction de ce système de particules indépendantes a permis de prendre en compte la plus grande partie de l'énergie cinétique. La partie négligée de cette énergie provient du fait que la fonction d'onde totale du système n'est pas égale au déterminant de Slater (Sinon la théorie Hartree-Fock serait exacte).

Références

Références

- [1] Ch. Hajlaoui, Etude des propriétés structurales et électroniques des nano fils semi-conducteurs III-V, thèse de Doctorat, université de Rennes, 2014.
- [2] G. Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures, Les Éditions de Physique, Paris, 1988
- [3] B. Lagoun, calcul ab-initio des propriétés physiques de quelques nouveaux matériaux potentiels pour l'optique non linéaire quadratique, Thèse de Doctorat, université de Tlemcen , 2015 .
- [4] Wolfram Koch, Max C. Holthausen, , A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Second Edition, Editions Wiley, 2001.
- [5] M Born et J.R Oppenheimer : Zur quantentheorie der molekeln, Ann. Physik, 84:457, 1927.
- [6] R.Boulechfar, Etude des propriétés structurales, électroniques et thermodynamiques des composés intermétalliques Al_3V et Al_3Ti par la méthode FP-LAPW, Thèse de Doctorat, université de Annaba, 2010.
- [7] D. R. Hartree, Proc. Combridge Philos. Soc. 24, 89 (1928)
- [8] N.Richard, Actinides et terres rares sous pression : Approche pseudopotentiel, Rapport CEA , Direction ile de France département de Physique Théorique et Appliquée , 2002.
- [9] W. Kohn and L.J.Sham, Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Phys.Rev, Volume 140, number 4A, 1965.
- [10] P. Hohenberg and W. Kohn. Phys. Rev B 136.864, (1964).
- [11] A. Saoudi, Étude des Propriétés Structurales, Élastiques, Électroniques,Optiques et Thermodynamiques des Composés $CaSrTt$ ($Tt = Si, Ge, Sn$ et Pb), Thèse de Doctorat, Université de Sétif, 2014.
- [12] M. Caid, Etude des propriétés structurales et électronique de GaN, mémoire de Master , Université de Bordj Bou Arréridj, 2011.
- [13] L. H. Thomas, Proc. Cambridge Philos. Soc. 23, 542 (1927).
- [14] E. Fermi, Z. Phys. 48, 73 (1928).
- [15] P. Hohenberg and W. Kohn , Phys.Rev. **B 136**, 864 (1964).

- [16] S. Benyettou, Calcul de premier principe de quelques propriétés physiques de quelques alliages semi-conducteurs, thèse de Doctorat, université de Biskra, 2016
- [17] A. Benamrani, Propriétés structurales, optoélectroniques, élastiques et dynamiques des Semi-conducteurs type II-VI, thèse de Doctorat, université de Sétif, 2012 .
- [18] G. Broyden, *Math. Comp.* **19**, 577 (1965).
- [19] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865
- [20] D. M. Ceperley, B. J. Alder, "Ground state of the electron gas by a stochastic method", *Phys Rev. Lett.*, **45**, 566-569 (1980).
- [21] S. J. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, "Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: A critical analysis", *Can. J. Phys.* **58**, 1200-1211 (1980).
- [22] J. P. Perdew, A. Zunger, "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems", *Phys. Rev. B* **23**, 5048-5079 (1981).
- [23] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, C. Fiolhais, "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation", *Phys. Rev. B* **46**, 6671-6687 (1992).
- [24] A.P. Becke, *Phys.Rev. A* **38**, 3098 (1988).
- [25] J.P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, *Phys.Rev.Lett.* **77**, 3865 (1996).

Chapitre 2 :
Ondes planes et pseudopotentiels

II.1) Introduction

La résolution de l'équation de Kohn et Sham suivant le modèle de la théorie de la DFT exige le choix des implémentations qui décrivent la nature de la base (potentiel et orbitales) et le traitement de l'énergie cinétique et celle d'échange-corrélation [1-2]. La périodicité cristalline régulière du cristal nécessite l'utilisation d'une base appelée méthode de pseudo-potential et ondes planes (PP-PW) [3] et une technique de points spéciaux dans l'espace réciproque pour la fonction d'onde. Les électrons qui obéissent à l'équation de Kohn et Sham, sont appelés électrons de Bloch.

II.2 Ondes planes et théorème de Bloch :

La symétrie, l'invariance par translation dans le réseau direct et la commutation de L'Hamiltonien de Kohn et Sham avec l'opérateur de translation conduisent à une fonction d'onde mono-électronique de Kohn et Sham $\varphi(\vec{r})$ qui s'écrit sous forme d'un produit d'une onde plane $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ par une fonction $u_i(\vec{r})$ ayant la périodicité du réseau cristallin [4].

$$\varphi(\vec{r}) = u(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{II.1})$$

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R}) \quad (\text{II.2})$$

Où \vec{K} et \vec{R} sont le vecteur d'onde de la première zone de Brillouin et le vecteur de translation du réseau direct.

$$u(\vec{r}) = \sum_G C_G \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) \quad (\text{II.3})$$

Où G est un vecteur du réseau réciproque défini par $\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\mathbf{m}$ (m est un entier).

La fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ s'écrit sous la forme d'une somme d'ondes planes.

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_G C_{\vec{k}+\vec{G}} \exp i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r} \quad (\text{II.4})$$

La fonction de Bloch est la fonction d'onde d'un électron libre $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ modulée par le potentiel périodique du réseau à travers la fonction $\mathbf{u}(\vec{r}) = \mathbf{u}(\vec{r} + \vec{R})$ [5].

II.3 Echantillonnage de la première zone de Brillouin :

Les vecteurs d'ondes k de la première zone de Brillouin du réseau réciproque sont discrètes, quasi-continues et obéissent aux conditions aux limites périodiques de Born-Von Karman. Le nombre de vecteurs k permis dans la première zone de Brillouin est identique au nombre de sites dans le cristal. L'infinité des points k exige l'échantillonnage de la première zone de Brillouin de façon à calculer la structure électronique pour un nombre limité et minimal de points k où les états électroniques sont occupés et caractérisés par des bandes continues. Parmi les méthodes d'échantillonnage de la zone de Brillouin on cite la méthode de Monkhorst et Pack [6] et celle de Chadi et Cohen [25].

II.4 Méthode de Philips et Kleinman :

Le théorème de Phillips Kleinman [7] - [8] provient de la méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW). D'après cette méthode la fonction d'onde réelle de tout électron ψ_{AE} est une combinaison d'une onde plane ϕ_{op} (une fonction d'onde lisse de valence) et d'une fonction du cœur ϕ_c . Ce formalisme prend en compte la condition d'orthogonalité entre les orbitales de cœur et de valence, c'est-à-dire la fonction d'onde est orthogonale aux états du cœur [7].

$$|\psi_{AE}\rangle = |\phi_{op}\rangle + \sum_i C_i |\phi_{c_i}\rangle \quad (\text{II.5})$$

A partir de la condition d'orthogonalité entre les orbitales de cœur et de valence on a :

$$\langle \phi_{c_i} | \psi_{AE} \rangle = 0 \quad (\text{II.6})$$

et

$$-C_i = \langle \phi_{c_i} | \phi_{op} \rangle \quad (\text{II.7})$$

La fonction d'onde est de la forme :

$$|\psi_{AE}\rangle = |\phi_{op}\rangle - \sum_i |\phi_{c_i}\rangle \langle \phi_{c_i} | \phi_{op} \rangle \quad (\text{II.8})$$

Les fonctions d'onde doivent satisfaire à l'équation de Schrödinger indépendante du Temps :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_c \quad (\text{II.9})$$

Avec V_c le potentiel attractif du cœur.

La fonction du cœur ϕ_{c_i} et l'énergie E_{c_i} sont respectivement la fonction propre et la valeur propre de l'Hamiltonien du cœur H :

$$H|\phi_{ci}\rangle = E_{ci}|\phi_{ci}\rangle \quad (\text{II.10})$$

Ainsi l'Hamiltonien de valence H s'écrit :

$$H|\phi_{op}\rangle = E|\phi_{op}\rangle \quad (\text{II.11})$$

L'équation de Schrödinger devient donc :

$$H|\phi_{op}\rangle - \sum_i E_{ci}|\phi_{ci}\rangle\langle\phi_{ci}|\phi_{op}\rangle + E \sum_i |\phi_{ci}\rangle\langle\phi_{ci}|\phi_{op}\rangle = E|\phi_{op}\rangle \quad (\text{II.12})$$

Cette équation devient :

$$H|\phi_{op}\rangle + \sum_i (E - E_{ci})|\phi_{ci}\rangle\langle\phi_{ci}|\phi_{op}\rangle = E|\phi_{op}\rangle \quad (\text{II.13})$$

Ou on reconnait que :

$$V_r(r) = \sum_i (E - E_{ci})|\phi_{ci}\rangle\langle\phi_{ci}| \quad (\text{II.14})$$

Où $V_r(r)$ est un potentiel répulsif de faible portée et la valeur propre E est l'énergie réelle correspondante à la fonction d'onde réelle Ψ_{AE}

L'équation de Schrödinger est donnée sous la forme :

$$(H + V_r(r))|\phi_{op}\rangle = E|\phi_{op}\rangle \quad (\text{II.15})$$

L'Hamiltonien qui nous intéresse s'écrit :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_c(r) + V_r(r)\right)|\phi_{op}\rangle = E|\phi_{op}\rangle \quad (\text{II.16})$$

On obtient donc :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_{ps}(r)\right)|\phi_{op}\rangle = E|\phi_{op}\rangle \quad (\text{II.17})$$

Avec :

$$V_{ps}(r) = V_c(r) + V_r(r) \quad (\text{II.18})$$

Le pseudopotentiel $V_{ps}(r)$ est la somme d'un potentiel attractif de longue portée $V_c(r)$ et d'un potentiel répulsif de faible portée $V_r(r)$.

II.5 Familles des Pseudopotentiels :

Généralement, on distingue trois grandes familles de Pseudopotentiels : Pseudopotentiels à norme conservée, Pseudopotentiels de Vanderbilt [9] appelés Pseudopotentiels ultra-doux et pseudopotentiels projetés PAW (*Projector Augmented waves* en anglais) qui sont des pseudopotentiels à norme non conservée [10].

Dans notre travail nous avons choisi d'utiliser les Pseudopotentiels à norme conservée pour leur simplicité conceptuelle d'utilisation et de mise en œuvre numérique.

II.5.1) Pseudopotentiels à norme conservée :

Les Pseudopotentiels générés par un calcul sur les atomes sont nommés "ab initio" parce qu'ils ne sont pas ajustés à l'expérience. Le concept "norme conservée" occupe une Place spéciale dans le développement des pseudopotentiel ab-initio, car il simplifie leurs Applications et les rend plus précis et transférable. Dans les calculs de l'énergie totale, l'énergie d'échange-corrélation du système est fonction de la densité électronique. La Condition pour laquelle cette énergie est correcte est qu'à l'extérieur de la région du cœur, les Pseudofonctions d'onde et les fonctions d'onde réelles doivent être identiques. Cette Particularité ne s'applique pas seulement dans leur dépendance spatiale mais aussi dans leur Amplitude A , de telle sorte qu'elles génèrent la même densité de charge. Contrairement à L'approche PKA (Phillips et Kleinman 1959 pour le potentiel et Antoncik 1954, 1959 pour la Fonction) où les équations sont formulées en fonction de la partie lisse de la fonction de valence $\tilde{\Psi}_i^v(\mathbf{r})$ à laquelle s'ajoute une autre fonction, Les pseudofonctions à norme conservée sont $\Psi^{ps}(\mathbf{r})$ normalisées et sont solutions d'un potentiel modèle choisi afin de reproduire les propriétés de valence d'un calcul tout électron (*All Electron*). Dans l'application des pseudopotentiels aux systèmes complexes, tels que les molécules, clusters, solides...etc.

Les pseudofonctions de valence satisfont la condition d'orthogonalité [11].

$$\langle \psi_i^{\sigma,ps} | \psi_j^{\sigma',ps} \rangle = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (\text{II.19})$$

Ainsi les équations de Kohn et Sham ont la forme :

$$(H_{KS}^{\sigma,ps} - \varepsilon_i^\sigma) \psi_i^{\sigma,ps}(r) = 0 \quad (\text{II.20})$$

II.5 .1.1) Pseudopotentiels de Troullier et Martins :

Les pseudo-fonctions d'onde, pour chaque moment orbital (l) ont la forme suivante dans la région du cœur [12]:

$$R_l^{ps}(r) = r^{l+1} e^{p(r)} \quad , \quad r \leq r_c \quad (\text{II.21})$$

Où :

$$p(r) = c_0 + c_2 r^2 + c_4 r^4 + c_6 r^6 + c_8 r^8 + c_{10} r^{10} + c_{12} r^{12} \quad , \quad r \leq r_c \quad (\text{II.22})$$

Les coefficients \mathbf{c}_n sont déterminés à partir de :

1. La condition de conservation de la norme à l'intérieur de la région de cœur

$$\int_{r < r_c} (R_l^{ps}(r))^2 dr = \int_{r < r_c} (R_l(r))^2 dr \quad (\text{II.23})$$

2. Les conditions de la continuité de la fonction d'onde et de ses quatre premières dérivées au point r_c .

$$\frac{d^n R_l^{ps}(r_c)}{dr^n} = \frac{d^n R_l(r_c)}{dr^n}, \quad n = 0, \dots, 4 \quad (\text{II.24})$$

3. Continuité de la fonction d'onde :

$$R_l^{ps}(r_c) = r_c^{l+1} e^{p(r_c)} = R_l(r_c) \quad (\text{II.25})$$

Avec :

$$p(r_c) = \ln \frac{R_l(r_c)}{r_c^{l+1}} \quad (\text{II.26})$$

4. Continuité de la première dérivée de la fonction d'onde :

$$\frac{dR_l^{ps}(r)}{dr} = (l+1)r^l e^{p(r)} + r^{l+1} e^{p(r)} p'(r) = \frac{l+1}{r} R_l^{ps}(r) + p'(r) R_l^{ps}(r) \quad (\text{II.27})$$

D'où

$$p'(r_c) = \frac{dR_l^{ps}(r_c)}{dr} \frac{1}{R_l^{ps}(r_c)} - \frac{l+1}{r_c} \quad (\text{II.28})$$

Continuité de la seconde dérivée de la fonction d'onde, ce qui revient à écrire :

$$p''(r_c) = 2(V(r_c) - \varepsilon) - 2 \frac{l+1}{r_c} p'(r_c) - [p'(r_c)]^2 \quad (\text{II.29})$$

Continuité de la troisième et quatrième dérivée de la fonction d'onde, qui est assurée par la continuité du troisième et quatrième dérivé de $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ par une dérivation directe de l'expression de $\mathbf{p}''(\mathbf{r})$:

$$p'''(r_c) = 2V'(r_c) + 2 \frac{l+1}{r_c^2} p'(r_c) - 2 \frac{l+1}{r_c} p''(r_c) - 2p'(r_c)p''(r_c) \quad (\text{II.30})$$

$$p''''(r_c) = 2V''(r_c) - 4\frac{l+1}{r_c^3}p'(r_c) - 2\frac{l+1}{r_c^2}p''(r_c) - 2\frac{l+1}{r_c}p'''(r_c) - 2[p''(r_c)]^2 - 2p'(r_c)p'''(r_c) \quad (\text{II.31})$$

La condition $V''(0) = 0$ qui se traduit par :

$$c_2^2 + c_4(2l + 5) = 0 \quad (\text{II.32})$$

A partir de là, il est possible d'obtenir un pseudo-potentiel intermédiaire « écranté », qui agit sur les pseudo-fonctions d'onde, comme le potentiel effectif agit sur les fonctions d'onde de valence. Il suffit pour cela d'inverser l'équation de Schrödinger radiale pour les pseudo-fonctions :

$$V_{sc,l}^{ps}(r) = \varepsilon_{n,l} - \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{1}{2r\psi_l^{ps}(r)} \frac{d^2}{dr^2} [\psi_l^{ps}(r)] \quad (\text{II.33})$$

Enfin, le pseudo-potentiel correspondant au moment l est obtenu en soustrayant les contributions dues aux électrons de valence dans le pseudo-potentiel écranté :

$$V_l^{ps}(r) = V_{sc,l}^{ps}(r) - V_H[n^{ps}(r)] - V_{xc}[n^{ps}(r)] \quad (\text{II.34})$$

Où n^{ps} désigne une pseudo-densité électronique à partir des pseudo-fonctions d'ondes.

II.5 .1.2) Pseudopotentiels de Hartwigzen Goedecker Hutter :

La partie locale de pseudo-potentiel est donnée par [13] :

$$V_{loc}(r) = \frac{-Z_{ion}}{r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2}r_{loc}}\right) + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^2\right] \times [c_1 + c_2\left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^2 + c_3\left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^4 + c_4\left(\frac{r}{r_{loc}}\right)^6] \quad (\text{II.35})$$

erf est la fonction erreur et Z_{ion} est la charge ionique du cœur atomique, c.à.d. la charge totale moins la charge de valence.

La contribution non locale au pseudo-potentiel est donnée par :

$$V_l(r, r') = \sum_{i=1}^{i=3} \sum_{j=1}^{j=3} \sum_{m=-l}^{m+l} Y_{l,m} p_i^l(r) h_i^l p_j^l(r') Y_{l,m}^*(r') \quad (\text{II.36})$$

Où $Y_{l,m}$ sont harmoniques sphériques, (l) est le moment angulaire, et les projecteurs $P_i^l(r)$ sont gaussiens de la forme :

$$p_i^l(r) = \frac{\sqrt{2}r^{l+2(i-1)} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_l^2}\right)}{r_l^{l+(4i-1)/2} \sqrt{\Gamma\left(l+\frac{4i-1}{2}\right)}} \quad (\text{II.37})$$

Γ représente la fonction Gamma.

Dans cette construction, les paramètres sont trouvés en minimisant entre les valeurs propres et les charges à l'intérieur de la région de cœur pour l'atome et le pseudo-atome. Une caractéristique spéciale de ce pseudo-potentiel est qu'il ajuste les paramètres directement à partir des valeurs propres et des charges calculées en faisant intervenir tous les électrons, au lieu de faire un fit analytique ou numérique qui reproduit les pseudo-fonctions qui elles-mêmes construites à partir de ces derniers [14].

II .5.2 Pseudopotentiels à norme non conservée :

II.5.2.1 Pseudopotentiels ultra-doux (USPP) :

Les Pseudopotentiels ultra-doux (ultra-soft) USPP sont utilisés pour l'étude des métaux de transition car ces atomes possèdent des orbitales localisées et nécessitent un nombre d'ondes planes important [15].

En 1990, Vanderbilt [16] a introduit une nouvelle approche dans laquelle les pseudofonctions d'ondes sont contraintes à être égales aux fonctions d'ondes tout électrons au-delà de r_c comme dans le concept de conservation de la norme, mais sont les plus douces possible à l'intérieur. Afin de permettre ce dernier point, la conservation de la norme est abandonnée. De grandes valeurs de r_c peuvent alors être employées, et par conséquent, le nombre d'ondes planes nécessaire pour les calculs peut être considérablement réduit.

Mais, il est nécessaire d'augmenter la densité électronique autour des atomes, car les fonctions d'ondes ne permettent pas de retrouver toute la charge du système [17].

Pour cela, Vanderbilt a remplacé la condition d'orthogonalité des fonctions d'onde par une condition générale :

$$\langle \Psi_i | S(\{R_I\}) | \Psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{II.38})$$

Où la matrice S dépend des positions des atomes et s'exprime de la manière suivante :

$$S(\{R_I\}) = \mathbf{I} + \sum_{nm,l} q_{nm,l} |\beta_n^l\rangle \langle \beta_m^l| \quad (\text{II.39})$$

$$q_{nm} = \int dr. Q_{nm}(r) \quad (\text{II.40})$$

Où \mathbf{I} représente la matrice identité.

Les fonctions $\mathbf{Q}_{nm}(\mathbf{r})$ sont appelées fonctions d'augmentation et sont strictement localisées dans la région du cœur. Elles constituent la donnée supplémentaire nécessaire pour caractériser pleinement un pseudopotentiel de Vanderbilt.

La densité électronique tient compte de cette augmentation par une reformulation adéquate :

$$\rho(r) = \sum_i \{ |\psi_i(r)|^2 + \sum_{nm,l} Q_{nm}^l(r) \langle \psi_i | \beta_n^l \rangle \langle \beta_m^l | \psi_i \rangle \} \quad (\text{II.41})$$

Elle se compose ainsi d'une partie non-localisée et nécessite peu d'ondes planes, à laquelle s'ajoute, à travers les fonctions $\mathbf{Q}_{nm}^l(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}_{nm}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$, une contribution localisée et développée sur un grand nombre d'ondes planes.

D'autre part, deux énergies de référence sont considérées pour chaque moment orbital, Afin d'éviter l'apparition des états fantômes (Ghost states) précédemment cités et d'augmenter la transférabilité des Pseudopotentiels. Ceux-ci sont donc associés à deux fois plus de projecteurs que les Pseudopotentiels à norme conservée ($\mathbf{N}_\beta^V = 2\mathbf{N}_\beta^{NC}$)

Cette modification de la densité n'a pas d'influence sur l'expression formelle de l'énergie.

Il n'en va pas de même pour sa dérivée fonctionnelle, qui est affectée par la présence des fonctions d'augmentation dans la densité électronique. En effet, à cause d'elles, on a maintenant :

$$\frac{\delta \rho(r')}{\delta \psi_i^*(r)} = \psi_i(r') \delta(r' - r) + \sum_{nm,l}^I Q_{nm}^l(r') \beta_n^l(r) \langle \beta_m^l | \psi_i \rangle \quad (\text{II.42})$$

Donc :

$$\frac{\delta E_{tot}}{\delta \psi_i^*(r)} = \int dr' \frac{\delta E_{tot} \delta \rho(r')}{\delta \rho(r) \delta \psi_i(r)} \quad (\text{II.43})$$

Ou également :

$$\frac{\delta E_{tot}}{\delta \psi_i^*(r)} = V_{eff}^{pp}(r) \psi_i(r) + \sum_{nm,l} \beta_n^l(r) \langle \beta_m^l | \psi_i \rangle \int dr' V_{eff}^{pp}(r') Q_{nm}^l(r') \quad (\text{II.44})$$

Où V_{eff}^{pp} est le potentiel effectif.

Les équations de Kohn-Sham doivent être modifiées en conséquence et prendre en compte les conditions d'orthogonalités générales, elles deviennent :

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_{eff}^{pp} + \sum_{nm,l} D_{nm}^l | \beta_n^l \rangle \langle \beta_m^l | \right] | \psi_i \rangle = \epsilon_i S | \psi_i \rangle \quad (\text{II.45})$$

Avec :

$$D_{nm}^l = D_{nm}^0 + \int dr V_{eff}^{pp}(r) Q_{nm}^l(r) \quad (\text{II.46})$$

La définition des coefficients D_{nm}^l permet de regrouper les contributions du potentiel non-local et des fonctions d'augmentation en un seul terme [17].

On remarque que, puisque ces coefficients sont définis à partir du potentiel effectif, Ils dépendent des fonctions d'onde, et devront être mis à jour à chaque pas lors de la résolution auto-cohérente des équations de Kohn et Sham [18].

II.5.2.2) Pseudopotentiels PAW :

L'idée de la méthode PAW [19-20] est née du souci de restreindre le grand nombre de fonctions de base pour décrire une fonction d'onde typique dans un solide. L'approche PAW consiste à utiliser deux sortes de fonctions de base : l'une utilise des fonctions d'onde atomiques partielles à l'intérieur des cœurs, et l'autre un ensemble de fonctions d'onde planes dans la région interstitielle. Il y a donc une séparation de l'espace en deux zones. La raison de cette séparation est le comportement du potentiel effectif vu par les électrons de valence : dans la région interstitielle, la densité électronique totale est faible. Par conséquent, quelques ondes planes suffiront à décrire les états de valence de manière satisfaisante.

A l'intérieur des cœurs, par contre, il y a beaucoup d'électrons dans un faible volume. Les fonctions d'ondes oscillent rapidement entraînant de fortes variations d'amplitude de la densité de charge électronique totale. A cause de ces variations, la décomposition de Fourier du potentiel créé par cette distribution de charge possède des composantes de grands vecteurs d'onde, ce qui défavorise le traitement en onde planes. On est donc amené à décrire de façon différente les fonctions d'onde des électrons de valence dans ces deux régions de l'espace :

- Dans la région interstitielle, on utilise des ondes planes.
- A l'intérieur des cœurs, une décomposition en ondes partielles solutions de l'équation de Schrödinger pour l'atome isolé qui sont nettement mieux adaptées au potentiel qui y règne.

Le partitionnement de l'espace physique en deux types de région est illustré sur la figure 2.3. [21].

Dans le code VASP sont utilisées des données PAW standardisées pour une meilleure reproductibilité des calculs et ceci à travers une base de Pseudopotentiels PAW d'une part dans l'approximation GGA de type PW91 [22] appelée PAW-GGA et d'autre part dans l'approximation LDA de type Ceperley et Adler [23] paramétrisée par Perdew et Zunger [24] appelée PAW.

II.6) Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons expliqué les pseudopotentiels permettent de réduire la taille de l'Hamiltonien en évitant de calculer les électrons du cœur de l'atome, C'est à dire en limitant les calculs aux électrons de valence. De plus les bases particulières employées permettent de faciliter les calculs. [27] nous avons ainsi cité les différents types des pseudopotentiels en deux catégories : les pseudopotentiel a norme conservée tel que Pseudopotentiels de Troullier et Martins et les pseudopotentiels de Hartwigzen Goedecker Hutter et les pseudopotentiels a norme non-conservée tel que Pseudopotentiels ultra-doux (USPP) et Pseudopotentiels PAW.

Références

Références

- [1] E. Betranhandy, Proposition et études ab initio des stabilités relatives de nouveaux matériaux par géomimétisme structural : Modélisation des propriétés physico-chimiques ,Thèse de doctorat, Université de Bordeaux (France), (2005).
- [2] C. Frayret, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux (France), (2004).
- [3] M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias, J.D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys. 64, (1992) 1045.
- [4] F. Bloch, Z. Physic 52, (1928) 555.
- [5] H.T. Diep, Physique de la matière condensée, Dunod, Paris, (2003).
- [6] Nicolas. Richard, Thèse de doctorat, CEA/DAM - direction Ile -de- France, 2002.
- [7] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Livre. (Springer Series in Solid-State Sciences 75) (1988).
- [8] C. Jay Smallwood, Ross E. Larsen, William J. Glover and Benjamin J. Schwartz J. Chem. Phys.125, 074102 (2006).
- [9] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B, 41 (1990) 7892
- [10] G. Kresse, D. Joubert, Phys. Rev. B, 59 (1999) 1758
- [11] A. SAOUDI , Étude des Propriétés Structurales, Élastiques, Électroniques, Optiques et Thermodynamiques des Composés CaSrTt (Tt = Si, Ge, Sn et Pb), thèse de doctorat, université de Sétif, 2014
- [12] C. Stamfl, C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B 59 (1999) 5521
- [13] P. Giannozzi, S. de Gironcoli, P. Pavone et al, Phys. Rev. B 43 (1991) 7231
- [14] S. Benyettou, Calcul de premier principe de quelques propriétés physiques de quelques alliages semi-conducteurs, thèse de Doctorat, université de Biskra, 2016 .
- [15] G. B. Bachelet, D. R. Hamann and M. Schuller, Phys. Rev. B 26, 4199 (1982).
- [16] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 41, 7892 (1990).
- [17] N. Belmiloud, Etude de premier principe des propriétés électroniques, magnétiques, Dynamiques et thermodynamiques des super-réseaux de type (VN)₁/(InN)₁ Et (CrN)₁/(GaN)₁ , these de Doctorat, université d'Oran, 2016.

- [18] K. Laasonen, A. Pasquarello, R. Car, C. Lee and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B, 47,10142-10153 (1993).
- [19] P. Blochl, . Phys. Rev., B50, 17953 (1994).
- [20] G. Kresse, et D. Joubert, Phys. Rev., B59, 1758 (1999).
- [21] F. MESSAR , Etude des Propriétés Structurales et Electroniques du Composé CrC1-xBx , mémoire de Magister, université de Tlemcen , 2010.
- [22] J.P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev., B 45, 2471 (1992).
- [23] D.M. Ceperly, B.J. Alder, Phys. Rev. Lett., 45, pp 566-569, 1980.
- [24] J.P. Perdew, A. Zunger, Phys. Rev. B 45, 5048 (1981).
- [25] D.J. Chadi and L. Cohen, Phys. Rev. B 8, 5747 (1993)
- [26] Mr. SALIM BOURAS THEME : Etude des propriétés physiques des composés semi-conducteurs A₂PtH₆(A=K, Rb, Cs), NaXIrH₆ (X= Ca, Sr, Ba) et B_xMg_{1-x}SyTezSe_{1-y-z} par ab initio. 2015
- [27] Mr Pierre-Yves Prodhomme, Thèse de Doctorat ‘‘ Étude ab initio des alignements de bandes dans les empilements métal-oxyde-semiconducteur’’ l’Institut National des Sciences Appliquées de Rennes, (2008).

Chapitre 3 :
Résultats et discussions

III.1) Introduction

Ce chapitre est consacré aux résultats de calcul des propriétés structurales, électroniques et dynamiques du composé binaire GaN. Nous avons utilisé le code CASTEP (Cambridge Serial total energy package) [1] pour étudier les propriétés structurales et électroniques du GaN dans les deux phases Zinc blende (B3) et Wurtzite (B4). Les propriétés dynamiques de GaN dans la phase Zinc blende ont été étudiées à l'aide du code ABINIT [2].

III.2) Structures cristallographiques de GaN

Le GaN se trouve sous deux formes cristallines : cubique de type Zinc blende (B3) ou hexagonale de type Wurtzite (B4). Dans les conditions normales de pression et de température, La nitride de Gallium est stable et se cristallise dans la phase wurtzite (B4) [3].

III.2.1) Structure Wurtzite (B4)

La structure wurtzite est un ensemble de deux réseaux hexagonaux composés chacun d'une des deux espèces d'atomes (Gallium (Cation) et Azote (Anion) respectivement) et décalés suivant l'axe c de $\frac{5}{8}$ de la maille élémentaire.

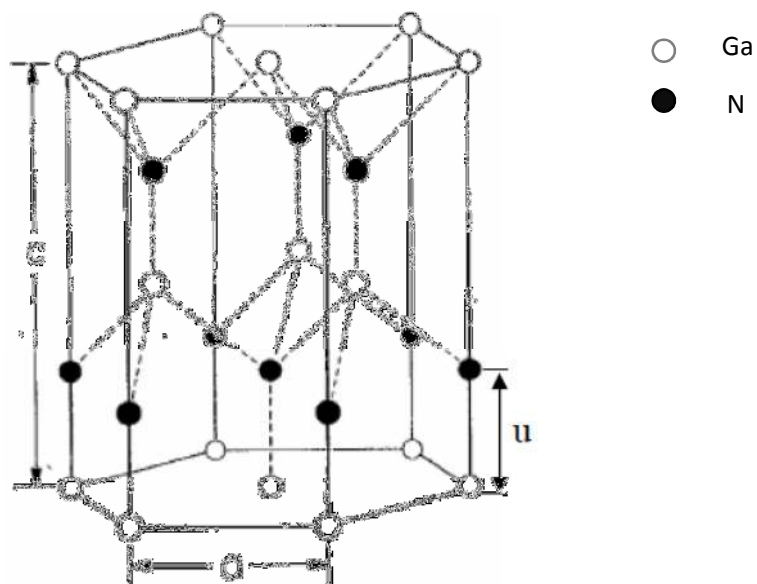


Figure III.1 : Maille Conventiionnelle du w-GaN (Wurtzite)[4]

Cette structure est caractérisée par trois paramètres : a la longueur de l'hexagone, c la hauteur de la maille élémentaire et u le paramètre interne qui représente la distance entre deux atomes consécutifs (Ga-N) suivant l'axe C .

Chaque atome de Gallium est lié à quatre atomes de l'azote formant un polyèdre. La **figure III.2** a été obtenue à l'aide du programme de visualisation VESTA [5].

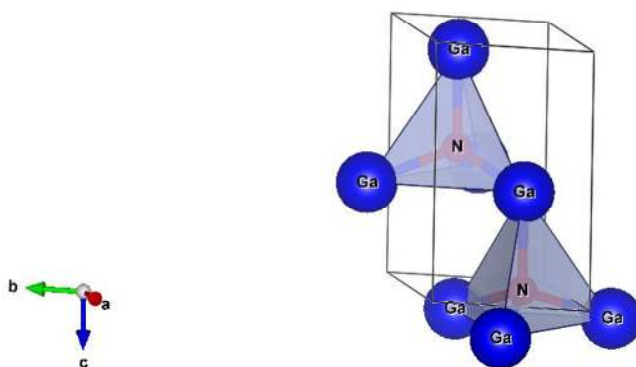


Figure III.2 : *Structure de w-GaN avec les polyèdres*

La figure **III.3** nous montre la maille primitive du w-GaN obtenue à l'aide d'un module complémentaire de visualisation intégré dans le code CASTEP.

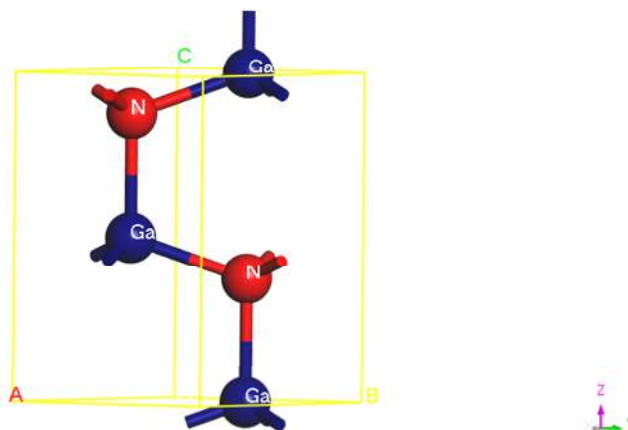


Figure III.3 : *Maille primitive du GaN (Wurtzite)*

La maille primitive de w-GaN (Wurtzite) contient 4 atomes (2 atomes de Gallium et 2 atomes d'azote N) et le groupe d'espace dans la notation d'Hermann-Mauguin est **P6₃mc** indexé par le numéro **186**.

Les positions atomiques correspondantes à cette structure sont :

Ga : 0.333300000 0.666600000 0.091200000

Ga : 0.666700000 0.333300000 0.591200000

N : 0.333300000 0.666600000 0.468800000

N : 0.666700000 0.333300000 0.968800000

Les angles du réseau de bravais sont $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ et le volume de la maille élémentaire de Wurtzite vaut $\Omega = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$.

Dans l'espace réciproque, la première zone de Brillouin associée à la structure Wurtzite est représentée par la figure III.4 :

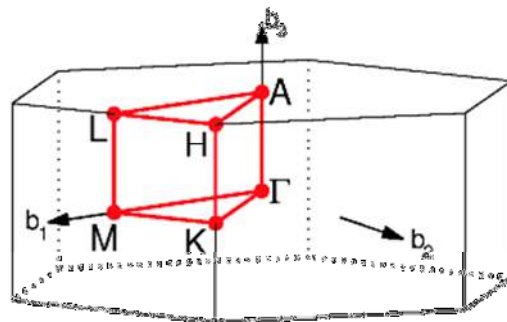


Figure III.4 : *Zone de Brillouin de la structure Wurtzite [6]*

III.2.2) Structure Zinc blende (B3)

La structure zinc blende est constituée de deux sous-réseaux cubique à faces centrées CFC décalés l'un par rapport à l'autre d'un cart ($\frac{1}{4}$) suivant la diagonale de la maille.

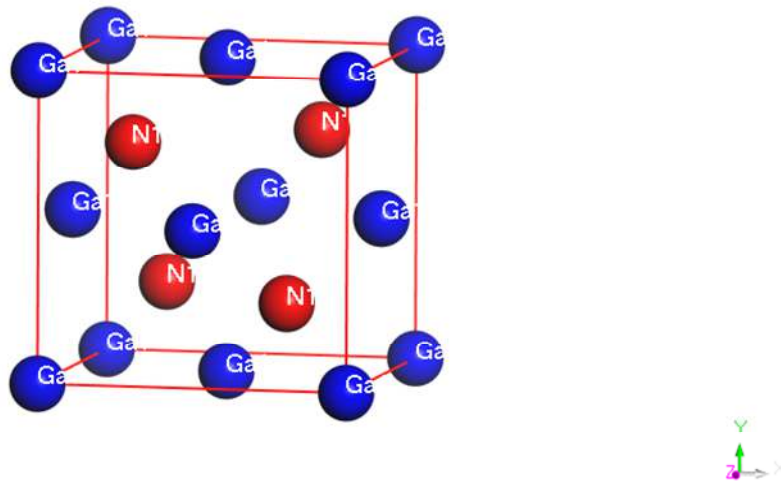


Figure III.5 : Maille conventionnelle de GaN (Zinc blende)

La maille élémentaire correspondante est représentée sur la figure III.5 :

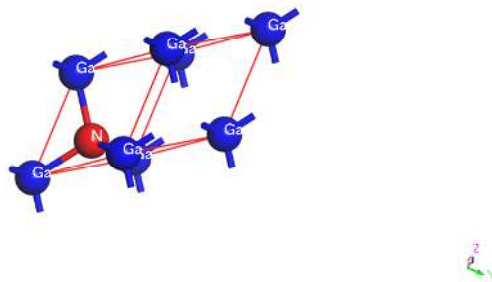


Figure III.6 : Maille primitive du GaN (Zinc blende)

La maille élémentaire de GaN dans la structure zinc blende (B3) contient 2 atomes (1 Ga et 1 N) et le groupe d'espace dans la notation d'Hermann-Mauguin est $F\bar{4}3m$ indexé par le numéro 216. Le motif de cette structure est constitué de deux atomes où leurs positions atomiques sont :

Ga : 0.333300000 0.666600000 0.468800000

N : 0.666700000 0.333300000 0.968800000

Les angles de réseau de bravais sont $\alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$.

Le réseau réciproque associé à la structure Zinc blende dans la première zone de Brillouin est un octaèdre tronqué comme le montre la figure III-6 .

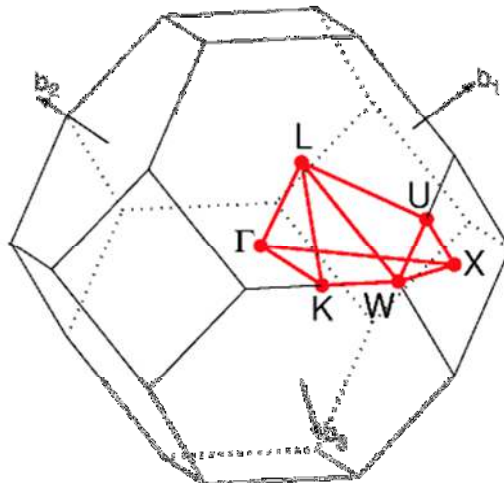


Figure III.7 : *Zone de Brillouin de la structure Zinc blende [6]*

III.3) Descriptions des codes de calcul

III.3.1) Code CASTEP

CASTEP (Cambridge Serial total energy package) est un code de calcul basé sur les fonctions d'ondes planes (PW) et les pseudopotentiels (PP). A l'aide de ce code puissant on peut calculer les propriétés structurales, électroniques, élastiques, optiques, thermodynamiques,

magnétiques..etc de plusieurs matériaux semi-conducteurs, isolants, métaux, alliages, les surfaces et nanotubes, etc.

III.3.1) Code ABINIT

ABINIT est un code de premiers principes développé par une équipe de recherche de l'université catholique de Louvain en Belgique avec d'autres chercheurs du monde. ABINIT est un code de calcul ab-initio basé sur la DFT et qui est doté d'une base de pseudopotentiels et d'ondes planes pour le développement des orbitales de Kohn-Sham. C'est un code libre (free) de source ouverte ce qui permet à la communauté internationale de développer ce code. Avec ABINIT, on peut simuler diverses propriétés (structurale, électronique, optique, élastique, dynamique, thermodynamique, magnétiques ; etc) d'un grand nombre de matériaux et de molécules.

III.4) Paramètres de Convergence

Avant d'étudier les propriétés structurales, électroniques et dynamiques de GaN, une étape indispensable doit être faite. Des tests de convergence de l'énergie totale du système (GaN) ont été effectués sur le Cut-off d'énergie (l'énergie de Coupure) et le nombre de point k dans la première zone de Brillouin.

La simulation de l'énergie totale est obtenue après l'intégration spéciale des points k de l'espace réciproque dans la première zone de Brillouin. Au début, l'énergie de coupure (Cut-off d'énergie) est fixée à 550 eV, pour le GaN dans les deux phases zinc blende et wurtzite.

L'échantillonnage de la première zone de Brillouin de la structure B3 (zinc blende) a été selon une grille de $8 \times 8 \times 8$ (20 *points k*). La structure Wurtzite (B4) a été échantillonnée en points k selon une grille de $9 \times 9 \times 6$ (36 *points k*) . Ce qui assure une convergence de l'énergie totale avec une tolérance de $10^{-7} eV/atome$.

La description de la fonctionnelle de l'énergie d'échange et de corrélation est effectuée par l'intermédiaire de l'approximation de la densité locale LDA paramétrisée par Ceperley et Alder (CA-PZ) [7] et l'approximation du gradient généralisé GGA paramétrisée par Perdew, Berke et Erenzehof (PBE) [8].

Les figures (III.7) , (III.8), (III.9) et (III.10) montrent les courbes de convergence de l'énergie totale de GaN dans les deux phases (B3 et B4) en fonction de l'énergie de coupure et le nombre de points k .

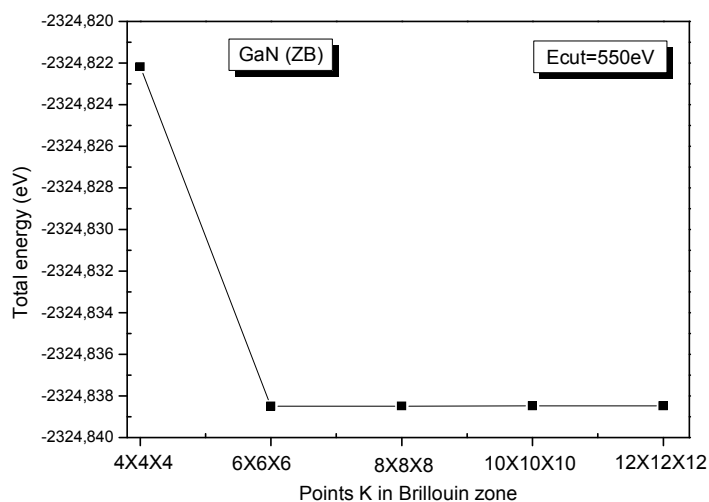


Figure III.8 : *Variation de l'énergie totale de GaN (phase ZB) en fonction de nombre de points k*

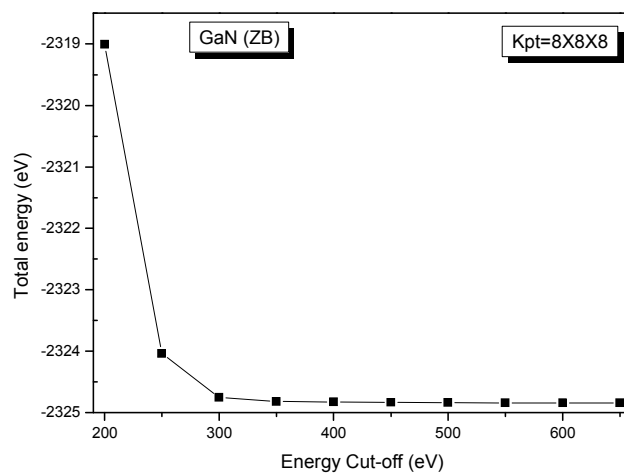


Figure III.9 : *Variation de l'énergie totale de GaN (phase Zinc Blende) en fonction du Cut-off d'énergie*

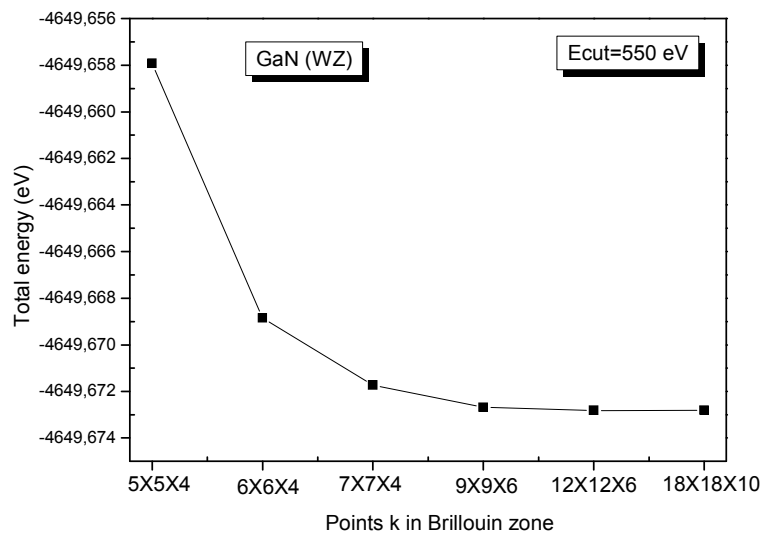


Figure III.10 : *Variation de l'énergie totale de GaN (phase Wurtzite) en fonction de nombre de points k*

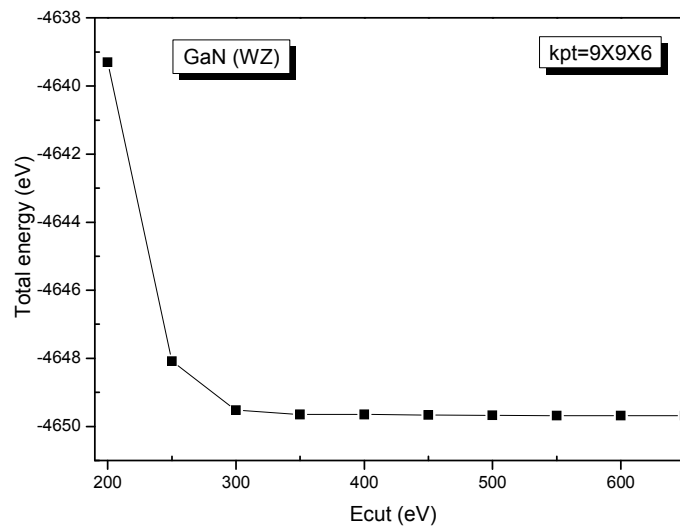


Figure III.11 : *Variation de l'énergie totale de GaN (phase Wurtzite) en fonction du Cut-off d'énergie*

III.5) Propriétés structurales

III.5.1) Paramètre de maille et équation d'état (EOS)

Après avoir fixé les paramètres de convergence c'est-à-dire le cut-off d'énergie et le nombre de points k , Nous faisons une optimisation géométrique de la structure de GaN dans les deux phases zinc blende (B3) et Wurtzite (B4) grace à un algorithme de Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) implémenté dans le code CASTEP [1].

Le volume à l'équilibre V_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée B' sont obtenus par minimisation de l'énergie totale E_{tot} en fonction du volume de la maille V via l'équation d'état de Birch-Murnaghan donnée par l'équation [9] :

$$E = E_0 + \frac{9V_0B_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B' + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\} \quad (\text{III.1})$$

Où : E_0 est l'énergie au volume d'équilibre.

$$B_0 \text{ est le module de compressibilité défini par l'équation : } B_0 = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III.2})$$

V_0 : est le volume de la maille à l'équilibre.

B' : est la dérivée du module de compressibilité par rapport à la pression d'équilibre :

$$B' = \left(\frac{\partial B_0}{\partial p} \right) \quad (\text{III.3})$$

Le tableau (III.1) résume les paramètres de maille (a, c), le paramètre interne u , les volumes d'équilibre V_0 , le rapport c/a , module de compressibilité B_0 et sa dérivée B'_0 pour le GaN dans les phases zinc blende et Wurtzite comparées avec quelques résultats expérimentaux ([10],[16],[20]) disponibles ainsi d'autres théoriques ([3],[12],[13],[15],[17],[24]).

| Structure | | $a_0(\text{Å})$ | $a(\text{Å})$ | $\frac{c}{a}$ | u | $B_0(\text{GPa})$ | B' | $V_0(\text{Å}^3)$ | |
|---------------------------------|------------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| Zinc Blende (B3) | <i>Présent travail (GGA)</i> | 4,557 | | | | 170,37 | 4,52 | 23,66 | |
| | <i>Présent travail (LDA)</i> | 4,461 | | | | 200,66 | 4,41 | 22,19 | |
| | <i>Autres calculs</i> | 4,46ⁱ | | | | | 183ⁱ | | |
| | | 4,446^d | | | | | 195^d | - | 21,97^d |
| | | 4,41^g | | | | | 173^g | 3,64^g | 21,44^g |
| | | 4,447^b | | | | | 207^b | 3,94^b | 21,98^b |
| <i>Expérimentale</i> | 4,50^h | | | | | 190^m | | 23,39^h | |
| | 4,49^a | | | | | 173^a | 3,7^a | 22,63^a | |
| Wurtzite (B4) | <i>Présent travail (GGA)</i> | | 3,224 | 1,629 | 0,376 | 170,69 | 4,52 | 47,30 | |
| | <i>Présent travail (LDA)</i> | | 3,156 | 1,630 | 0,376 | 201,00 | 4,42 | 44,38 | |
| | <i>Autres calculs</i> | 3,143^b | 1,626^b | 0,377^b | 215^b | 5,9^b | | 43,71^b | |
| | | 3,146^d | 1,629^d | 0,377^d | 195^d | | | 43,92^d | |
| | | 3,126^e | 1,638^e | - | 190^e | 2,9^e | | 43,33^e | |
| | | 3,170^f | 1,620^f | 0,379^f | 207^f | 4,5^f | | 44,69^f | |
| <i>Expérimentale</i> | 3,190^j | 1,627^j | 0,377^j | 195^k | - | | 45,74^j | | |
| | 3,189^c | 1,626^c | | | | | 45,66^c | | |

^a [10], ^b [3], ^c [11], ^d [12], ^e [13], ^f [14], ^g [15], ^h [16], ⁱ [17], ^j [18], ^k [19], ^m [20], ⁿ [21], ^p [22], ^q [23], ^r [24], ^s [25],

^t [26], ^u [27], ^v [28]

Tableau III.1 : Comparaison des valeurs calculées théoriquement et expérimentalement des propriétés structurales du composé GaN dans les deux phases zinc blende et wurtzite : paramètres de maille a_0 , a , rapport $\frac{c}{a}$, module de compressibilité B_0 , et sa dérivée B' .

La lecture du tableau III.1 nous permet de déduire les remarques suivantes :

- Les valeurs du paramètre de maille a_0 pour le GaN dans la structure zinc blende calculées par la LDA et la GGA sont en bon accord avec celles calculées théoriquement .

- Le paramètre de maille a_0 calculé par la GGA (LDA) est supérieur (inférieur) par rapport au paramètre de maille rapporté par les autres auteurs ce qui est en accord avec la tendance générale de ces approximations.
- Les valeurs du paramètre de maille a_0 , du rapport c/a et du paramètre interne u du GaN dans la phase wurtzite, calculées dans le cadre de la LDA et la GGA sont en bon accord avec celles calculées théoriquement ou expérimentalement par d'autres auteurs.
- La valeur du module de compressibilité B_0 de GaN (phase wurtzite) calculée par la LDA est mieux que celle calculée par la GGA comparativement avec les valeurs théoriques et expérimentales de module de compressibilité.

Pour voir la phase la plus stable du composé GaN, nous avons calculé l'énergie totale moyenne du GaN en fonction du rapport des volumes ($\frac{V}{V_{exp}}$) pour chaque phase (Zinc blende et wurtzite) dans une gamme de pression étendue de -20 GPa jusqu'à 20 GPa.

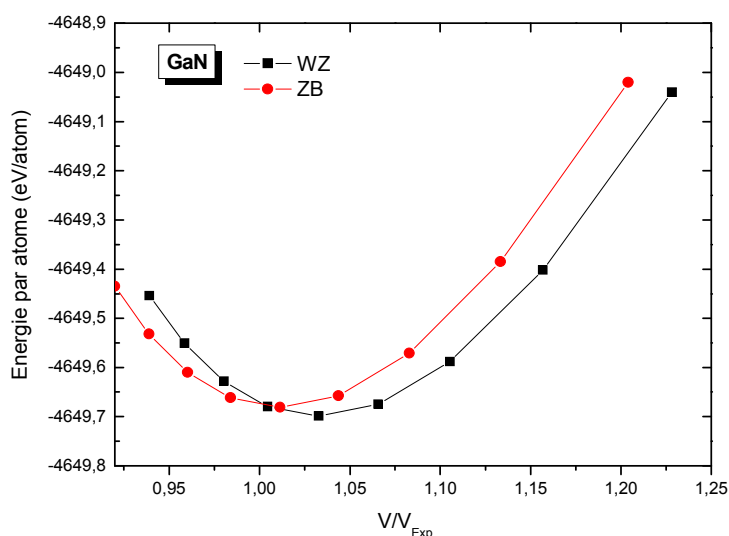


Figure III.12 : Variation de l'énergie totale du GaN en fonction du rapport des volumes ($\frac{V}{V_{exp}}$) dans les phases Zinc blende et wurtzite

D'après la figure III.12, on remarque que la phase wurtzite (B4) est la phase la plus stable pour le GaN car sa courbe possède le plus petit minimum de l'énergie comparativement avec celle de GaN dans la phase zinc blende. Ceci est en accord avec les résultats obtenus par Li et al [29].

III.6) Propriétés électroniques

III.6.1) Structure des Bandes d'énergie

Nous avons calculé les structures de bandes de GaN dans les phases zinc blende et Wurtzite à pression nulle en utilisant les approximations GGA(PBE) et LDA (CA-PZ). Les structures de bandes de GaN calculées en utilisant l'approximation GGA sont données par les figures (III.12) et (III.13). Pour le GaN dans la phase zinc blende (B3), la structure de bande est calculée selon les lignes de haute symétrie incluant les points X , R , Γ et M tandis que pour le GaN dans la phase wurtzite la structure de bande est calculée selon les lignes de haute symétrie incluant les points Γ , L , M , H et A .

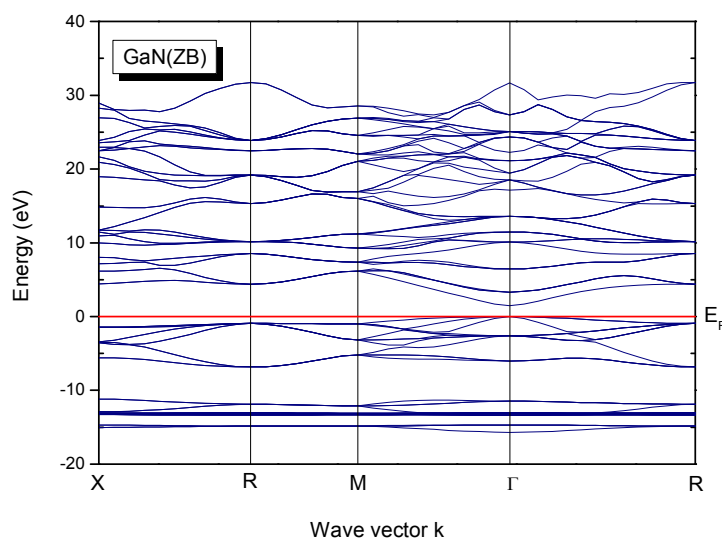


Figure III.13 : Structure de bandes d'énergie de GaN dans la phase Zinc blende (B3)

à l'équilibre hydrostatique ($P = 0$ GPa)

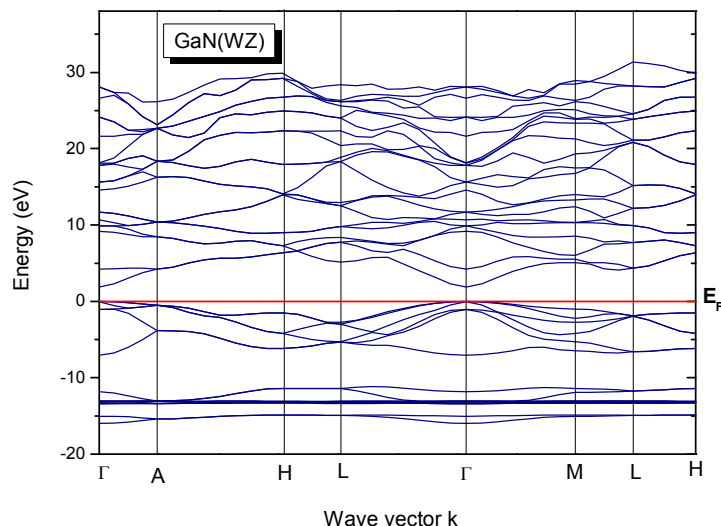


Figure III.14 : *Structure de bande de GaN dans la phase Wurtzite (B4)*

à l'équilibre hydrostatique ($P = 0$ GPa)

On remarque à partir de ces deux figures de structure de bandes d'énergie que le maximum de la bande de valence (VBM) et le minimum de la bande de conduction (CBM) se trouvent sur le même axe de haute symétrie incluant le point Γ ce qui prouve que le GaN est un semiconducteur à gap direct $\Gamma - \Gamma$.

III.6.2) Gaps d'énergie électronique

Par définition, le gap d'énergie fondamentale d'un matériau isolant incorporé dans la famille des semi-conducteurs ou celle des diélectriques est la différence entre le maximum de la bande de valence (MBV) et le minimum de la bande de conduction (MBC) [30].

Le tableau III.2 résume les valeurs du gap électronique de GaN dans les phases zinc blende et wurtzite en utilisant les approximations GGA et LDA, calculées théoriquement et comparées avec autres valeurs du gap calculées théoriquement ou expérimentalement.

| Structure | | $E_G^{\Gamma-\Gamma}$ (eV) |
|-------------------------|------------------------------|----------------------------|
| Zinc Blende (B3) | <i>Présent travail (GGA)</i> | 1,50 |
| | <i>Présent travail (LDA)</i> | 1,91 |
| | <i>Autres calculs</i> | 1,80^q |
| | | 1,89^r |
| | | 2,1^s |
| | | 2,09^t |
| | <i>Expérimentale</i> | 3,20^p |
| 3,30^p | | |
| Wurtzite (B4) | <i>Présent travail (GGA)</i> | 1,87 |
| | <i>Présent travail (LDA)</i> | 2,08 |
| | <i>Autres calculs</i> | 1,83^v |
| | | 2,04^r |
| | | 2,75^t |
| | | 2,59^u |
| | <i>Expérimentale</i> | 3,50ⁿ |
| 3,39^w | | |

ⁿ [21], ^p [22], ^q [23], ^r [24], ^s [25], ^t [26], ^u [27], ^v [28], ^w [44]

Tableau III.2 : Comparaison des gaps électroniques directs du composé GaN dans les phases Zinc blende (B3) et Wurtzite (B4) avec ceux obtenus théoriquement et expérimentalement

On remarque d'après le tableau ci-haut que nos valeurs du gap électronique E_g calculées par la LDA ou GGA sont proches aux gaps calculés théoriquement par d'autres auteurs et inférieures par rapport aux gaps expérimentaux du GaN dans les deux phases Zinc blende et Wurtzite.

Par ailleurs, LDA et GGA généralement sous-estiment les gaps d'énergie. Ceci revient principalement par ce qu'elles ont des formes simples qui ne sont pas suffisamment flexibles pour obtenir la forme exacte du potentiel d'échange et de corrélation [1].

On rappelle qu'il existe d'autres approximations correctives du gap électronique qui donnent de bonnes valeurs de gap proches aux gaps expérimentaux, telles que la GW [31] et la méthode TB-mBJ basée sur le potentiel de Becke-Johnson [32].

III.7) Propriétés dynamiques

III.7.1) Introduction

Dans cette partie, nos calculs ont été effectués dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité perturbée DFPT [33] implémentée dans le code Abinit [2]. La phase du GaN étudiée est le zinc blende car pour le Wurtzite les modes de vibrations sont plus compliqués et les calculs demandent un matériel de calcul assez puissant avec des paramètres de convergence (Cut-off d'énergie élevé et grille dense de point k dans la première zone de Brillouin).

Afin d'étudier les propriétés dynamiques du composé GaN, on a calculé le tenseur diélectrique $\epsilon(\infty)$, la charge effective de Born Z_B et les fréquences de vibrations ω_A et ω_O du GaN dans la phase Zinc blende (B3).

Pour avoir de bons résultats, il faut donc choisir des paramètres élevés du Cut-off d'énergie E_{cut} et du nombre de points k ($ngkpt$) dans la première zone de Brillouin. Néanmoins, dans ce qui suit nos calculs ont été effectués avec des paramètres faibles ($E_{cut} = 90$ Hartree et 28 points k dans la zone de Brillouin). Les pseudopotentiels utilisés dans ces calculs sont ceux à norme conservée de Troullier et Martins [34] dans le cadre de l'approximation LDA.

III.7.2) Propriétés diélectriques

On définit la charge effective de Born comme étant la variation de polarisation dans une direction α provoquée par un déplacement d'un ion dans une direction β . La charge effective de Born est donc un tenseur d'ordre 2 représenté dans un système de coordonnées donné par une matrice 3×3 . Dans la pratique, elle se calcule par des méthodes ab initio ou par des modèles atomistiques [35]. La charge effective de Born se calcule suivant l'équation:

$$Z_{\alpha\beta}^* = \frac{\Omega \delta P_{\alpha}}{e \delta d_{\beta}} \quad (\text{III.4})$$

Où : Ω est le volume de la maille élémentaire du cristal.

e : est la charge de l'électron

P_{α} : Composante de la polarisation suivant la direction α

d_{β} : Composante du déplacement de l'ion considéré suivant la direction β .

Le tableau III.X résume les valeurs de la charge effective de Born Z_B et la constante diélectrique à haute fréquence $\varepsilon(\infty)$ du GaN à l'équilibre thermodynamique (conditions normales de pression et de température) comparés avec les autres travaux théoriques et expérimentaux.

| Structure | | Z^B | $\varepsilon(\infty)$ |
|------------------|-----------------------|-------------------|---|
| Zinc blende (B3) | Présent travail (LDA) | 2,58 | 5,28 |
| | Autres calculs | 2,65 ^a | 5,41 ^a 4,78 ^b |
| | Expérimentale | | 5,29 ^c 5,3 ^d 5,7 ^e 5,2 ^f |

^a [36], ^b [37], ^c [38], ^d [39], ^e [40], ^f [41]

Tableau III.3 Charge effective de Born Z^B et constante diélectrique à haute fréquence $\varepsilon(\infty)$ pour le GaN dans la phase zinc blende (B3) au volume d'équilibre.

On remarque du tableau III.3, que notre valeur de la charge effective de Born Z^B calculée dans le cadre de l'approximation LDA est proche de celle calculée théoriquement par Karch [36] avec un écart de 2,6 %. La valeur de la constante diélectrique $\epsilon(\infty)$ calculée dans le cadre de l'approximation LDA est en bon accord avec les valeurs expérimentales rapportées par Azuhata [38], Giehler [39] et Ejder [41], Elle est supérieure (inférieure) par rapport aux valeurs théoriques rapportées par Christensen [37] et Karch [36] respectivement.

III.7.3) Propriétés vibrationnelles

Les fréquences de vibration aux points de haute symétrie Γ , X et L du composé GaN dans la phase zinc blende (B3) sont calculées à l'équilibre thermodynamique, et présentées dans le tableau III-4.

| Points de haute symétrie | Mode de phonon | Ce travail (LDA) $\omega(cm^{-1})$ | Autres | |
|--------------------------|----------------|---------------------------------------|-------------------------------------|------------------|
| | | | Autres | Expt. |
| Γ | TO | 506,2 | 562 ^a , 553 ^b | 555 ^c |
| | LO | 702,7 | 748 ^a , 739 ^b | 742 ^c |
| X | TA | 205,3 | 207 ^a | — |
| | LA | 329 | 286 ^a | — |
| | TO | 546,4 | 558 ^a | — |
| | LO | 631 | 639 ^a | — |
| L | TA | 158,4 | 140 ^a | — |
| | LA | 316,3 | 296 ^a | — |
| | TO | 509,8 | 554 ^a | — |
| | LO | 646,7 | 675 ^a | — |

^a Ref. [42], ^b Ref. [43] Ref[45]

Tableau III.4 Fréquences des phonons du composé GaN (phase B3) calculés aux points de haute symétrie Γ , X et L (les unités sont en cm^{-1})

Pour la phase zinc blende (B3) , la maille élémentaire du GaN contient 2 atomes (1 atome de Gallium et un atome d'azote) et donc on aura six modes de vibrations des phonons (2×3), c'est à dire trois modes acoustiques et trois modes optiques. Les modes optiques sont formés d'un mode transversal doublement dégénéré TO et un mode longitudinal LO.

Au point Γ centre de la zone de Brillouin, les fréquences de vibration acoustiques (ω_{TA} , ω_{LA}) sont presque nuls car la règle de la sommation acoustique en ce point est vérifiée $\sum_S^B Z_S = 0$.

Pour le GaN dans la phase Zinc blende et aux points de haute symétrie $\Gamma(0,0,0)$, $X(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ et $L(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, les fréquences de vibration acoustiques et optiques ne sont pas en accord avec celles calculées par Jian et al [42]. Nous croyons que l'écart entre nos valeurs de fréquences de vibrations acoustiques et optiques de GaN et celles obtenues par Jian Zi et al [42] est dû d'une part à nos paramètres de convergence qui sont faibles (28 points k et 90 Hartree) et d'autre part à la différence entre notre méthode de calcul (DFPT) et la méthode utilisée par Jian Ziet al [42] qui a utilisé un modèle purement théorique.

Références

Références

- [1] M. Segall, M. Probert, C. Pickard, P. Hasnip, S. Clark, K. Refson and M. Payne, CASTEP Ab-initio Total Energy program (2004).
- [2] ABINIT: first-principles approach to material and nanosystem properties, Computer Physics Communications 180, 2582-2615 (2009). Site web www.abinit.org
- [3] K. Karch, J. M. Wagner and F. Bechstedt, Physical review B, Vol 57, Number 12, March 1998, pages 7043-7049.
- [4] C. Djimli, Etude par simulation des phénomènes de polarisation et des contacts ohmiques dans les transistors de base GaN, thèse de Magister, université de Constantine, 2005.
- [5] K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," J. Appl. Crystallogr., **44**, 1272-1276 (2011).
- [6] W. Setyawan, S. Curtarolo, Computational material Science 49 (2010) 299-312
- [7] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45 (1989) 566-569
- [8] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865-3868
- [9] F. Birch, « Finite elastic strains of cubic crystals », Physical Review, vol. 71, 1947, p. 809
- [10] T. Lei, M. Faneulli, R. J. Molnar, T. D. Moustakas, R. . Graha, and J. Scandon, Appl. Phys. Lett. **59**, 944 (1991).
- [11] H. P. Maruska and J. J. Tietjen, Appl. Phys. Lett. **15**, 327 (1969).
- [12] K. Miwa and A. Fukumoto, Phys. Rev. B **48**, 7897 (1993).
- [13] P. E. Van Camp, V. E. Van Doren, and J. T. Devreese, Solid State Commun. **81**, 23 (1992).

Références

- [14] K. Kim, W. L. Lambrecht, and B. Segall, *Phys. Rev. B* **53**, 16310 (1996).
- [15] P.E.VAN CAMP, V.F. VAN DOREN, and J. T. DEVREESE, *Phys. Rev. B* **44**, 9056 (1991) .
- [16] S. Strite, J. Ruan, Z. Li, A. Salvador, H.Chen, D. J. Smith, W. J. Choyke, and H. Morkoc, *J. Vac. Sci. Technol.* **B 9**, 1924 (1991).
- [17] F. Brechstedt, Grossner, and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* **61**, 6720 (2000).
- [18] H. Schulz and K. H. Thiemann, *Solid State Commun.* **23**, 815 (1977).
- [19] A. U.Sheleg and V. A. Savastenko, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Neorg. Mater.* **15**, 1598 (1979).
- [20] M. E. Sherwin and T. J. Drummond, *J. Appl. Phys.* **69**, 8423 (1991).
- [21] B. Monemar, *Phys. Rev.* **B 10**, 676 (1974).
- [22] H. Landölt and R. Bornstein, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, (Springer-Verlag, Berlin, 1982), Vol. III, No. 17a and 22a.
- [23] S. berrah, H. ABID, A. boukortt, M. sehil, *Turk J. Phys.* **30**, 513-518 (2006).
- [24] Alan F. Wright and J. S. Nelson, *Phys. Rev. B* **50**, 2159 (1994).
- [25] WANG Huan You, XU Hui, ZHANG NingDan & ZHANG PengHua, *Sci China Ser G-Phys Mech Astron* vol. 51 | no. 8 | **1037-1045** (Aug. 2008).
- [26] W. L. Lambrecht and B. Segall, in *Wide Bandgap Semiconductors*, edited by T. D. Moustakas, J. I. Pankove, and Y. Hamakawa, *MRS Symposia Proceedings N° 242* material Research Society, Pittsurgh, 1992), p. 367.
- [27] I. Gorczyca and N. E. Christensen, *Solid State Commun.* **80**, 335 (1991).
- [28] Martin Magnuson, Maurizio Mattesini, Carina Höglund, Jens Birch, and Lars Hultman, *Phys. Rev. B* **81**, 085125 (2010).
- [29] S. Li,C. Ouyang, First principles study of wurtzite and zinc blende GaN: A comparison of the electronic and optical properties. *Phys. Lett. A.* 2005;336:145–151.

Références

- [30] C. Kittel, Physique de l'état solide, Cours et Problèmes, 7ème édition, éditions Dunod (1996).
- [31] L. Hedin, New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem, Phys. Rev. 139, A796-A823 (1965).
- [32] David Koller, Fabien Tran, and Peter Blaha, Merits and limits of the modified Becke-Johnson exchange potential, Physical Rev B **83**, 195134 (2011).
- [33] X. Gonze and C. Lee, Phys. Rev. B **55**, 10355 (1997)
- [34] N. Troullier and J. L. Martins, Phys. Rev. B **43**, 1993 (1991)
- [35] https://fr.wikipedia.org/wiki/Charge_effective_de_Born
- [36] K. Karch, J.-M. Wagner, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B , Vol **57**, Number 12, March 1998.
- [37] N. E. Christensen and I. Gorczyca, Phys. Rev. B **53**, 16310 (1996).
- [38] T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, and S. Nakamura, J. Phys.: Condens. Matter **7**, L129 (1995)
- [39] M. Giehler, M. Ramsteiner, O. Brandt, H. Yand and K. H. Ploog, Appl. Phys. Lett. **67**, 733 (1995).
- [40] P. Perlin, C. Jauberthie-Carillon, J. P. Itie, A. San Miguel, I. Grzegory, and A. Polian, Phys. Rev. B **45**, 83 (1992).
- [41] E. Ejder, Phys. Status Solidi A **5**, 445 (1971).
- [42] Jian Zi et al, J. Phys. Condens. Matter **8** (1996) 6323-6328.
- [43] Sadao. Adachi, Properties of semiconductor alloys, Group-IV, III-V and II-VI semiconductors, Wiley Series (2009) , page 101.
- [44] H. P. Maruska and J. J. Tietjen, J. Appl. Phys. Lett. **15**, 327 (1969).
- [45] Siegle H, Ecqey L. Hoffman A ,Thomson C , Meyer B K , Schikora D , Hankeln M and Lischka K 1995 Solid State Commun. **96** 943-9

Conclusion générale

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons présenté une étude ab-initio des propriétés structurales, électroniques et dynamiques des semi-conducteurs type III-V et particulièrement le nitrure de Gallium (GaN) en se basant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et l'approche des pseudopotentiels à ondes planes comme sont implémentées dans le code CASTEP.

D'après les résultats de calcul que nous avons obtenus, on déduit ce qui suit :

- Les paramètres structuraux a_0 (zinc blende), c , $\frac{c}{a}$ et le paramètre interne u (wurtzite) calculés dans le cadre des approximations LDA et GGA sont en bon accord avec ceux calculés théoriquement ou expérimentalement.
- Les valeurs du paramètre de maille de GaN dans les deux phases calculées par la LDA(GGA) sont inférieures (supérieures) par rapport aux valeurs du paramètre de maille expérimentales. Ce qui est en accord avec la tendance générale de ces approximations.
- Les valeurs du module de compressibilité (Bulk moduli) calculées par la LDA (GGA) sont surestimées (sous-estimées) par rapport aux valeurs expérimentales à cause de la proportionnalité inverse entre le volume de la maille et le module de compressibilité.
- Dans les conditions normales de pression et de température, la phase la plus probable dans laquelle le GaN se cristallise est la phase Wurtzite.
- Nos calculs de la structure des bandes d'énergie du composé GaN dans le cadre des approximations LDA et GGA montrent que le nitrure de Gallium est un semiconducteur à gap direct $E_g^{\Gamma-\Gamma}$: $\sim 1.5 - 1.91 \text{ eV}$ (Zinc blende) et $\sim 1.87 - 2.08 \text{ eV}$ (Wurtzite).
- Les valeurs du gap électronique $E_g^{\Gamma-\Gamma}$ calculées dans le cadre des approximations LDA et GGA sont proches aux valeurs théoriques rapportés par d'autres auteurs et inférieures par rapport aux gaps expérimentaux.

Conclusion générale

- La charge effective de Born Z_B et le tenseur diélectrique à haute fréquence $\epsilon(\infty)$ et les fréquences des phonons (ω_A, ω_O) sont calculés à l'aide du code ABINIT dans le cadre de la théorie DFPT (Density functional perturbation theory).
- Les fréquences de vibration acoustiques et optiques calculées aux points Γ, X et L ne sont pas en bon accord avec celles présentes dans la littérature.

Enfin, et d'après notre étude du composé GaN à l'aide des codes de calcul CASTEP et ABINIT, on peut faire des calculs sur diverses propriétés et pour n'importe quel matériau (semiconducteur, isolant, métal, alliage,..). Néanmoins, certains calculs demandent beaucoup de mémoire (comme les propriétés vibrationnelles à titre d'exemple), ce qui exige un matériel de calcul puissant surtout pour les composés ayant un grand nombre d'atomes et à savoir la propriété étudiée.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons fait une étude ab-initio des propriétés structurales, électroniques et dynamiques des semiconducteurs type III-V et particulièrement le nitrure de Gallium (GaN) dans les phases Zinc blende et/ou wurtzite. Nos calculs ont été faits dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) à l'aide des codes CASTEP et ABINIT qui sont basés sur les pseudopotentiels et les ondes planes.

Nos résultats présentent un bon accord avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux pour les propriétés structurales et électroniques, contrairement à ceux relatifs aux propriétés vibrationnelles du GaN.

Mots Clés : DFT, Nitrure de Gallium, Ondes planes, pseudopotentiels, CASTEP, ABINIT, DFPT.

Abstract :

In This work, we have done an ab-initio study to the structural, electronic and dynamical properties of semiconductors type III-V and particularly Gallium Nitride in two phases Zinc blende and/or Wurtzite. Our Calculation have been done in the framework of density functional theory (DFT) using CASTEP and ABINIT codes which are based on pseudopotentials and plane waves.

Our results show a good agreement with other theoretical and experimental results for structural and electronic properties, contrary to those related to vibrational properties of GaN.

Key Words: DFT, Gallium nitride, Plane waves, pseudopotentials, CASTEP, ABINIT, DFPT

ملخص :

في هذا العمل، قمنا بإجراء دراسة للخصائص الهيكلية (البنوية) والإلكترونية والديناميكية لأشياء النواقل من النوع III-V وعلى وجه الخصوص نتريد الغاليوم GaN في طور مزيج الزنك و / أو الزنك. تم إجراء حساباتنا في إطار نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) باستخدام برامج CASTEP و ABINIT والتي تستند إلى الكمونات الكاذبة والأمواج المستوية. تتوافق نتائجنا بشكل جيد مع النتائج النظرية والتجريبية الأخرى للخصائص الهيكلية والإلكترونية، على عكس تلك المتعلقة بالخصائص الاهتزازية لـ GaN.

كلمات مفتاحية:

نظرية الكثافة الوظيفية، نتريد الغاليوم ، الأمواج المستوية، الكمونات الكاذبة، نظرية الكثافة الوظيفية المضطربة ، ABINIT، CASTEP.