



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي



جامعة عمار ثليجي - الأغواط

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE AMAR TELIDJI, LAGHOUAT

كلية العلوم
Faculté des Sciences
Département : Sciences de la matière

Mémoire de Master

Domaine : Sciences de la matière
Filière : Physique
Option : Physique Appliquée

Présenté par :
Rayane Mohamed Ali

THEME

Étude des propriétés électroniques, optiques et élastiques du composé binaire de type III-V et leur alliage.

Soutenu publiquement devant le jury composé de :

Mr	DAHAME Tahar	Président	MCA	Université de Laghouat
Mr	BENGHIA Ali	Examineur	MCA	Université de Laghouat
Mlle	ELHAMRA Fatima	Encadrante	MCB	Université de Laghouat

Année Universitaire/.....

Remerciements

Qu'Allah accepte mes remerciements, car avec sa grâce que je visces moments heureux aujourd'hui, Elhamdoulillah.

Je remercie infiniment, mon encadreur mademoiselle, **EL HAMRA FATIMA** de m'avoir donné l'occasion de m'exprimer scientifiquement à travers ce thème de recherche, de son encouragement consécutif durant sa réalisation jusqu'à son achèvement.

Également, je tiens à remercier tous mes enseignants du primaire jusqu'à l'université, sans eux je n'aurais pas eu cette belle occasion dans ma vie.

Les membres de jurés, président de juré et monsieur l'examineur

Tous mes collègues qui m'ont aidé de près ou de loin, trouvent icimes meilleures salutations.

Tous mes proches et tout membre de ma famille, ma mère, mon père, mes sœurs et mon frère Hadj Aïssa, Rokaya, et mon cousin Nasro je les salue infiniment.

Rayane Mohamed Ali

Table des matières

Tableau	Titre	Page
	Remerciements	
	Abréviations -----	i
	Liste des tableaux -----	iv
	Liste des figures -----	vi
	Introduction générale -----	1
	Références -----	3
Chapitre I : Généralités sur l'arséniure de gallium		
	I.1.Introduction -----	6
	I.2.Classification des matériaux -----	6
	I.3.Propriétés des matériaux III-V -----	7
	I.3.1. Propriétés structurales -----	7
	I.3.2. Propriétés électronique -----	8
	I.4. Les avantages des semi-conducteurs III-V -----	9
	I.5. Application de GaAs -----	10
	I.6. L'alliage $Al_xGa_{1-x}As$: Structure et propriétés physiques -----	10
	I.6.1. Structure de bande du $Al_xGa_{1-x}As$ -----	11
	I.7. Conclusion -----	12
	Références -----	14

Chapitre II : Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT)	
II.1. Introduction	16
II.2. L'équation de Schrödinger	16
II.3. Approximations fondamentales	17
II.3.1. Approximation de Born-Oppenheimer (adiabatique)	17
II.3.2. Approximation de Hartree	18
II.4. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	19
II.4.1. Théorèmes de Hohenberg-Kohn	19
II.4.2. Equations de Kohn et Sham	20
II.5. Les approximations d'échange-corrélation	21
II.5.1. Approximation de la densité locale LDA	21
II.5.2. Approximation du Gradient Généralisé (GGA)	21
II.6. Résolution des équations de Kohn et Sham	22
II.7. Méthode de pseudo-potentiel	23
II.7. 1. Types de pseudo-potentiels	23
II.7.1.1. Pseudo-potentiel à norme conservée	23
II.7.1.2. Pseudopotentiel ultra-doux (USPP)	24
II.8. Méthode des ondes planes (PW)	24
II.8.1. Théorème de Bloch	24
II.8.2. L'énergie cinétique de coupure	25
II.8.3. Echantillonnage de la première zone de Brillouin	25
II.9. Description du code CASTEP	26
II.10. Conclusion	26
Chapitre III : Résultats et discussions	
III.1. Introduction	31
III.2. Détails de calculs	31

III.3. Propriétés structurales -----	33
III.4. Propriétés électroniques -----	38
III.4.1. Structure de bande -----	38
III.4.2. Densité d'états électroniques -----	42
III.5. Propriétés optiques -----	44
III.6. Propriétés élastiques -----	47
III.7. Conclusion -----	51
Références -----	52
Conclusion Générale -----	54
Résumé	

Abréviations

Abréviations

Abréviations les plus couramment utilisées :

Symboles	Abréviations
➤ DFT	La théorie de la fonctionnelle de la densité.
➤ GGA	L'approximation gradient generalise
➤ E_{XC}	Energie d'échange-corrélation (Exchange-Correlation energy).
➤ LDA	Local Density Approximation
➤ LSDA	Local Spin Density Approximation
➤ PP	Pseudopotentiel (Pseudo-potential).
➤ PW	Onde plane (Plane Wave).
➤ P	La densité.
➤ CASTEP	Cambridge Serial Total Energy Pckage
➤ Ecut	Energie de coupure (Cutoff energy)
➤ Nkpt	Nombre de points d'échantillonnage de la première zone de Brillouin
➤ GaAs	Arséniure de gallium
➤ AlAs	Arséniure d'aluminium
➤ x	Concentration
➤ a	Paramètre de maille d'un cristal
➤ EOS	Equation d'état (Equation of state)
➤ BFGS	Broyden-Fletcher Goldfarb-Shanno
➤ B	Module de la compressibilité.
➤ B'	Dérivée par rapport à la pression du module de compressibilité.
➤ V	Volume.
➤ E_g	Bande interdite (Energy band gap)
➤ DOS	Densité d'états
➤ PDOS	Densité d'état partiel
➤ $\epsilon(\omega)$	Fonction diélectrique
➤ $\epsilon_2(\omega)$	Partie imaginaire de la fonction diélectrique
➤ $\epsilon_1(\omega)$	Partie réelle de la fonction diélectrique.
➤ α	Coefficient d'absorption.

Symboles	Abréviations
➤ n	Indice de réfraction.
➤ C_{ij}	Constantes élastiques
➤ G	Module de cisaillement (Shear modulus).
➤ E	Module de Young (Young Modulus)
➤ σ	Coefficient de Poisson (Poisson coefficient)
➤ B/G	Rapport entre le module de compression et le module de cisaillement
➤ A	Facteur d'anisotropie Zener

Liste des tableaux

Liste des tableaux

Tableau	Titre	Page
Chapitre I : Généralités sur l'arséniure de gallium		
Tableau I.1	Extrait de la classification périodique des éléments	7
Tableau I.2	Propriétés du GaAs à température ambiante (300 K)[4]	8
Tableau I.3	Gaps direct pour GaAs dans la phase zinc blende, en comparaison avec d'autres valeurs théoriques et expérimentales disponibles	9
Tableau I.4	Contient de nombreuses propriétés du composé GaAs[10]	9
Tableau I.5	Propriétés physiques de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ [12]	10
Chapitre III : Résultats et discussions Densité		
Tableau III.1	Le paramètre de maille de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration (x) comparés à d'autres résultats expérimentaux et théoriques	37
Tableau III.2	Le module de compression (B) et sa dérivée (B') en fonction de la concentration (x) l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ comparés à d'autres résultats expérimentaux et théoriques.	37
Tableau III.3	Gaps énergétiques de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ calculés par GGA, et comparés à d'autres valeurs théoriques	41
Tableau III.4	Les constants élastiques (C_{ij} en GPa) de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ comparés à d'autres résultats expérimentaux et théoriques	48
Tableau III.5	Le module de compression (B), le module de cisaillement (G), le module de Young (E), le coefficient de poisson (σ), le B/G et le facteur d'anisotropie A de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en comparaison avec des autres résultats théoriques et expérimentaux disponibles	49

Liste des Figures

Liste des figures

Figure	Titre	Page
Chapitre I : Généralités sur l'arséniure de gallium		
Figure I.1	Classification des matériaux	6
Figure I. 2	Maille conventionnelle de la phase B3(zincblende) de GaAs	8
Figure I. 3	Maille primitive de la phase B3(zincblende) de GaAs	8
Figure I.4	Structure de bande de GaAs : a) calcul k·p sur l'ensemble de la zone de Brillouin, b) approximation parabolique au voisinage de $\vec{k} = \vec{0}$ en $\Gamma[1, 2]$	8
Figure I.5	Schéma de la structure ordonnée du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [3]	10
Figure I.6	Structure de bande d'énergie de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ à $x = 0.6$ [4]	11
Figure I.7	Le coefficient d'absorption de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la fraction molaire	12
Chapitre II : Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT)		
Figure II.1	Le cycle auto-cohérent de la résolution des équations de KS et DFT	22
Figure II.2	Trace d'un pseudopotentiel et d'une pseudo-fonction d'onde par rapport au potentiel et a la fonction d'onde exacte	24
Chapitre III : Résultats et discussions Densité		
Figure III.1	Teste de convergence de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure (cut_{off} energy)	32
Figure III.2	Teste de convergence de l'énergie totale en fonction de nombre des points spéciaux	32
Figure III. 3	Structures cristallographiques de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ (a) $x=0$, (b) $x=0,75$	33
Figure III.4	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans la phase zinc blende pour $x=0$	34
Figure III.5	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans la phase zinc blende pour $x=0.25$	35
Figure III.6	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans la phase zinc blende pour $x=0.75$	35
Figure III.7	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans la phase zinc blende pour $x=1$	36

Figure III.8	Variation du paramètre de maille (a) de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al	36
Figure III.9	Structure de bandes de l'alliage de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ pour $x=0$	38
Figure III.10	Structure de bandes de l'alliage de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ pour $x=0,25$	39
Figure III.11	Structure de bandes de l'alliage de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ pour $x=0.75$	39
Figure III.12	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ dans la phase zinc blende pour $x=1$	40
Figure III.13	Variation de gap énergétique en fonction du volume de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$	40
Figure III.14	Densité d'états partielle (PDOS) de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ dans la phase zinc blende pour $x=0$	42
Figure III.15	Densité d'états partielle (PDOS) de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ dans la phase zinc blende pour $x=0.75$	43
Figure III.16	La partie imaginaire de la fonction diélectrique de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al	44
Figure III.17	La partie réelle de la fonction diélectrique de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al	45
Figure III.18	L'indice de réfraction de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al	46
Figure III.19	Le coefficient d'absorption de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al	47

Introduction Générale

Introduction générale

Les semiconducteurs III-V ont d'excellentes propriétés électroniques et optiques, et ils comprennent ainsi une large gamme de choix de paramètre de maille adapté qui permet au développement de nouveaux dispositifs en tant compte de la largeur de bande interdite [1]. L'arsenic de gallium (GaAs) est un semi-conducteur appartenant à la famille des composés III-V. Le GaAs est un gap direct [2], est très adapté pour les applications optoélectroniques. Les éléments du groupe III-V peuvent être mixé à d'autre atomes pour adapter la largeur de la bande interdite afin d'aboutir à des propriétés optiques et électroniques souhaités [1]. Parmi l'alliage III-V les plus étudiés, notre choix s'est porté sur les binaires GaAs et AlAs qui peuvent former l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$.

Objectif du mémoire

L'objectif de cette étude est la contribution à la détermination des propriétés structurales (le paramètre du réseau et le module de compression), électroniques (énergie du gap et la densité d'états électronique partielle), optiques (la constante diélectrique, l'indice de réfraction...) et élastiques (les constantes élastique (C_{11} , C_{12} et C_{44}), le module de compression (B), le module cisaillement (G), le module de Young (E) et le coefficient de Poisson (σ)) de l'alliage ternaire $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al. Dans cette étude, on s'intéresse à l'étude des propriétés physiques de ce composé, en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) se basant sur la méthode du pseudo-potentiel et ondes planes (PP-PW)[3] implémentée dans le code CASTEP [4, 5].

Structuration du mémoire

Dans ce mémoire, nous étalerons notre travail de recherche sur trois chapitres

- ☐ Dans le premier chapitre seront présentés les propriétés générales des systèmes que nous étudierons. Nous présenterons, également, les propriétés physiques spécifiques aux matériaux étudiés.
- ☐ Dans le deuxième chapitre sera détaillée la méthode d'approximation DFT (Density Functional Theory) utilisée pour calculer les propriétés physiques.
- ☐ Dans le troisième chapitre, seront présentés les détails des résultats des calculs que nous avons menés concernant les propriétés structurales, électroniques optiques et

élastiques de l'alliage ternaire $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Les résultats obtenus seront discutés et comparés avec les résultats expérimentaux et avec d'autres modèles théoriques disponibles dans la littérature.

Notre mémoire sera clôturé par une conclusion générale.

Références

- [1] O. Mimouna, "Etude ab-initio des paramètres de courbure de alliages III-V GaAs (N) appliqués pour dispositifs optoélectroniques," université djilali liabes, 2017.
- [2] S. Adachi, *J. Appl. Phys.*, vol. 53, p. 8775, 1982.
- [3] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. Arias, and a. J. Joannopoulos, "Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients," *Reviews of modern physics*, vol. 64, no. 4, p. 1045, 1992.
- [4] M. Segall *et al.*, "First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code," *Journal of physics: condensed matter*, vol. 14, no. 11, p. 2717, 2002.
- [5] S. J. Clark *et al.*, "First principles methods using CASTEP," *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, vol. 220, no. 5-6, pp. 567-570, 2005.

Chapitre I

Généralités sur l'arséniure de gallium

Chapitre I

Généralités sur l'arséniure de gallium

I.1.Introduction

I.2.Classification des matériaux

I.3.Propriétés des matériaux III-V

I.3.1. Propriétés structurales

I.3.2. Propriétés électriques

I.4. Les avantages des semi-conducteurs III-V I.5. Application de GaAs

I.6. L'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Structure et propriétés physiques

I.6.1. Structure de bande du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

I.7. Conclusion

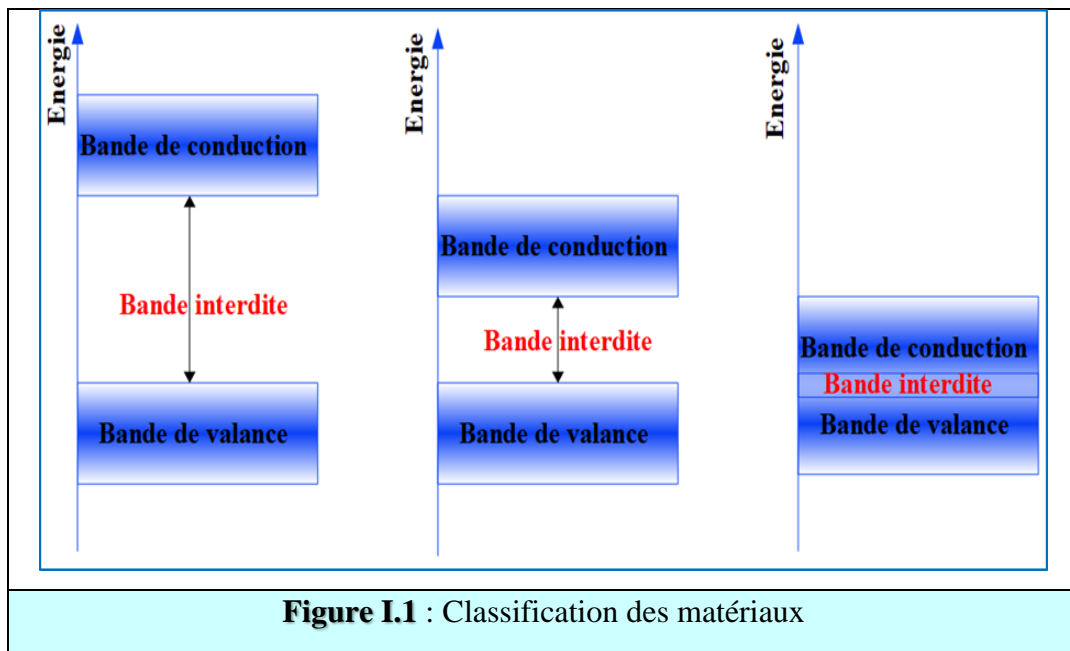
Références

I.1.Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les propriétés générales (propriétés structurales, électroniques et optiquesetc) et leurs application.

I.2.Classification des matériaux

Les matériaux solides peuvent être classés selon la conductivité électrique en trois groupes : les isolants, les semiconducteurs et les conducteurs.



À l'aide de la figure (I.1), les matériaux solides peuvent être classés en trois groupes qui sont : les isolants, les semiconducteurs et les métaux:

- ➡ **Les isolants** : Les isolants ou diélectriques sont des matériaux ayant une résistivité très élevée. la bande de conduction supérieure est totalement remplie, avec une bande interdite dont la largeur.
- ➡ **Les semiconducteurs** : Un semi-conducteur est intermédiaire entre un métal et un isolant. À $T=0$ K, il se comporte comme un isolant mais il conduit l'électricité dès que la température augmente. Sa conductivité augmente avec la température contrairement aux métaux.
- ➡ **Les conducteurs** : l'interpénétration des bandes de valence et de conduction implique qu'il n'existe pas de gap. La bande de conduction est alors partiellement pleine et ainsi la conduction du matériau est « élevée ».

I.3. Propriétés des matériaux III-V

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes IIIB et VB de la classification périodique des éléments. Le tableau I-1 contient un extrait des éléments chimiques avec mention:

- ☐ Le nombre atomique
- ☐ La masse atomique

Tableau I.1 : Extrait de la classification périodique des éléments

IIb	IVb	Vb
5 B (Boron) 10.81	6 C (Carbon) 12.011	7 N (Nitrogen) 14.007
13 Al (Aluminium) 26.982	14 Si (Silicon) 28.085	15 P (Phosphorus) 30.974
31 Ga (Gallium) 69.723	32 Ge (Germanium) 72.630	33 As (Arsenic) 74.922
49 In (Indium) 114.82	50 Sn (Etain) 118.71	51 Sb (Antimony) 121.76

Dont la somme d'électrons des deux matériaux sur la bande de valence est égale à huit, par exemple : les composé à base aluminium (AlP, AlAs, AlSb), ou les composés à base gallium (GaAs, GaSb).

Dans cette section, nous nous intéressons à l'étude des propriétés du composé GaAs.

I.3.1. Propriétés structurales

Le GaAs a d'abord été créé par la société Goldschmidt en 1929, mais les premières propriétés électroniques de ce semi-conducteur ne furent démontrées qu'en 1952 [1]. Le composé GaAs se cristallise aux conditions ambiantes dans la structure du zinc blende [phase B3 ; groupe de symétrie F_{34m} (# 216)]. Les atomes ayant les positions suivantes:

- ☐ Ga : (0,0,0)
- ☐ As : (1/4, 1/4, 1/4)

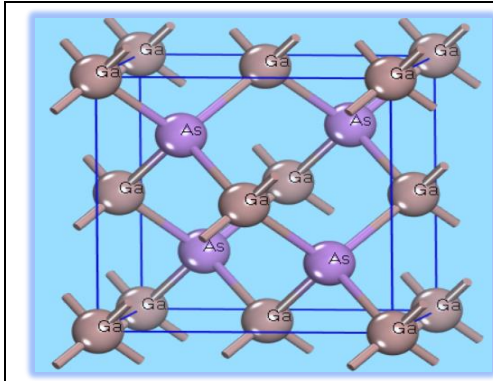


Figure I. 2: Maille conventionnelle de la phase B3(zincblende) de GaAs.

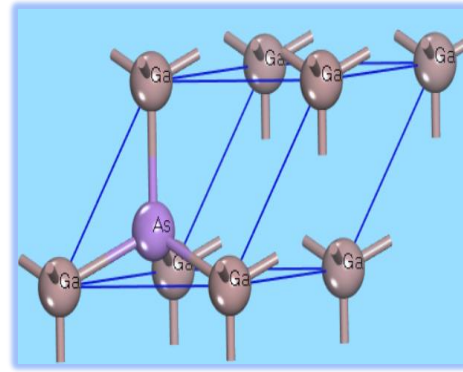


Figure I. 3: Maille primitive de la phase B3(zincblende) de GaAs.

Le tableau (I.2) dresse une liste de certaines propriétés structurales du GaAs.

Tableau I.2 : Propriétés du GaAs à température ambiante (300 K)[2].

Propriété	Valeur
Structure cristalline	Zinc blende
Paramètre de maille	5.65 Å
Densité	5.32 g/cm ³
Densité atomique	4.5 × 10 ²² atomes/cm ³
Masse molaire	144.64 g

I.3.2. Propriétés électroniques

Le composé GaAs est un semi-conducteur à gap direct, où le maximum de la bande de valence (BV) et le minimum de la bande de conduction (BC) se trouvent au même point c'est à dire ayant le même vecteur d'onde \vec{k} dans la zone de Brillouin. Le gap direct favorise les phénomènes de recombinaisons des porteurs par émission de photons et donc il est à la base de l'intérêt de ces matériaux pour l'optoélectronique.

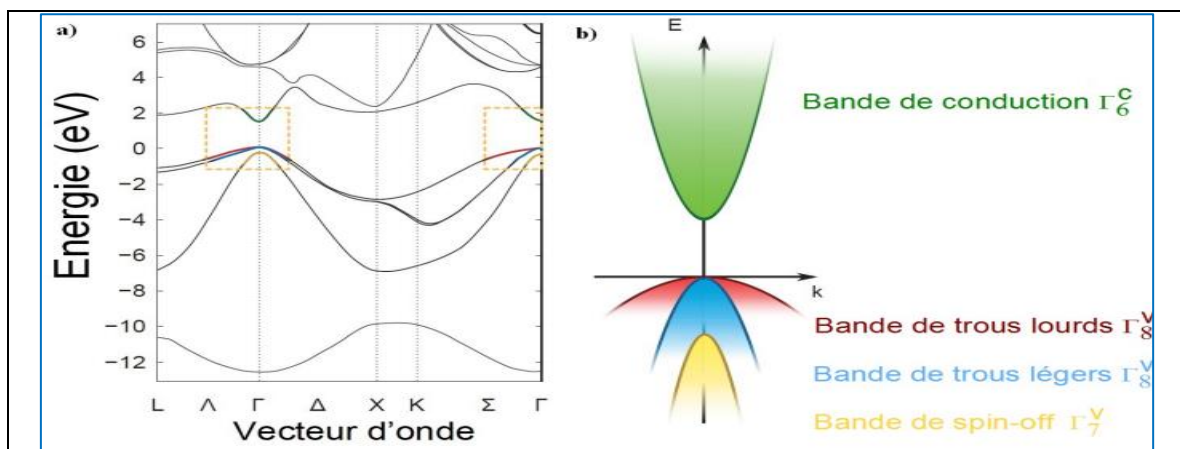


Figure I.4 : Structure de bande de GaAs : a) calcul $k \cdot p$ sur l'ensemble de la zone de Brillouin, b) approximation parabolique au voisinage de $\vec{k} = \vec{0}$ en $\Gamma[3, 4]$.

Tableau I.3 : Gap direct pour GaAs dans la phase zinc blende, en comparaison avec d'autres valeurs théoriques et expérimentales disponibles.

Energie de Gap direct	
E_g (eV) (théo) [5]	1,419
E_g (eV) (exp) [6]	1,42
E_g (eV) (exp) [7]	1,42

Le tableau I,4 présente quelque propriété de GaAs

Tableau I.4 : Contient de nombreuses propriétés du composé GaAs[8]

Propriétés	Valeur
Densité (g.cm^{-3})	$\rho = 5.36$
Mobilité électronique ($\text{cm}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$)	$\mu_n = 8800$
Mobilité des trous ($\text{cm}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$)	$\mu_p = 400$
Conductivité thermique ($\text{W.cm}^{-1}.\text{C}^{-1}$)	$K = 0.46$
Coefficient de dilatation thermique ($\times 10^{-6}\text{C}^{-1}$)	$\alpha_{th} = 6.4$
Permittivité relative	$\epsilon_r = 13.18$

I.4. Les avantages des semi-conducteurs III-V

Les principaux avantages de GaAs sont les suivants:

- ☐ Il possède une plus grande vitesse de saturation des électrons, et ceux-ci ont une mobilité plus grande, ce qui lui permet de fonctionner à des fréquences supérieures à 250 GHz [2];
- ☐ Les dispositifs à technologie GaAs génèrent moins de bruit en hautes fréquences que ceux à base de silicium [2] ;
- ☐ Ils peuvent de même fonctionner à puissance plus élevée, du fait d'une tension de claquage plus élevée [2].
- ☐ Il possède un gap direct, ce qui lui confère des propriétés d'opto-électronique supérieures[2]
- ☐ l'avantage du GaAs par rapport au Si est la mobilité élevée des électrons (6 fois plus grande)

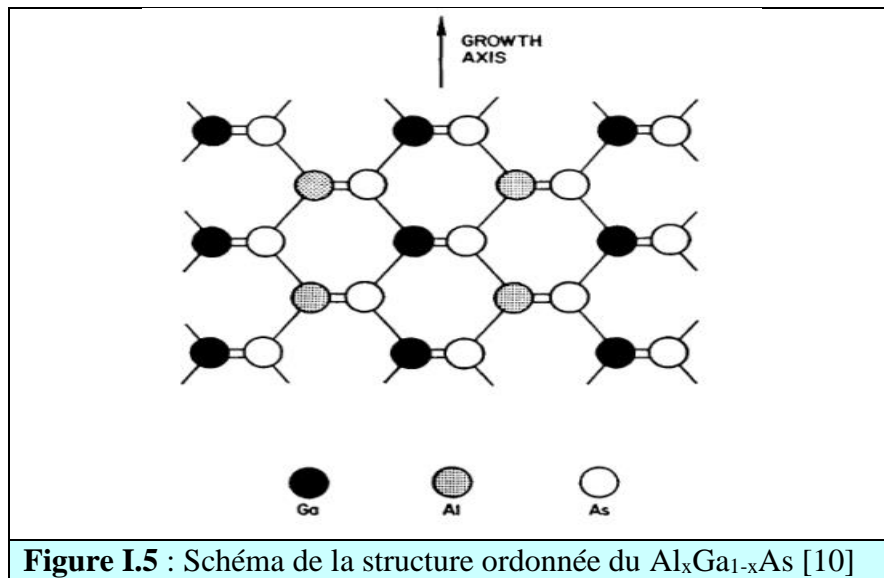
I.5. Application de GaAs

Le composé est l'un des matériaux qui a de nombreuses applications dans divers domaines car il contient des propriétés importantes. Nous résumons ses applications dans les points suivants :

- ☐ Utilisations des transistors
- ☐ Cellules solaires et détecteurs
- ☐ Dispositifs à émission de lumière

I.6. L'alliage $Al_xGa_{1-x}As$: Structure et propriétés physiques

$Al_xGa_{1-x}As$ est un alliage de deux composés binaires GaAs et AlAs. Il est obtenu en substituant de l'aluminium au gallium dans l'arséniure de gallium [9]. Les paramètres physiques du GaAs et de AlAs sont voisins et se rejoignent pour une température de 900 °C environ [10]. $Al_xGa_{1-x}As$ se cristallise aussi dans la structure Zinc blende, deux sous-réseaux à faces centrées déplacé l'un par rapport à l'autre d'un quart de la grande diagonale.



Les propriétés physiques de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ sont obtenues par interpolation linéaire en utilisant celles de GaAs et AlAs. Par exemple, le paramètre de maille (constante du réseau cristallin) de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ peut se déduire par interpolation linéaire en utilisant les paramètres de maille de GaAs et de AlAs. Il est donné par la loi de Vegard:

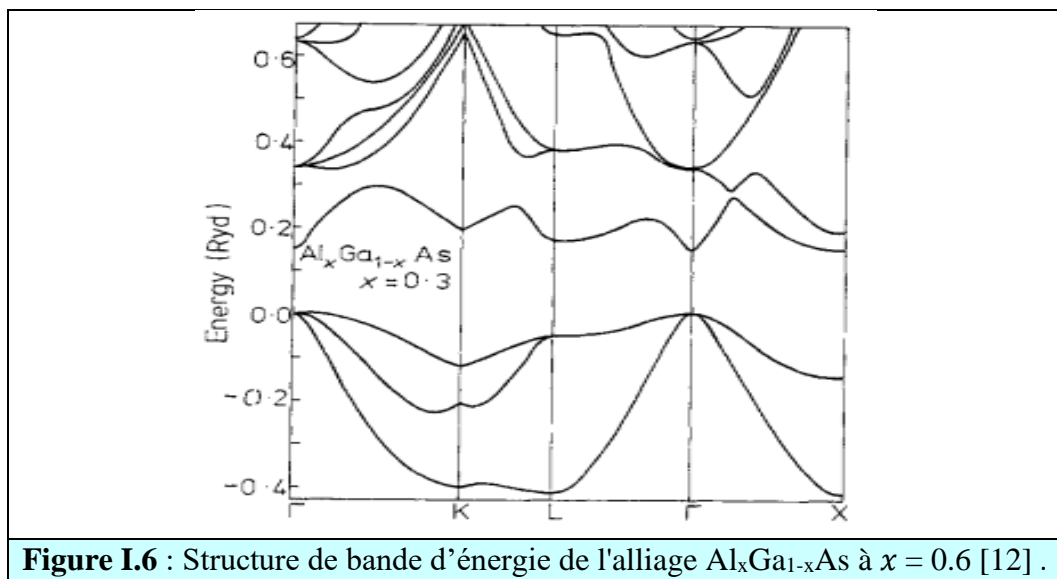
$$a(Al_xGa_{1-x}As) = x \cdot a(AlAs) + (1 - x) \cdot a(GaAs) - (1 - x) \cdot x \cdot b$$

Ou :

- α : étant une propriété physique quelconque.
- x : fraction moléculaire (la concentration).
- b : est le paramètre de courbure (bowing)

I.6.1. Structure de bande du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Le système d'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est intéressant que ce soit d'un point de vue fondamental ou application. Ce matériau est un modèle des systèmes d'alliages aléatoires. Il est potentiellement d'une grande importance pour de nombreux appareils électroniques et optoélectroniques de haute vitesse [10]- [11].



I.6.2 Propriétés optoélectroniques du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Le coefficient d'absorption en fonction de la composition x est représenté sur la figure I.7. L'influence des transitions interbandes indirectes sur le coefficient d'absorption est sensible à partir d'une composition en aluminium supérieure à $x = 0.6$ [13].

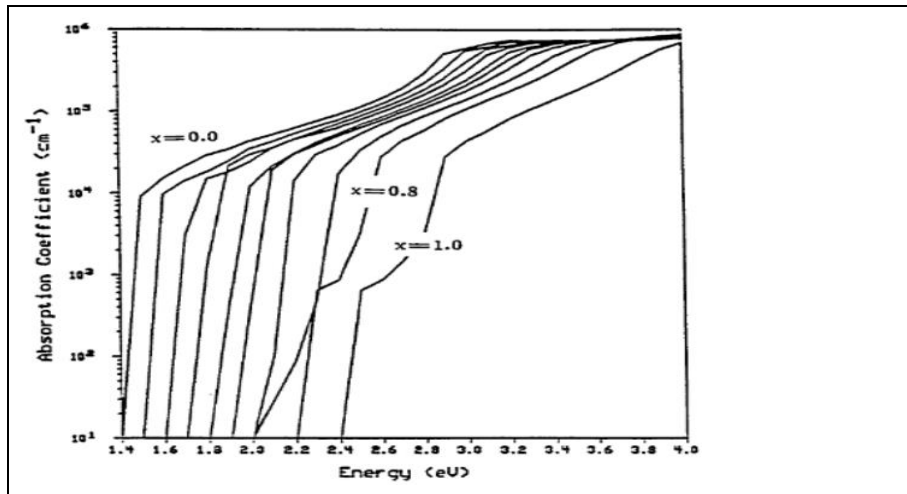


Figure I.7 : Le coefficient d'absorption de $Al_xGa_{1-x}As$ en fonction de la fraction molaire

Quelques propriétés physiques de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ sont résumées dans le tableau I.5.

Tableau I.5 : Propriétés physiques de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ [10] .

Propriétés	Valeur
Constante de maille $a(\text{Å})$	$5.6533 + 0.0078x$
Densité ($g \cdot cm^{-3}$)	$5.360 - 1.6x$
Largeur de la bande interdite E_g (eV)	$1.424 - 1.247x$ $0 \leq x \leq 0.45$ $1.900 + 0.125x + 0.143x^2$ $0.45 \leq x \leq 1$
Mobilité électronique μ_n ($cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$)	$8 \times 10^3 - 2.2 \times 10^4x + 10^4x^2$ $0 \leq x \leq 0.45$ $-255 + 1160x - 720x^2$ $0.45 \leq x \leq 1$
Mobilité des trous μ_p ($cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$)	$370 + 970x + 740x^2$
Conductivité thermique ($W \cdot cm^{-1} \cdot C^{-1}$)	$K = 0.46$
Coefficient de dilatation thermique B_{Th} ($\times 10^{-50} C^{-1}$)	$6.4 - 1.2$
Constante diélectrique ϵ_r	$13.18 - 3.12x$
Mass effective des électrons m_n^* (\times)	$0.067 + 0.083x$ $0 \leq x \leq 0.45$ $0.85 - 0.14x$ $0.45 \leq x \leq 1$

I.7. Conclusion

L'arséniure de gallium est considéré comme un membre éminent du groupe des semi-conducteurs III-V. Il s'est présenté comme un matériau remarquable pour les dispositifs électroniques et est largement utilisé dans les dispositifs optoélectroniques et microélectroniques.

Références

- [1] H. Welker and Z. Naturforsch, vol. Vol. A, no. No. 7, p. p. 744, 1952.
- [2] [Online]. Available: NMS Archive : <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>.
- [3] M. Cardona, N. Christensen, and G. Fasol, "Relativistic band structure and spin-orbit splitting of zinc-blende-type semiconductors," *Physical Review B*, vol. 38, no. 3, p. 1806, 1988.
- [4] G. Signorello, *Uniaxial stress effects in zincblende and Wurtzite GaAs nanowires: an optical spectroscopy study*. Cuvillier Verlag, 2014.
- [5] N. Baghdadi, "Mémoire de Magister « Etude des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs III_V à base de gallium », ," Université de Tlemcen. , 2010.
- [6] S. Adachi, *J. Appl.Phys*, vol. 53, p. 8775, 1982.
- [7] S. Adachi, *J. Appl.Phy*, vol. 61, p. 804, 1978.
- [8] S. Khlifi, "Mémoire magistère, Modélisation d'une Cellule Solaire Ga_{1-x}Al_xAs(n)-GaAs(i)-GaAs(p)," Universitaire de Béchar, 2003.
- [9] K.Brennan and A.Brown, " Theory of Modern electronic semiconductor devices ", New York, 2002.
- [10] Sadao.Adachi, "Optical Constants of crystalline and Amorphous semiconductors Numerical Data and Graphical Information," Kluwer Academic Publishers, UAS, , 1999.
- [11] L. widad, "Simulation numérique d'effet de la couche fenêtre Al_xGa_{1-x}As sur la résistance aux irradiations spatiales d'une cellule solaire en arsenic de gallium (GaAs)," SCIENCES DE LA MATIERE, UNIVERSITÉ MOHAMED KHIDER, Biskra, 2015.
- [12] A. Baldereschi, K. Maschke, E. Hess, H. Neumann, K.-R. Schulze, and K. Unger, "Energy band structure of Al_xGa_{1-x}As," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 10, no. 23, p. 4709, 1977.
- [13] C.B.Honsberg, " Design and fabrication of thin lighth-trapped GaAs solar cells," PH.D thesis, Univercity of Delaware, 1992.

Chapitre II

Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT)

Chapitre II

Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT)

II.1. Introduction

II.2. L'équation de Schrödinger

II.3. Approximations fondamentales

II.3.1. Approximation de Born-Oppenheimer (adiabatique)

II.3.2. Approximation de Hartree

II.4. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

II.4.1. Théorèmes de Hohenberg-Kohn

II.4.2. Equations de Kohn et Sham

II.5. Les approximations d'échange-corrélation

II.5.1. Approximation de la densité locale LDA

II.5.2. Approximation du Gradient Généralisé (GGA)

II.6. Résolution des équations de Kohn et Sham

II.7. Méthode de pseudo-potential

II.7. 1. Types de pseudo-potentiels

II.8. Méthode des ondes planes (PW)

II.8.1. Théorème de Bloch

II.8.2. L'énergie cinétique de coupure

II.8.3. Echantillonnage de la première zone de Brillouin

II.9. Description du code CASTEP

II.10. Conclusion

II.1.Introduction

Nous présentons les méthodes de calculs théoriques basés sur la théorie de la DFT. On introduit aussi les notions d'approximation généralisée qui sont utiles ultérieurement et du code CASTEP utilisé pour les calculs.

II.2. L'équation de Schrödinger

La résolution l'équation de Schrödinger [1] permet de décrire les propriétés physicochimiques d'un système de particules. Elle s'écrit sous la forme :

$$\hat{H}\Psi(\{\vec{R}_I\}, \{\vec{r}_i\}) = E\Psi(\{\vec{R}_I\}, \{\vec{r}_i\}) \tag{II.1}$$

Ou :

- ☞ \hat{H} : L'operateur hamiltonien;
- ☞ $\Psi(\{\vec{R}_I\}, \{\vec{r}_i\}, t)$: La fonction d'onde de toutes les coordonnées nucléaires et électroniques en fonction du temps
- ☞ $\{\vec{R}_I\}$ et $\{\vec{r}_i\}$: les positions dans l'espace des noyaux et des électrons, respectivement.
- ☞ E : L'énergie totale du système.

L'opérateur H s'écrit sous cette forme :

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ne} + \hat{V}_{nn} \tag{II.2}$$

Ou :

Grandeur physique	Opérateur (unités atomiques)
L'énergie cinétique totale des électrons.	$T_e = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2$
L'énergie potentielle de l'interaction entre les électrons.	$V_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{ \vec{r}_i - \vec{r}_j }$
L'énergie cinétique totale des noyaux.	$T_n = \sum_{I=1}^n -\frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2$
L'énergie potentielle de l'interaction entre les noyaux.	$V_{nn} = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^n \sum_{I \neq J}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I Z_J}{ \vec{R}_I - \vec{R}_J }$
L'énergie potentielle de l'interaction entre les électrons et les noyaux.	$V_{en} = - \sum_{i=1}^N \sum_{I=1}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I}{ \vec{R}_I - \vec{r}_i }$

Où :

- ☞ \hbar : est la constante de Planck h divisée par 2π ;
- ☞ m : est la masse de l'électron ;
- ☞ r_{ij} : est la distance entre l'électron i et l'électron j ;
- ☞ M : est la masse du noyau ;
- ☞ R_{IJ} : est la distance entre les centres des noyaux I et J ;
- ☞ Z_I, Z_J : Les nombres atomiques des noyaux I et J .
- ☞ ∇ est le *laplacien* de l'^{ième} particule (électron ou noyau) défini de la manière suivante :

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial^2 x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial^2 z_i^2} \quad (\text{II.3})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$(\hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ne} + \hat{V}_{nn})\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \quad (\text{II.4})$$

Dans cette partie, toutes les équations sont écrites en unités atomiques (u.a.), c'est-à-dire avec: $\hbar, m, e = 1$, m étant la masse de l'électron et e la charge élémentaire (un électron a donc une charge égale à 1).

\hat{H} peut s'exprimer d'une façon simple :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{I=1}^n \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{I=1}^n \frac{Z_I}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{I=1}^n \sum_{I \neq J}^n \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II.5})$$

La résolution de l'équation (II.4), pour un système à plusieurs particules, est rendue impossible à cause des nombreuses interactions mises en jeu. Pour cela il faut faire des approximations.

II.3. Approximations fondamentales

II.3.1. Approximation de Born-Oppenheimer (adiabatique)

Les noyaux sont plus lourds que les électrons donc plus lents, on peut négliger le mouvement des noyaux par rapport à celui des électrons $T_n = 0$ et l'énergie potentielle noyaux-noyaux V_{nn} devient une constante. L'approximation de Born-Oppenheimer [2] consiste à découpler le mouvement des électrons de celui des noyaux. La fonction d'onde totale peut

alors s'écrire sous la forme d'un produit d'une fonction d'onde électronique $\Psi_e(\vec{r}, \vec{R})$ et d'une fonction d'onde nucléaire $\Psi_n(\vec{R})$:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi_e(\vec{r}, \vec{R}) \Psi_n(\vec{R}) \quad (\text{II. 6})$$

L'équation de Schrödinger aux électrons s'écrit sous la forme :

$$\hat{H}_e \Psi_e(\vec{r}, \vec{R}) = E_e \Psi_e(\vec{r}, \vec{R}) \quad (\text{II. 7})$$

L'hamiltonien électronique donné par :

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^N \sum_{I=1}^n \frac{Z_I}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II. 8})$$

L'énergie totale du système est donnée par :

$$E_{\text{sys}} = E_e + E_{\text{noy}} \quad (\text{II. 9})$$

La résolution de cette équation est toujours très difficilement réalisable à cause de la complexité des mouvements électroniques et des interactions qui la régissent, alors on fait appel à l'approximation de Hartree-Fock.

II.3.2. Approximation de Hartree

En 1928, Hartree [3] proposa une méthode pour résoudre l'équation de Schrödinger électronique (indépendante du temps) d'un système de N particules en interaction. La fonction d'onde totale s'écrit comme le produit des N fonctions d'onde de chaque électron:

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \dots \phi_n(\vec{r}_n) \quad (\text{II. 10})$$

L'équation de Schrödinger mono-électroniques dans l'approche de Hartree s'écrit :

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}_i, \vec{R}) + V_H(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right) \phi_i(\vec{r}) = E \phi_i(\vec{r}) \quad (\text{II. 11})$$

Où :

- ☞ les vecteurs r et R expriment les positions spatiales de l'électron et du noyau respectivement.
- ☞ $V_{\text{ext}}(\vec{r}_i, \vec{R})$: représente à la fois le potentiel du aux noyaux
- ☞ $V_H(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$: le potentiel de Hartree

L'énergie est la somme des énergies de tous les électrons :

$$E_e = E_1 + E_2 + E_3 + \dots + E_N \quad (\text{II.12})$$

Le principal défaut de la méthode de Hartree est qu'elle ne tient pas compte du principe de Pauli, la fonction d'onde n'est pas antisymétrique par rapport à l'échange des coordonnées de deux électrons.

II.3.3. Approximation de Hartree-Fock

En 1930, Fock [4] a montré que la fonction d'onde de Hartree ne respecte pas le principe d'exclusion de Pauli. Pour corriger tout ça, Fock ont proposé d'exprimer la fonction d'onde sous la forme d'un déterminant de Slater [5]:

$$\Psi_{DS} = \Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_1) & \dots & \phi_N(\vec{r}_1) \\ \phi_1(\vec{r}_2) & \phi_2(\vec{r}_2) & \dots & \phi_N(\vec{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(\vec{r}_N) & \phi_2(\vec{r}_N) & \dots & \phi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.13})$$

Où :

$\frac{1}{\sqrt{N!}}$: La constante de normalisation (N : le nombre d'électrons)

II.4. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Le concept fondamental de la DFT est que l'énergie d'un système électronique peut être exprimée en fonction de sa densité. Cette approche d'abord introduite empiriquement par Thomas [6] et Fermi [7] a été prouvée comme exacte par Hohenberg et Kohn [8]

II.4.1. Théorèmes de Hohenberg-Kohn

Le formalisme de la DFT est basé sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn en 1964 [8]:

➔ Premier théorème de Hohenberg et Kohn

L'énergie totale du système, à l'état fondamental, est également une fonctionnelle unique universelle de la densité électronique, soit :

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

➔ Second théorème de Hohenberg et Kohn

L'énergie totale caractérisant l'état fondamental d'un système est correspondante à l'énergie totale minimale de ce système.

$$E(\rho_0) = \text{Min}E[\rho(\vec{r})] \quad (\text{II. 15})$$

II.4.2. Equations de Kohn et Sham

En 1965 Kohn et Sham (KS)[9] proposent une méthode pratique permettant d'utiliser la théorie de la fonctionnelle de la densité. Ces auteurs ont considéré l'équivalence entre un système d'électrons en interaction dans un potentiel extérieur $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ et un système d'électrons sans interaction dans un potentiel effectif V_{eff}

La fonctionnelle de la densité $F[\rho(\vec{r})]$ pour le système interactif peut être exprimée par l'expression suivante :

$$F[\vec{r}] = T_s[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] + E_{\text{ext}}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{II. 16})$$

Avec:

- ☞ $T_s[\rho(\vec{r})]$ est l'énergie cinétique du système d'électrons sans interaction ;
- ☞ $E_H[\rho(\vec{r})]$ désigne le terme de Hartree ;
- ☞ $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ est la fonctionnelle d'énergie d'échange et de corrélation ;
- ☞ $E_{\text{ext}}[\rho(\vec{r})]$ est l'interaction noyau-électron.

Les équations de Kohn-Sham s'écrivent alors:

$$\left[\underbrace{-\frac{\nabla_i^2}{2} + V_H(\vec{r}) + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r})}_{H^{KS}} \right] |\phi_i\rangle = \varepsilon_i |\phi_i\rangle, i = 1, \dots, N_e \quad (\text{II. 17})$$

Avec,

- ☞ $V_{\text{ext}}(\vec{r})$: Le potentiel externe du aux noyaux atomiques.
- ☞ $V_H(\vec{r})$: Le potentiel de Hartree
- ☞ $V_{xc}(\vec{r})$: Le potentiel d'échange et de corrélation, obtenu à partir de la dérivée de l'énergie d'échange et de corrélation par rapport à la densité.

On peut réécrire l'équation sous la forme:

$$\left[-\frac{\nabla_i^2}{2} + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (\text{II. 18})$$

Où

- ☞ $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ représente le champ effectif

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \quad (\text{II. 19})$$

II.5. Les approximations d'échange-corrélation

La DFT reste inapplicable car la fonctionnelle d'échange-corrélation $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ reste inconnu. A ce stade, il est nécessaire d'approcher l'expression de cette fonctionnelle d'échange et corrélation qui repose sur un certain nombre d'approximations [10]

II.5.1. Approximation de la densité locale LDA

La plus simple est l'approximation de la densité locale (LDA : Local Density Approximation)[11] et certainement la plus utilisée pour résoudre le problème de la fonctionnelle d'échange-corrélation, elle est basée sur le modèle du gaz uniforme (homogène) d'électrons. Cette approximation a été proposée dans le document original de Kohn-Sham dans leur article en 1965[9]. On peut dès lors définir l'énergie d'échange-corrélation de la manière suivante :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (II.20)$$

ε_{xc}^{hom} : est la densité homogène d'un gaz d'électrons

Il existe une version de la LDA connue sous le nom de l'approximation de la densité de spin local (LSDA : Local Spin Density Approximation). De ce fait, la densité de charge et l'énergie d'échange et de corrélation dépendront du spin à travers les deux relations :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_{\uparrow}(\vec{r}) + \rho_{\downarrow}(\vec{r})$$

$$E_{xc}^{LDA}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{hom}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (II.21)$$

II.5.2. Approximation du Gradient Généralisé (GGA)

L'approximation de la densité locale (LDA) a donné des résultats fiables, mais dans d'autres, elle été moins exacte avec les résultats expérimentaux. Approximation du Gradient Généralisé (GGA) [12] s'est imposée pour améliorer certains problèmes rencontrés dans la LDA. Pratiquement les systèmes réels ne peuvent pas être représentés par un modèle uniforme car on trouve que la plupart des systèmes moléculaires sont plutôt inhomogènes. Elle permet d'exprimer l'énergie d'échange et de corrélation non seulement en fonction de la densité de charge $\rho(\vec{r})$ mais également en fonction de son gradient $\nabla\rho(\vec{r})$.

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (II.22)$$

II.6. Résolution des équations de Kohn et Sham

Les équations de Kohn-Sham sont résolues d'une manière itérative, en utilisant un cycle auto-cohérent illustré par le schéma de la figure (II.1). On commence par une de départ $\rho^{in}(r)$ qui permet de calculer le potentiel (V_{KS}) qui est utilisé dans la résolution des équations de Kohn et Sham. Le calcul de ce dernier facilite la résolution de l'hamiltonien, qui nous donne l'énergie. Après cette étape, une nouvelle densité de sortie ρ_{out} doit être créée et testée suivant certaines conditions de convergence. Alors, si cette densité obéit à ces conditions on s'arrête et on peut déterminer les propriétés du matériau; sinon on mixe les densités de sortie et d'entrée suivant l'équation (II.23) et le processus se répète jusqu'à la convergence.

$$\rho_{in}^{i+1} = (1 - \alpha)\rho_{in}^{i+1} + \alpha\rho_{out}^i \quad (\text{II.23})$$

Avec :

- ☞ i : représente la 1^{ème} itération.
- ☞ α : un paramètre de mixage.

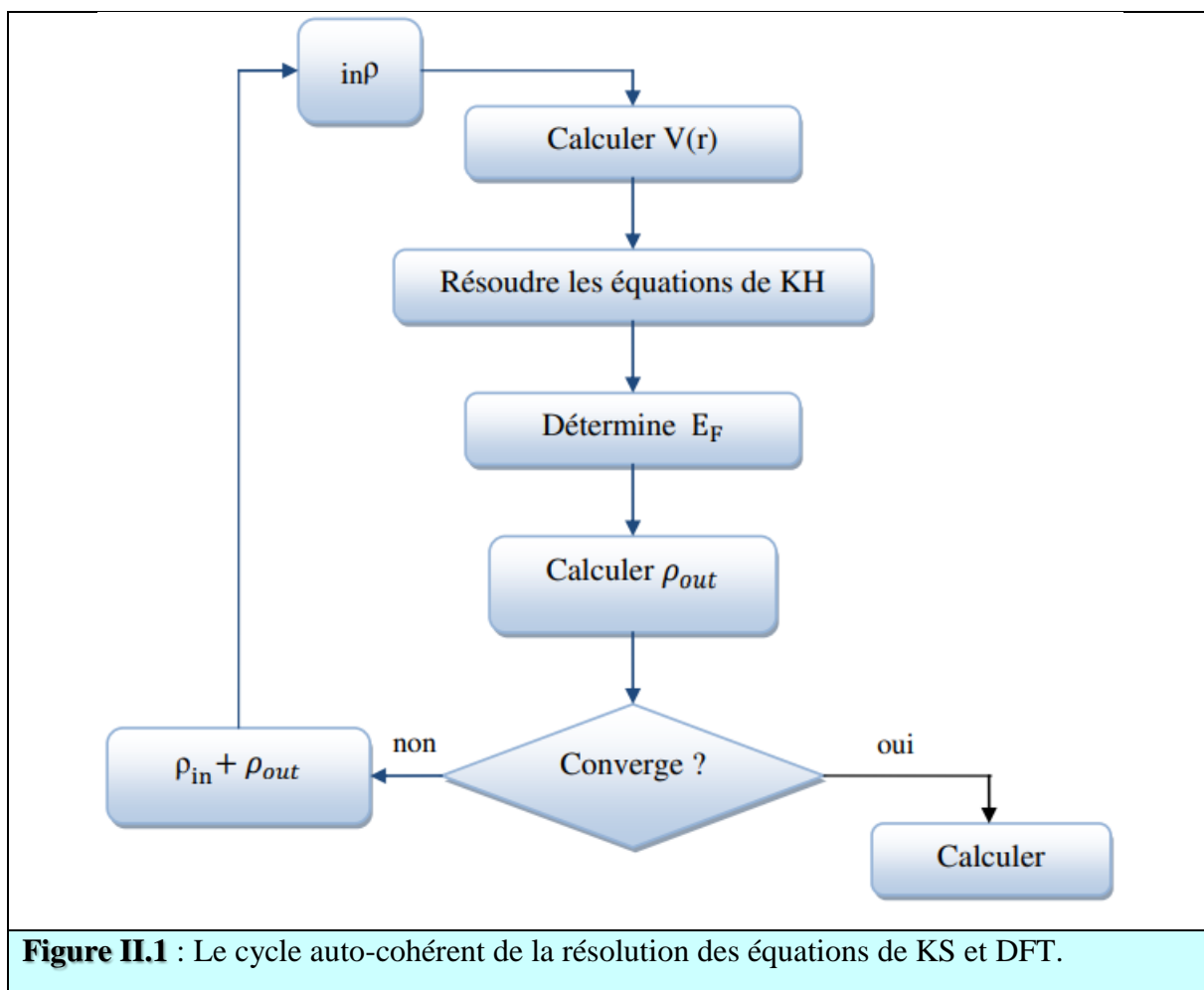


Figure II.1 : Le cycle auto-cohérent de la résolution des équations de KS et DFT.

II.7. Méthode de pseudo-potentiel

Les méthodes de la DFT sont classées en deux grandes catégories :

- ☞ Les méthodes "tout électrons"
- ☞ Les approches dites pseudo-potentiels.

La méthode des pseudo-potentiels est introduite pour simplifier les calculs. Elle consiste à réduire le système {noyaux + tous les électrons (AE)} à celui d'un système d'électrons de valence dans le pseudo-potentielle composé du potentiel du noyau et des électrons de cœur. Cependant, le calcul sera réduit uniquement aux électrons de valence qui seront choisis [13].

Généralement, on distingue trois grandes types de Pseudopotentiels :

- ① Les pseudopotentiels à norme conservée introduits par Hamman et al [14].
- ② Les pseudopotentiels ultra-doux introduits par Vanderbilt [15].
- ③ Les pseudopotentiels dual-space Gaussian introduit par Geodecker et al [16, 17].

II.7. 1.Types de pseudo-potentiels

II.7.1.1. Pseudo-potentiel à norme conservée

Les caractéristiques nécessaires à la construction d'un pseudopotentiel à norme conservée ont été proposées par Hamann et al. en 1979 [14]. Ce pseudopotentiel doit satisfaire quatre propriétés :

- ① Les valeurs propres de valence dans les deux types de calculs : calcul avec tous les électrons et calcul avec le pseudopotentiel correspondent à la même valeur propre de la configuration atomique de référence
- ② La fonction d'onde exacte et la pseudo-fonction d'onde doivent être identiques au-delà du rayon de coupure r_c (figure II.2) :

$$\Psi^{ps}(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}) \quad \text{pour } (r > r_c) \quad (\text{II.24})$$

- ③ Les dérivées logarithmiques au rayon des deux types de fonctions d'onde : exacte et pseudisée doivent être identiques :

$$\left. \frac{\partial \ln \Psi(\vec{r})}{\partial r} \right|_{r=r_c} = \left. \frac{\partial \ln \Psi^{ps}(\vec{r})}{\partial r} \right|_{r=r_c} \quad (\text{II.25})$$

- ④ Propriété de la conservation de la norme :

$$\langle \Psi(\vec{r}) | \Psi(\vec{r}) \rangle = \langle \Psi^{ps}(\vec{r}) | \Psi^{ps}(\vec{r}) \rangle \quad (\text{II.26})$$

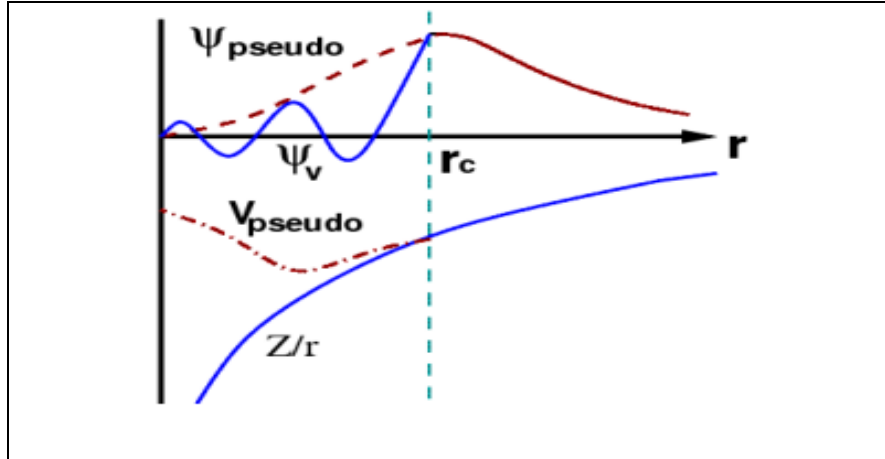


Figure II.2: Trace d'un pseudopotentiel et d'une pseudo-fonction d'onde par rapport au potentiel et a la fonction d'onde exacte

II.7.1.2. Pseudopotentiel 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 [18]. L'utilisation des pseudopotentiels a norme conservée est très coûteuse, Par contre le pseudo-potentiel ultra-doux qui est introduit par Vanderbilt en 1990 [15]

II.8. Méthode des ondes planes (PW)

L'ensemble des ondes planes est une base de projection des fonctions d'ondes. La résolution des équations de Kohn et Sham en base d'ondes planes est explicitée dans l'article de Payne et autres [19].

Pour étudier le système {noyau + électrons}, on avait utilisé dans les équations de Kohn-Sham, qui résolvent de façon auto-cohérente :

$$\hat{H}_{eff}\Psi_i(\vec{r}) = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{eff}(\vec{r})\right)\Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II. 27})$$

$$V_{eff} = V_{pseudo}(\rho(\vec{r})) + V_H(\rho(\vec{r})) + V_{xc}(\rho(\vec{r})) \quad (\text{II. 28})$$

II.8.1. Théorème de Bloch

Bloch démontra un important théorème qui établit que les solutions de l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique peuvent être mises sous la forme d'un produit d'une onde plane par une fonction $u_n(\vec{k}, \vec{r})$ qui a la périodicité du réseau cristallin [20]:

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{L\Omega}} u_n(\vec{k}, \vec{r}) \exp(i.\vec{k}.\vec{r}) \quad (\text{II. 29})$$

Où :

- ☞ $\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}, \vec{k})$: la fonction d'onde du système
- ☞ L : le nombre de maille dans tout le cristal;
- ☞ Ω : le volume d'une maille du cristal;
- ☞ n : le nombre quantique principal d'une bande d'énergie;
- ☞ \vec{k} : un vecteur d'onde de la première zone de Brillouin (ZB).

Avec :

$$u_n(\vec{r}) = u_n(\vec{r} + \vec{R}) \quad (\text{II. 30})$$

II.8.2. L'énergie cinétique de coupure

La base d'ondes planes peut être limitée aux ondes planes qui ont une énergie cinétique inférieure à une valeur critique (énergie de coupure) E_{cut} [21].

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2 \leq E_{cut-off} \quad (\text{II. 31})$$

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

Le nombre d'ondes planes pris en compte dans le calcul est donc :

$$N = N_k \frac{1}{2\pi^2} \Omega E_{cut-off}^{\frac{3}{2}} \quad (\text{II. 32})$$

Où:

- ☞ N_k : est le nombre de vecteurs \vec{k} à l'aide desquels la première zone de Brillouin est échantillonnée;
- ☞ Ω : est le volume de la cellule de simulation.

II.8.3. Echantillonnage de la première zone de Brillouin

La première zone de Brillouin peut être décrite par une série de points $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ dans l'espace réciproque, donc l'énergie électronique du système résultera de la contribution des états occupés pour tous ces points de la zone de Brillouin devrait être utilisé [22]. Pour calculer l'énergie, la zone de Brillouin devrait être échantillonnée le plus finement possible. Plusieurs méthodes d'échantillonnage existent telles que les méthodes de Chadi et Cohen [23], d'Evarestov et Smirnov[24] ou celle de Monkhorst et Pack[25] . C'est la dernière méthode qu'il utilise dans notre code de calcul CASTEP. Le choix du nombre de points \vec{k} détermine le degré d'exactitude du calcul.

II.9. Description du code CASTEP

Il existe un grand nombre de codes de calculs basés sur la DFT, par exemple Dmol3, VASP, ABINIT, CRYSTAL, BigDFT. Nos calculs dans ce mémoire ont été réalisés en utilisant le code de modélisation numérique CASTEP, CASTEP a été développé par Mike Payne d'université de Cambridge, il est toujours en cours de développement. Le CASTEP (Cambridge Sequential Total Energy Package) est un code qui emploie la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour simuler les propriétés des solides, les interfaces et les surfaces pour une grande gamme de classes des matières. Basé sur les méthodes du pseudo-potential de l'onde plane (PP-PW) pour d'obtenir l'énergie totale à l'état fondamental du système et sa structure électronique aussi bien pour l'état stable du système. Vous pouvez utiliser CASTEP pour calculer les propriétés des matériaux tel les structurales, électroniques, optiques, élastiques ...etc.

II.10. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu une bonne présentation du cadre théorique des calculs ab initio dans lequel sera effectué ce travail et nous exposerons les fondements de la DFT. Les approximations utilisées pour traiter la partie échange et corrélation de l'énergie seront rappelées. Nous présenterons également d'autres approximations relatives aux pseudopotentiels. Ensuite, nous présenterons la description du code de calcul CASTEP utilisés dans notre mémoire.

Référence

- [1] E. Schrödinger, "The non-relativistic equation of the de Broglie waves," *Ann. der Phys*, vol. 79, pp. 361-489, 1926.
- [2] M. Born and J. R. Oppenheimer, *Ann. Phys*, vol. 87, p. 457, 1927.
- [3] D. R. Hartree, "The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods," in *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1928, vol. 24: Cambridge university press, pp. 89-110.
- [4] V. Fock, "Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems," *Zeitschrift für Physik*, vol. 61, no. 1, pp. 126-148, 1930.
- [5] J. C. Slater, "The theory of complex spectra," *Physical Review*, vol. 34, no. 10, p. 1293, 1929.
- [6] L. H. Thomas, "The calculation of atomic fields," in *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society*, 1927, vol. 23: Cambridge University Press, pp. 542-548.
- [7] E. Fermi, "Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente," *Zeitschrift für Physik*, vol. 48, no. 1, pp. 73-79, 1928.
- [8] P. Hohenberg and W. Kohn, "Density functional theory (DFT)," *Phys. Rev*, vol. 136, p. B864, 1964.
- [9] W. Kohn and L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," *Physical Review*, vol. 140, no. 4A, p. A1133, 1965.
- [10] C. Auragh, "Etude ab initio des propriétés structurales et électroniques de la pérovskite PbZrO₃."
- [11] V. Sahni and M. Slamet, "Interpretation of electron correlation in the local-density approximation for exchange," *Physical Review B*, vol. 48, no. 3, p. 1910, 1993.
- [12] J. P. Perdew, "Accurate density functional for the energy: Real-space cutoff of the gradient expansion for the exchange hole," *Physical review letters*, vol. 55, no. 16, p. 1665, 1985.
- [13] S. Ferahtia, "Calcul de premier principe de quelques propriétés physiques de quelques semi-conducteurs dans des phases structurales différentes," Université Mohamed Khider-Biskra, 2016.
- [14] D. Hamann, M. Schlüter, and C. Chiang, "Norm-conserving pseudopotentials," *Physical review letters*, vol. 43, no. 20, p. 1494, 1979.
- [15] D. Vanderbilt, "Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism," *Physical Review B*, vol. 41, no. 11, p. 7892, 1990.
- [16] S. Goedecker, M. Teter, and J. Hutter, "Separable dual-space Gaussian pseudopotentials," *Physical Review B*, vol. 54, no. 3, p. 1703, 1996.
- [17] C. Hartwigsen, S. Goedecker, and J. Hutter, "Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn," *Physical Review B*, vol. 58, no. 7, p. 3641, 1998.
- [18] G. B. Bachelet, D. R. Hamann, and M. Schlüter, "Pseudopotentials that work: From H to Pu," *Physical Review B*, vol. 26, no. 8, p. 4199, 1982.
- [19] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. Arias, and a. J. Joannopoulos, "Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients," *Reviews of modern physics*, vol. 64, no. 4, p. 1045, 1992.
- [20] F. Bloch, "Quantum mechanics of electrons in crystal lattices," *Z. Phys*, vol. 52, pp. 555-600, 1928.

- [21] J. Kohanoff, *Electronic structure calculations for solids and molecules: theory and computational methods*. Cambridge university press, 2006.
- [22] H. YAHY, "Etude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des semi-conducteurs magnétiques dilués $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}$ et $\text{Cd}_{1-x}\text{V}_x\text{S}$," 2016.
- [23] D. J. Chadi and M. L. Cohen, "Special points in the Brillouin zone," *Physical Review B*, vol. 8, no. 12, p. 5747, 1973.
- [24] R. Evarestov and V. Smirnov, "Special points of the Brillouin zone and their use in the solid state theory," *physica status solidi (b)*, vol. 119, no. 1, pp. 9-40, 1983.
- [25] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, "Special points for Brillouin-zone integrations," *Physical Review B*, vol. 13, no. 12, p. 5188, 1976.

Chapitre III

Résultats et discussions

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1. Introduction

III.2. Détails de calculs

III.3. Propriétés structurales

III.4. Propriétés électroniques

III.4.1. Structure de bande

III.4.2. Densité d'états électroniques

III.5. Propriétés optiques

III.6. Propriétés élastiques

III.7. Conclusion

Références

III.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les détails des résultats des calculs que nous avons menés concernant les propriétés structurales, électroniques, optiques et élastiques de l'alliage ternaire $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ en fonction de la concentration x en Al. Nos résultats obtenus sont discutés et comparés avec l'expérimental et avec d'autres modèles théoriques disponibles dans la littérature.

III.2. Détails de calculs

Tous les calculs effectués dans ce travail sont réalisés à l'aide d'une méthode pseudopotentielle à ondes planes (PP-PW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code CASTEP (Cambridge Serial total energy package)[1, 2]. Nous avons également utilisé l'approximation de gradient généralisée (GGA) dans le paramétrage de Perdew – Burke – Ernzerhaf (PBE)[3] pour décrire le potentiel d'échange et de corrélation. Nous avons choisi le pseudo-potential de type norme conserve [4] .

Les états de valence considérés au cours de nos calculs pour différents atomes constituant les matériaux étudiés sont donnés comme suit :

- ↻ Ga : $3d^{10}4s^24p^1$
- ↻ Al : $3s^23p^1$
- ↻ As : $4s^24p^3$.

Les critères de convergence utilisés ici sont:

- ↻ Tolérance par rapport à l'énergie : $5,0 \cdot 10^{-6}$ eV/atome
- ↻ Tolérance par rapport aux forces maximales : $0,01$ eV/Å;
- ↻ Tolérance par rapport au stress maximal : $0,02$ GPa;
- ↻ Tolérance par rapport au déplacement maximal : $5,0 \cdot 10^{-4}$ Å.

Avant de lancer des calculs ab-initio, nous devons faire une étude de convergence de certains paramètres tels que: l'énergie de coupure E_{cut} « Cutoff » et le nombre de points dans la première zone de Brillouin (nkpt). Ces tests de convergence sont importants dans la mesure où ils nous permettent de gagner un temps considérable de calcul. Les résultats de l'étude de convergence de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure E_{cut} et le nombre de

points k sont représentés dans les figures (III.1 et III.2) respectivement. Après avoir faire les tests de convergences, la maille des point k spéciaux utilisée est (7x7x7) et l'énergie de coupure (Ecut) utilisée est égale à 700 eV.

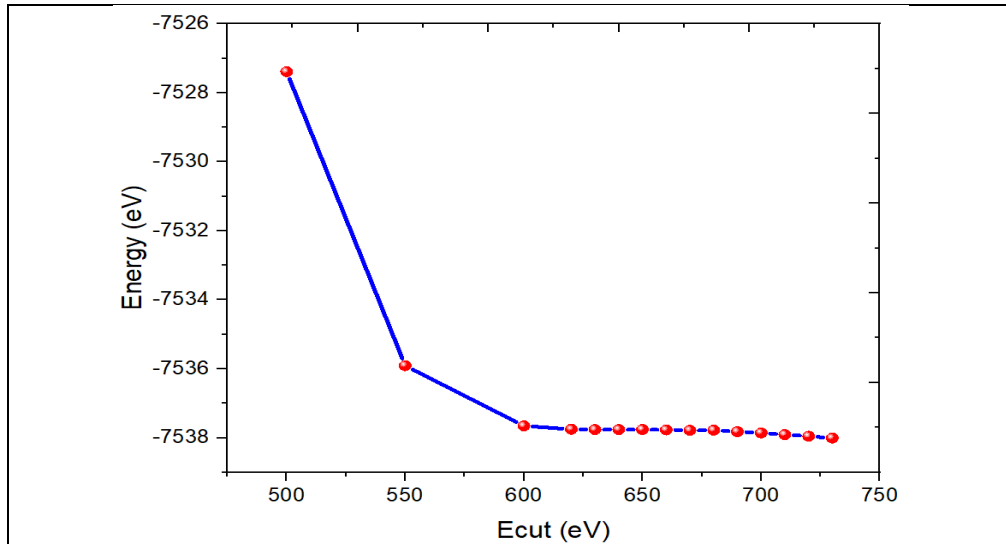


Figure III.1 : Teste de convergence de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure (cut_{off} energy)

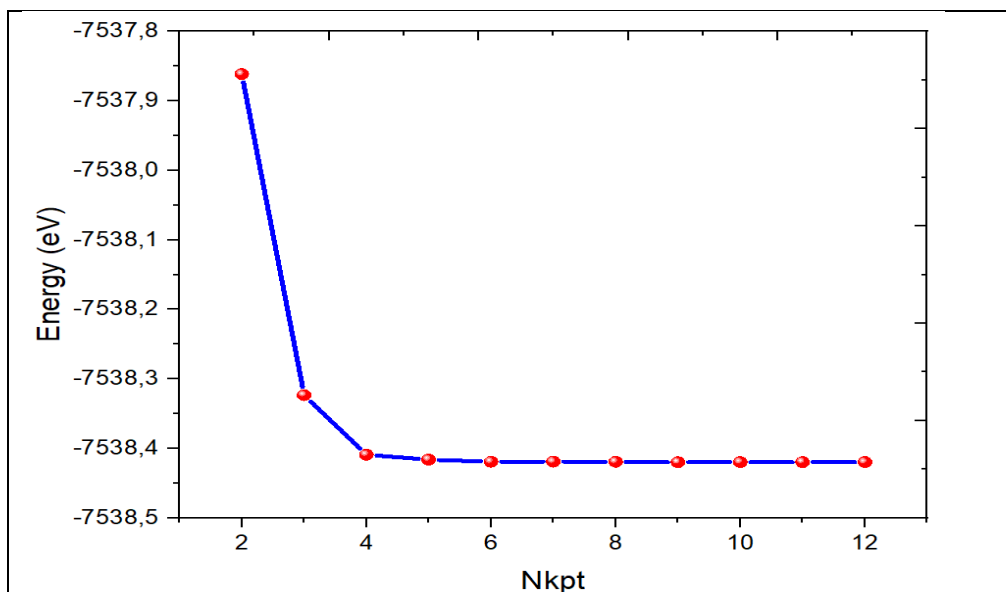
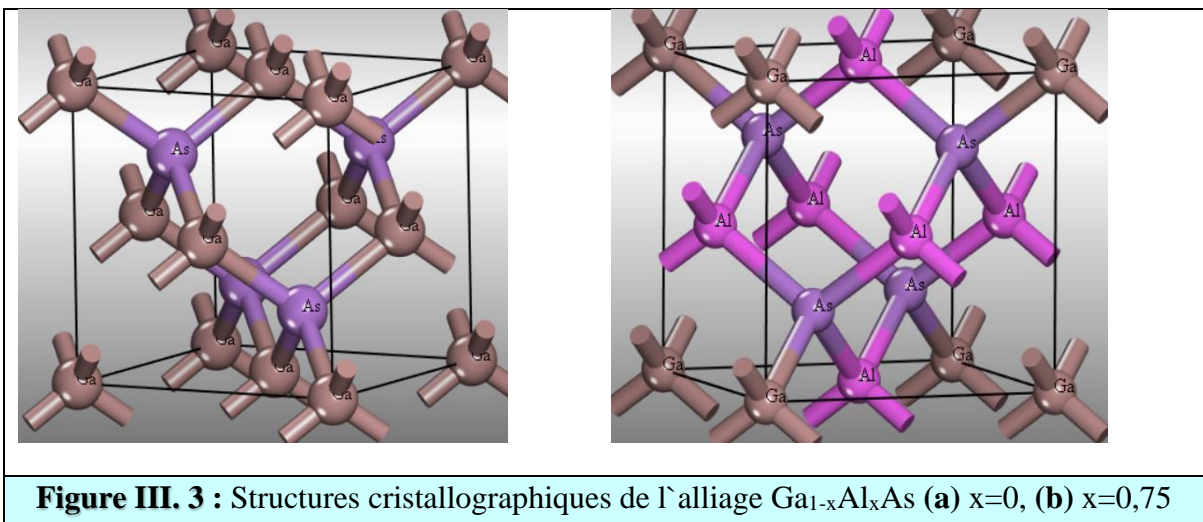


Figure III.2 : Teste de convergence de l'énergie totale en fonction de nombre des points spéciaux

Dans le package CASTEP, l'optimisation des géométries est réalisée de manière auto cohérente grâce à un algorithme de prédiction-correction nommé BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shannon)[5].

Pour étudier les propriétés structurale et électronique de l'alliage, il est commode d'étudier le composé binaire parent GaAs dans la phase zincblende. La structure cubique zinc blende se distingue par le groupe ponctuel de symétrie $\bar{F}43m$ (n° 216). Les atomes du type III sont situés en : (0,0,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2), (1/2,1/2,0), et les atomes du type V en : (1/4,1/4,1/4), (1/4,3/4,3/4), (3/4,1/4,3/4), (3/4,3/4,1/4) (voir le figure III.3) . Pour étudier les différentes propriétés de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans la phase zinc blende en fonction de la composition en Sulfure ($x=0, 0.25, 0.75$ et 1), on a utilisé la méthode s de $1 \times 1 \times 1$ contenant 8 atomes. Nous avons remplacé un, ... atomes de Gallium par les atomes d'Aluminium pour obtenir la concentration voulue.



III.3. Propriétés structurales

La première étape importante dans nos calculs est la détermination des propriétés structurales de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ en fonction de la concentration x . Le paramètre de maille a pour chaque concentration est déterminé en utilisant la technique de minimisation de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shenno (BFGS). Les paramètres d'équilibre (le module de compression (B) et de sa dérivée (B')) sont obtenus en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction de volume obtenue à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [6] donnée par :

$$E(V) = E_0 - \frac{9}{16} B_0 \left[(4 - B) \frac{V_0^3}{V^2} - (14 - 3B) \frac{V_0^{7/3}}{V^{4/3}} + (14 - 3B) \frac{V_0^{5/3}}{V^{2/3}} \right] \quad (\text{III. 1})$$

Où:

↻ E : L'énergie totale;

- ↷ E_0 : L'énergie de l'état fondamental;
- ↷ B_0 : Le module de compression;
- ↷ B' : La dérivée première du module de compression;
- ↷ V : Le volume de la maille;
- ↷ V_0 : Le volume initial de la maille.

Le module de compression est déterminé au minimum de la courbe $E(V)$ par la relation :

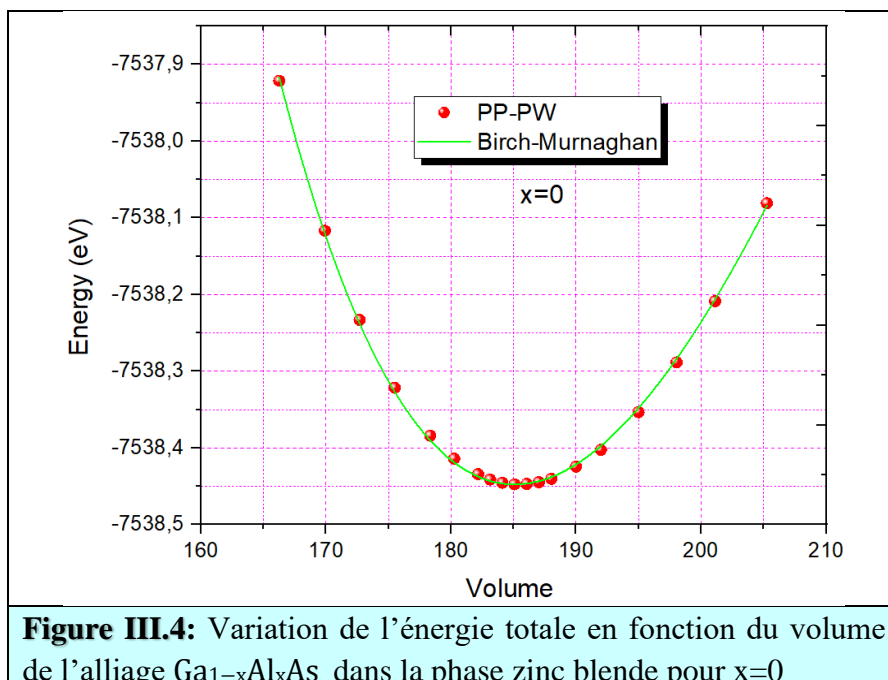
$$B_0 = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III.2})$$

La dérivée du module de compression est donnée par:

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (\text{III.3})$$

Les figures (III.4 - III.7) représentent les variations de l'énergie totale en fonction du volume pour différentes concentrations d'aluminium 'Al' allant de 0 à 1 concentration .

Dans les tableaux (III.1 et III.2) les résultats obtenus pour le paramètre de réseau, le module de rigidité ainsi que sa dérivée par rapport à la pression sont comparés à ceux des mesures expérimentales et d'autres résultats théoriques.



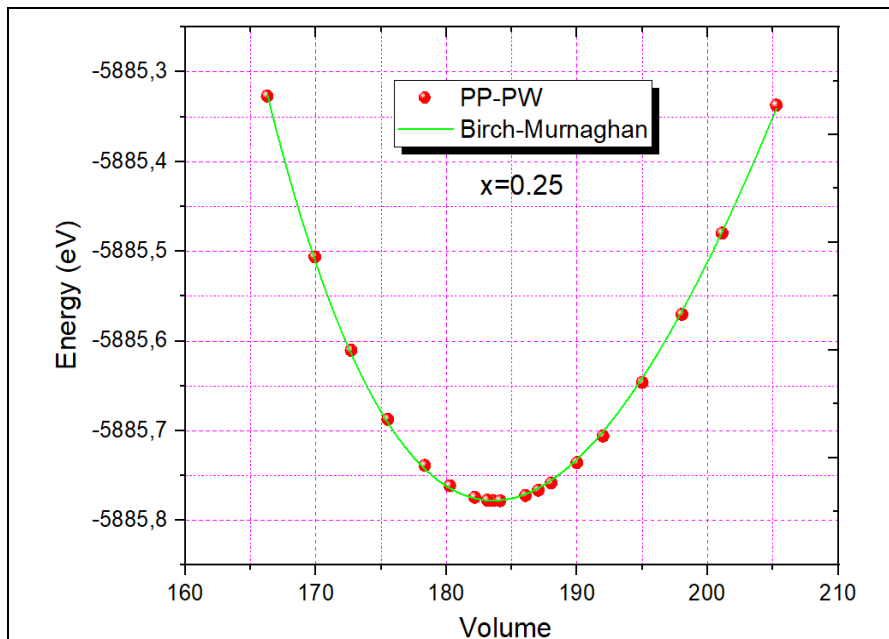


Figure III.5: Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans la phase zinc blende pour $x=0.25$

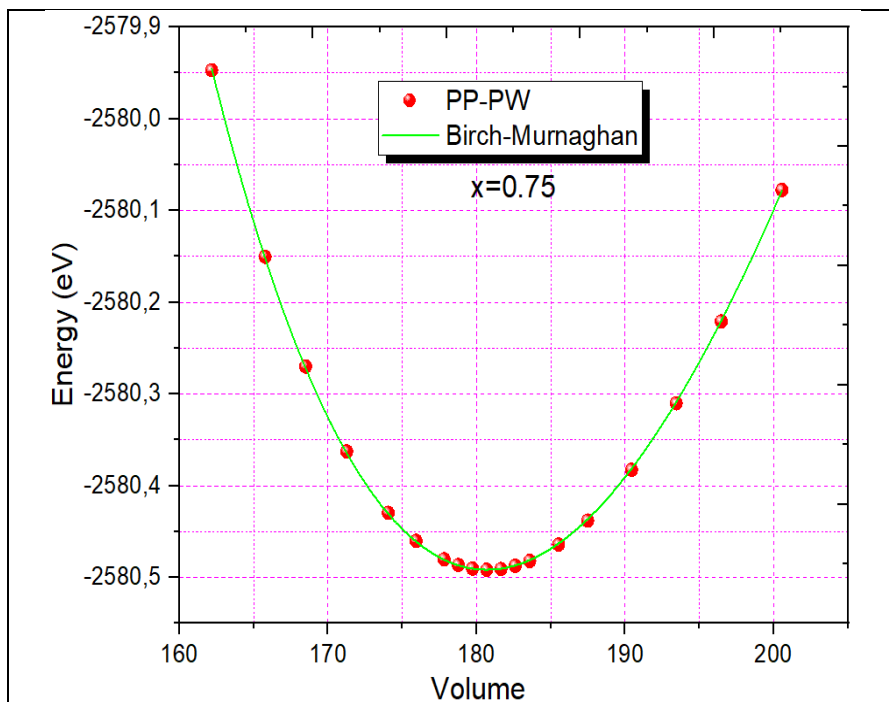


Figure III.6: Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans la phase zinc blende pour $x=0.75$

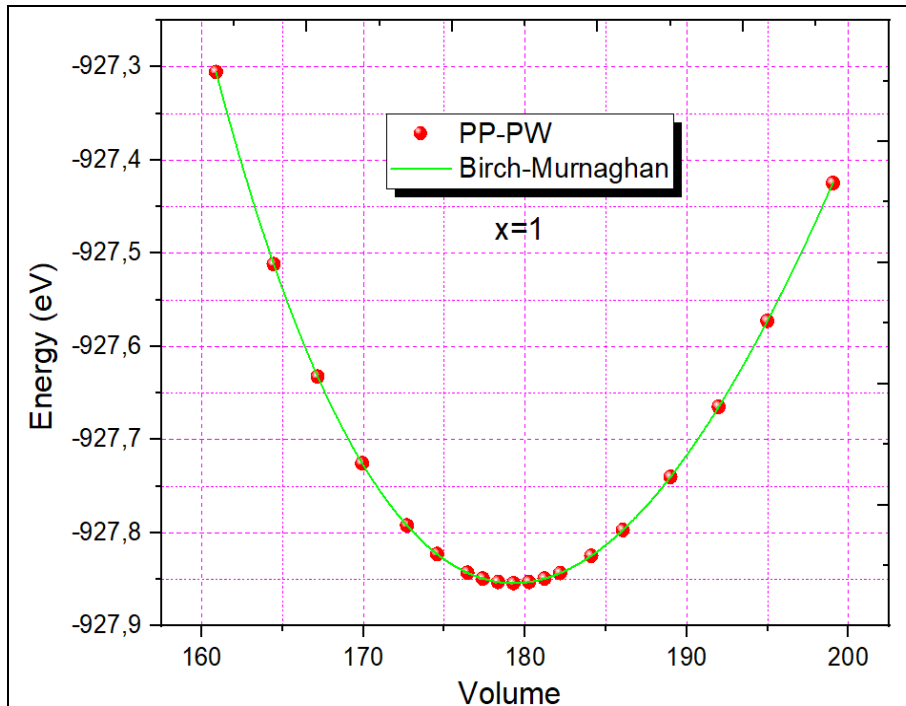


Figure III.7: Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ dans la phase zinc blende pour $x=1$

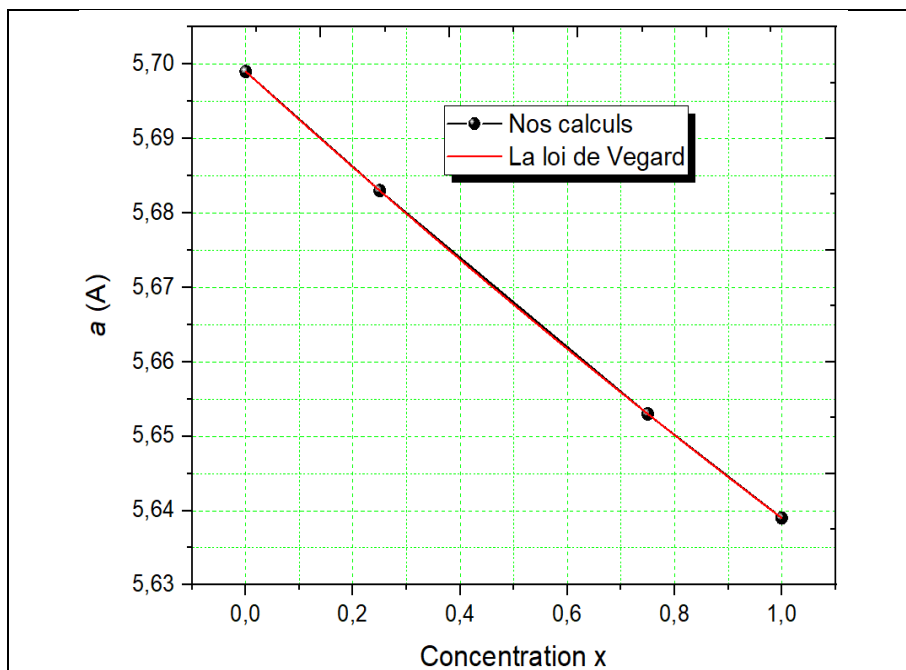


Figure III.8 : Variation du paramètre de maille (a) de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al

La figure (III-8) montre que le paramètre de maille diminue d'une façon presque linéaire avec l'augmentation de la concentration (x) de l'atome Al. La déviation du paramètre du

réseau par rapport la loi de Végard[7], le facteur de désordre du paramètre de réseau, est 0.005 Å.

Tableau III.1 : Le paramètre de maille de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration (x) comparés à d'autres résultats expérimentaux et théoriques

Composé	x	a(Å)		
		Nos calculs	Exp	Autres calculs
$Ga_{1-x}Al_xAs$	0	5.69	5.65 ^a	5.668 ^b , 5.61 ^c
	0.25	5.68		5.671 ^b , 5.55 ^d
	0.75	5.65		5.678 ^b , 5.56 ^d
	1	5.63	5.66 ^a	5.680 ^b , 5.61 ^c

^aRef.[8], ^aRef.[9], ^cRef.[10], ^dRef.[11].

Tableau III.2 : Le module de compression (B) et sa dérivée (B') en fonction de la concentration (x) l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ comparés à d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

	x	B		B'	
		Nos calculs	Autres calculs	Nos calculs	Autres calculs
$Ga_{1-x}Al_xAs$	0	68.36	68.68 ^a , 68.68 ^b	6.40	4.84 ^a
	0.25	70.82	64.63 ^a , 70.046 ^c	5.97	4.89 ^a
	0.75	74.50	66.17 ^a , 71.494 ^c	4.95	4.73 ^a
	1	76.91	75.18 ^a , 72.031 ^d	4.45	4.38 ^a

^aRef. [12], ^bRef.[13], ^cRef.[11], ^dRef.[14].

À partir des résultats obtenus de l'étude des propriétés précédentes de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ aux concentrations (x = 0.0, 0.25, 0.75 et 1.0) nous avons mis en évidence les points suivants:

- ☐ Nous pouvons conclure que les valeurs des paramètres structuraux obtenus par l'approximation (GGA) sont globalement en bon accord avec les valeurs expérimentales et avec les autres travaux théoriques.
- ☐ Le module de compression augmente avec l'augmentation de la concentration x; ce comportement suggère que lorsque on augmente la concentration d'Aluminium (Al) (x augmente de x= 0 à x=1 ces matériaux deviennent plus durs et donc moins compressibles, par contre la dérivée du module de compression (B') décroît avec l'augmentation de même concentration
- ☐ Nous observons que le paramètre cristallin varie linéairement avec la concentration x

- ☐ Le paramètre de maille diminue avec l'augmentation de la concentration en Aluminium. Cette décroissance est due à la masse de l'atome de Gallium qui est plus élevée que celle de l'atome d'Aluminium (Al).

III.4. Propriétés électroniques

La compréhension de la structure électronique d'un matériau nécessite l'étude de la structure de bande électronique et la densité d'états partielle (TDOS).

III.4.1. Structure de bande

La théorie de bandes d'énergie des solides en physique des solides est une approche qui permet l'étude des propriétés électroniques des structures périodiques ce qui permet de savoir le type de matériau (métaux, semi-conducteurs et isolants suivant le degré de remplissage de bande d'énergie dans leur état fondamental).

Les figures (III.9 - III.12) illustrent les structures de bandes électroniques obtenues selon les directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin correspondant à la structure zinc blende, en utilisant l'approximation (GGA-PBE) de l'alliage en fonction de la concentration x

Il est clair sur les figures que l'alliage ternaire a un gap direct pour les concentrations ($x=0, 0,25, 0,75$ et 1) ou le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au point G de la zone de Brillouin.

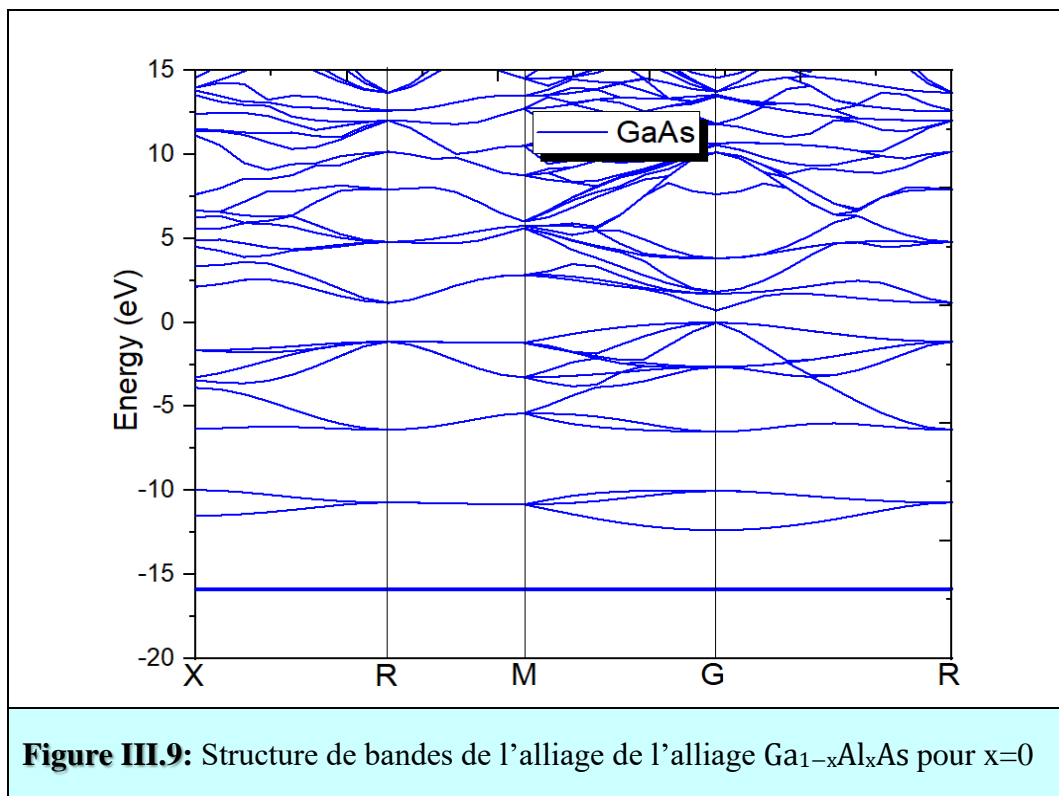
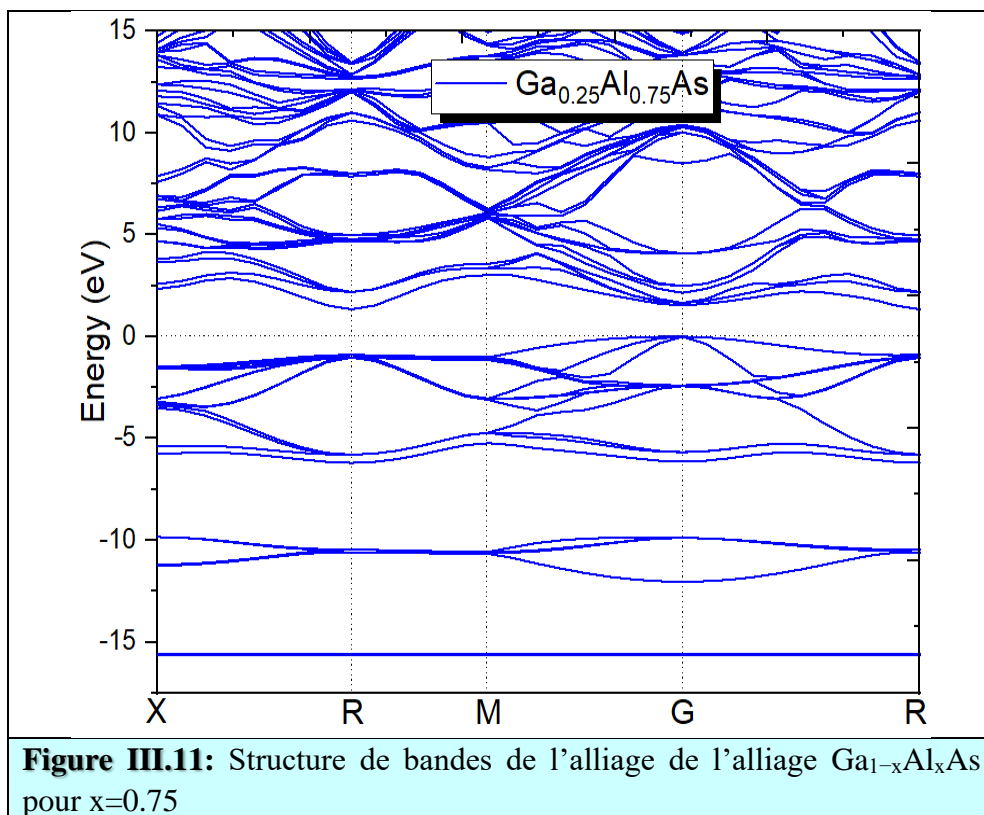
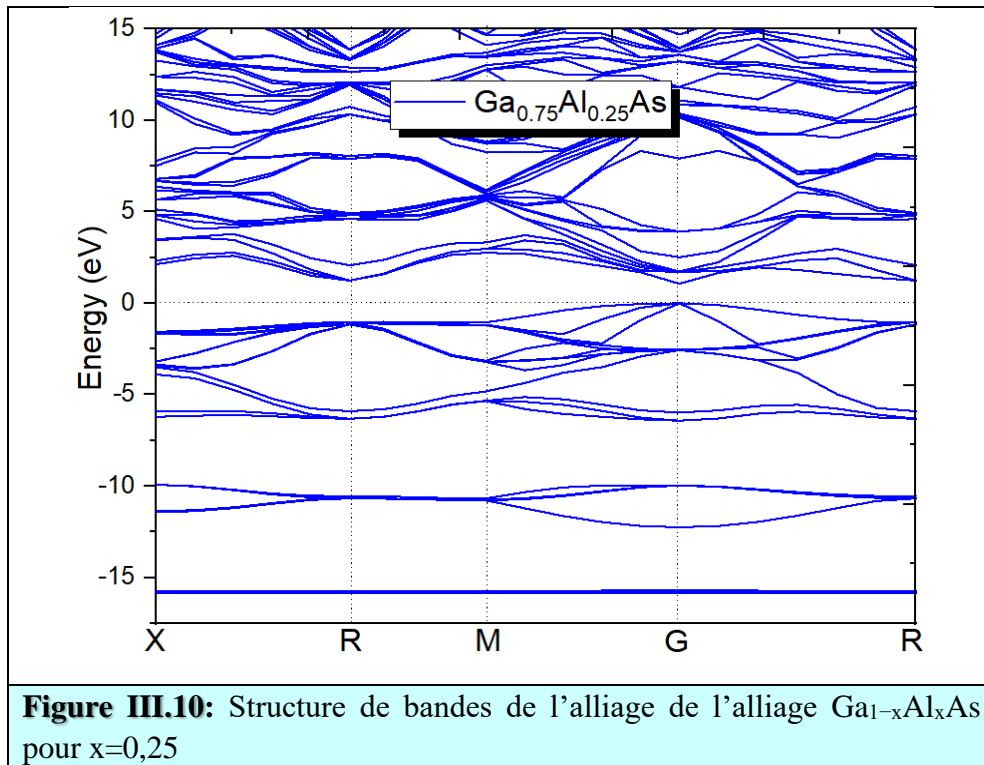
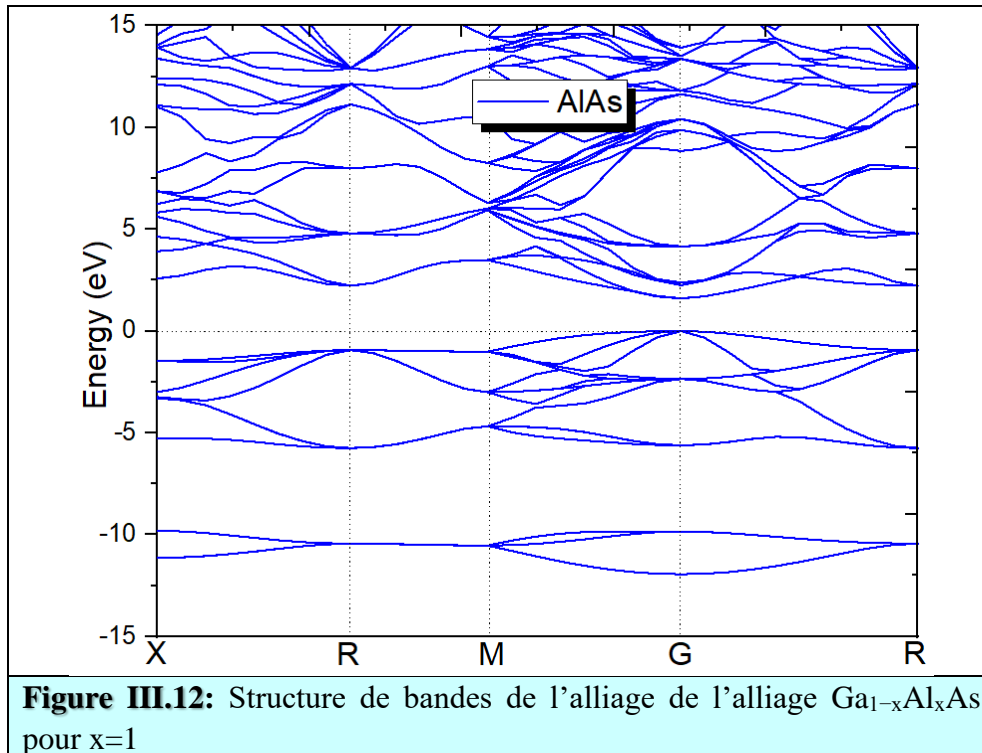
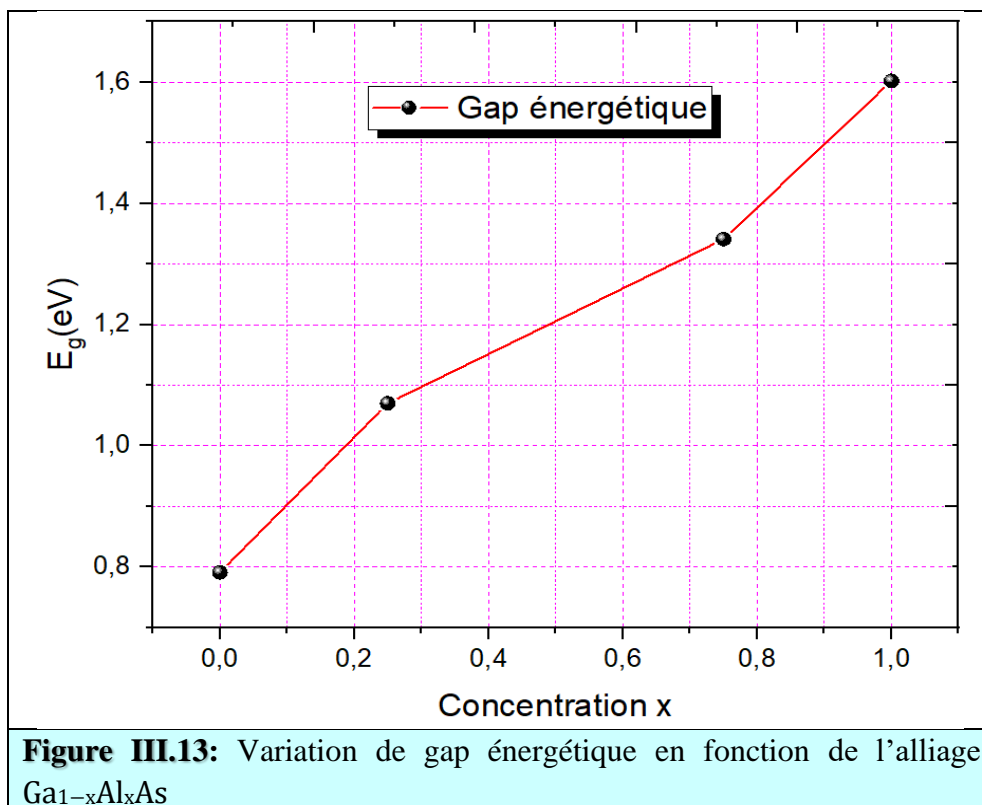


Figure III.9: Structure de bandes de l'alliage de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ pour $x=0$





La variation de l'énergie de la bande interdite directe calculée en fonction de la composition x des alliages ternaires $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ est représentée sur la figure (III.13).



Lorsque la composition x varie en allant de $x=0$ à $x=1$ on note que le gap énergétique varie d'une façon non linéaire. Cette figure nous montre que le gap de l'alliage ternaire augmente en augmentant la composition x (Al).

Un autre paramètre plus important qui représente l'écart à linéarité indiquant le désordre dans l'alliage appelé bowing qui a été calculé pour chaque alliage en ajustant la courbe de la variation du gap en fonction de la concentration (x) à l'aide d'une fonction quadratique.

$$E_g^{GaAlAs} = (1 - x)E_g^{GaAs} + xE_g^{AlAs} - bx(1 - x) \dots \dots \dots (III. 4)$$

Ou,

- x : La concentration du Béryllium dans $Ga_{1-x}Al_xAs$;
- b : Le paramètre de courbure (bowing);
- E_g^{GaAlAs} : Le gap d'énergie du $Ga_{1-x}Al_xAs$;
- E_g^{GaAs} : Le gap d'énergie du GaAs;
- E_g^{AlAs} : Le gap d'énergie du AlAs.

Selon nos résultats, le paramètre de courbure pour l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ égale à -0.048 .

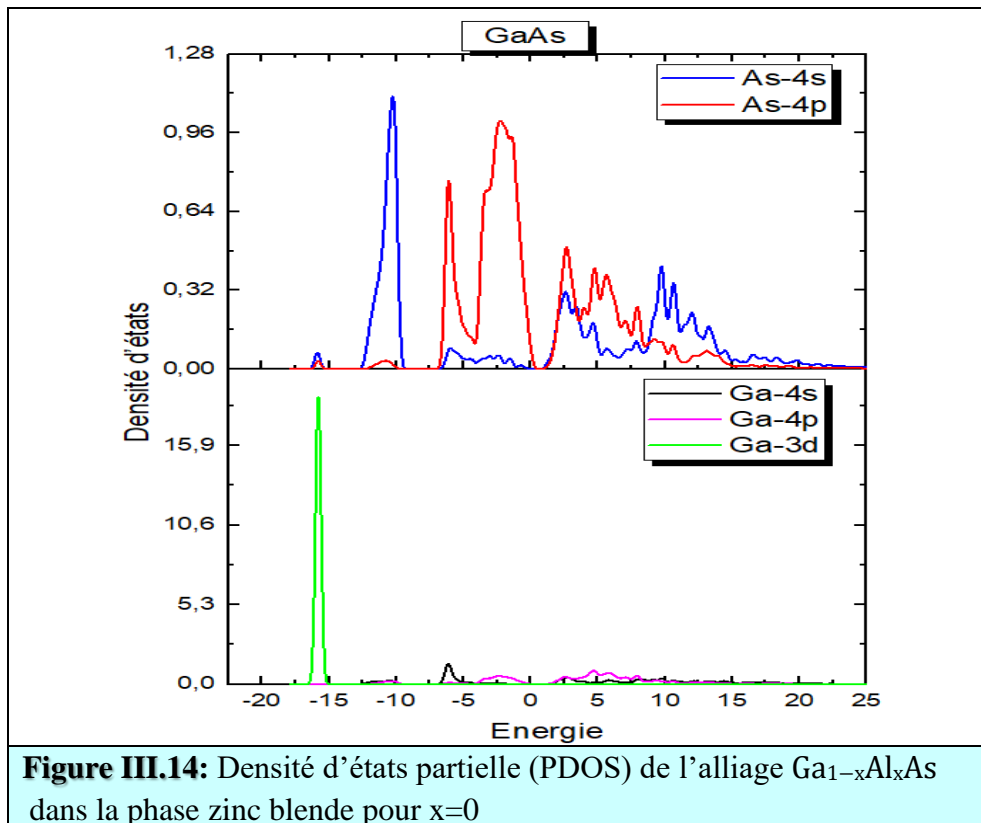
Tableau III.3 : Gaps énergétiques de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ calculés par GGA, et comparés à d'autres valeurs théoriques.

	x	Eg (eV)		
		Nos calculs	Autres calculs	Exp
Ga_{1-x}Al_xAs	0	0.791	0.521 ^a	1.52 ^b
	0.25	1.070	0.857 ^a	
	0.75	1.341	1.113 ^a	
	1	1.602	1.374 ^a	2.170 ^c

^aRef.[15], ^bRef.[16], ^cRef.[17]

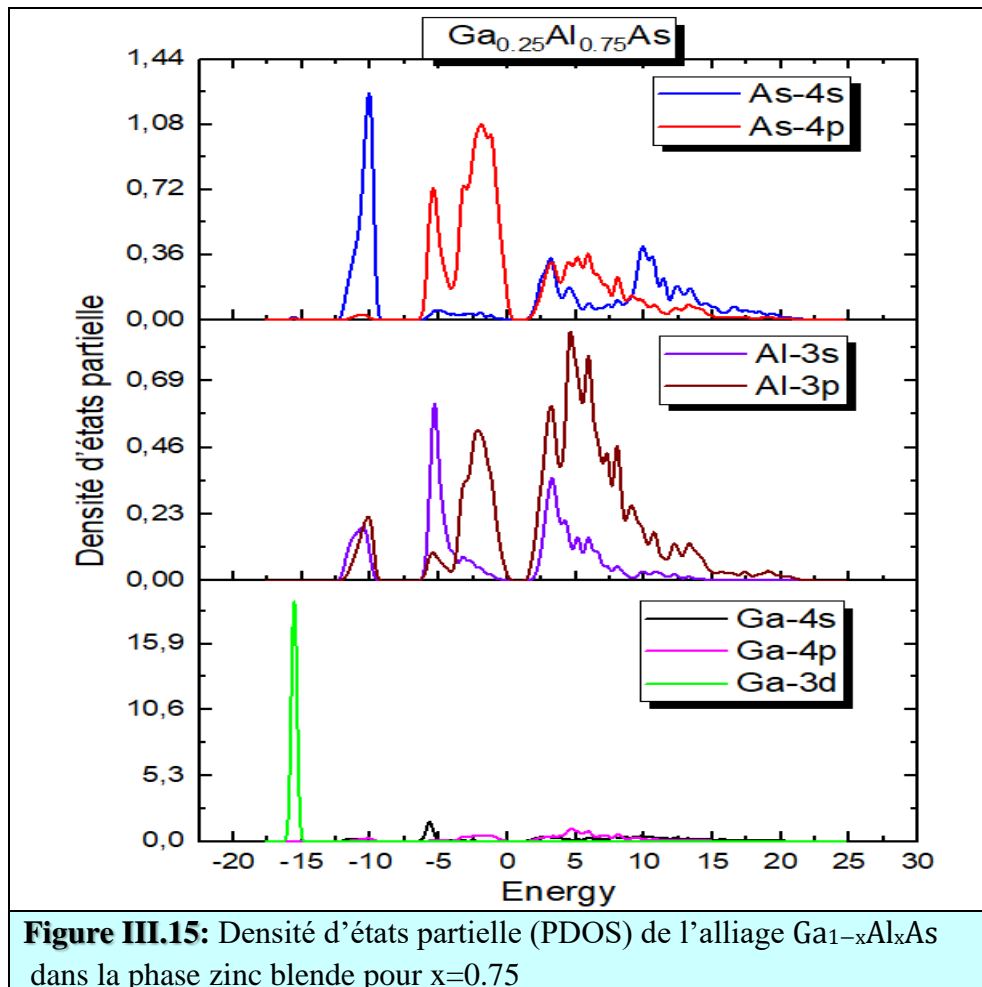
III.4.2. Densité d'états électroniques

En physique du solide, la densité d'états (DOS) est une grandeur physique importante pour comprendre la nature de la structure de bandes électroniques. L'intérêt d'une telle étude est d'être en mesure de connaître la contribution de chaque orbitale. Les figures (III.14 et III.15) représentent les densités d'états (DOS) de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ($x=0$ et $x=0,75$) en utilisant l'approximation (la GGA-PBE).



Nous pouvons distinguer à partir de l'origine des énergies, trois régions de valences :

- ☐ Liaison entre (Sp-As) et (S-Ga) au niveau énergétique 5 eV
- ☐ Liaison entre P-As PGa entre (0-5eV)



Nous avons analysé la contribution de chaque atome en contributions partielles des orbitales s, p et d. La bande de valence pour la concentration $x=0.75$ est divisée en trois régions :

III.5. Propriétés optiques

Les propriétés optiques ont un grand intérêt pour connaître les manières dont l'interaction de la lumière avec la matière dans la physique de l'état solide. Nous avons aussi que les propriétés optiques ont relation direct à la structure électronique du matériau. Les propriétés optiques peuvent être calculées à partir de la fonction qui s'écrit sous la forme:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{III. 5})$$

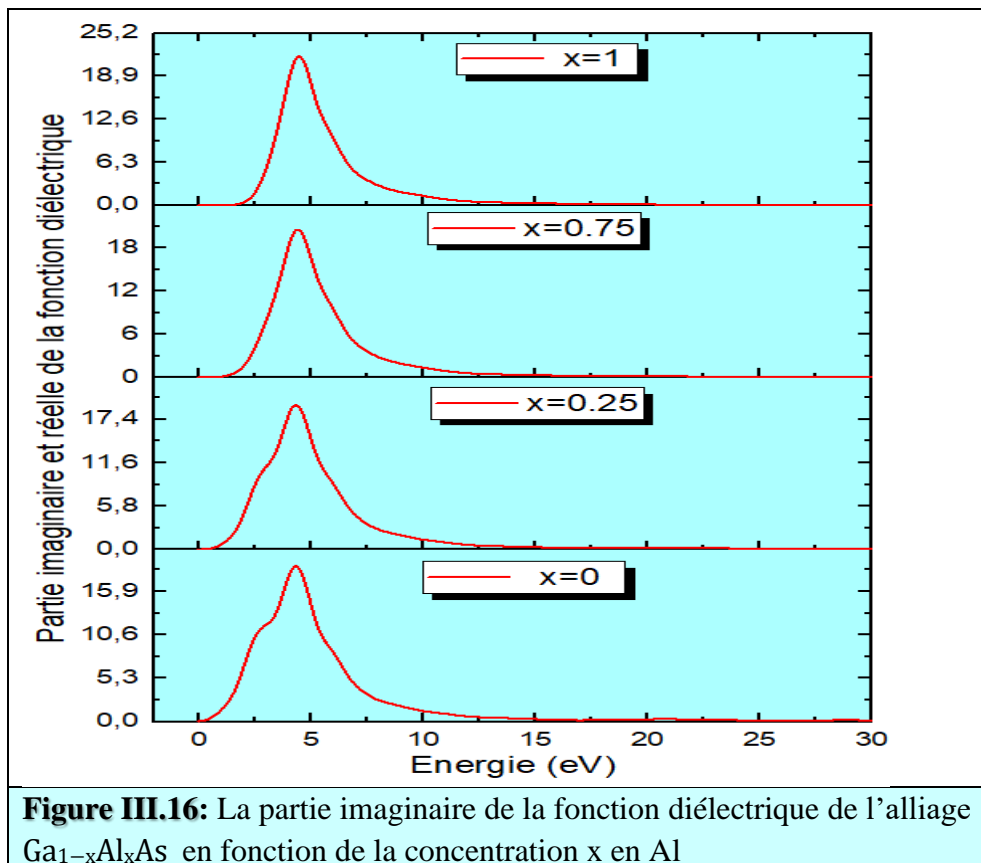
Où

$\varepsilon_1(\omega)$: La partie réelle de la fonction diélectrique

$\varepsilon_2(\omega)$: La partie imaginaire de la fonction diélectrique

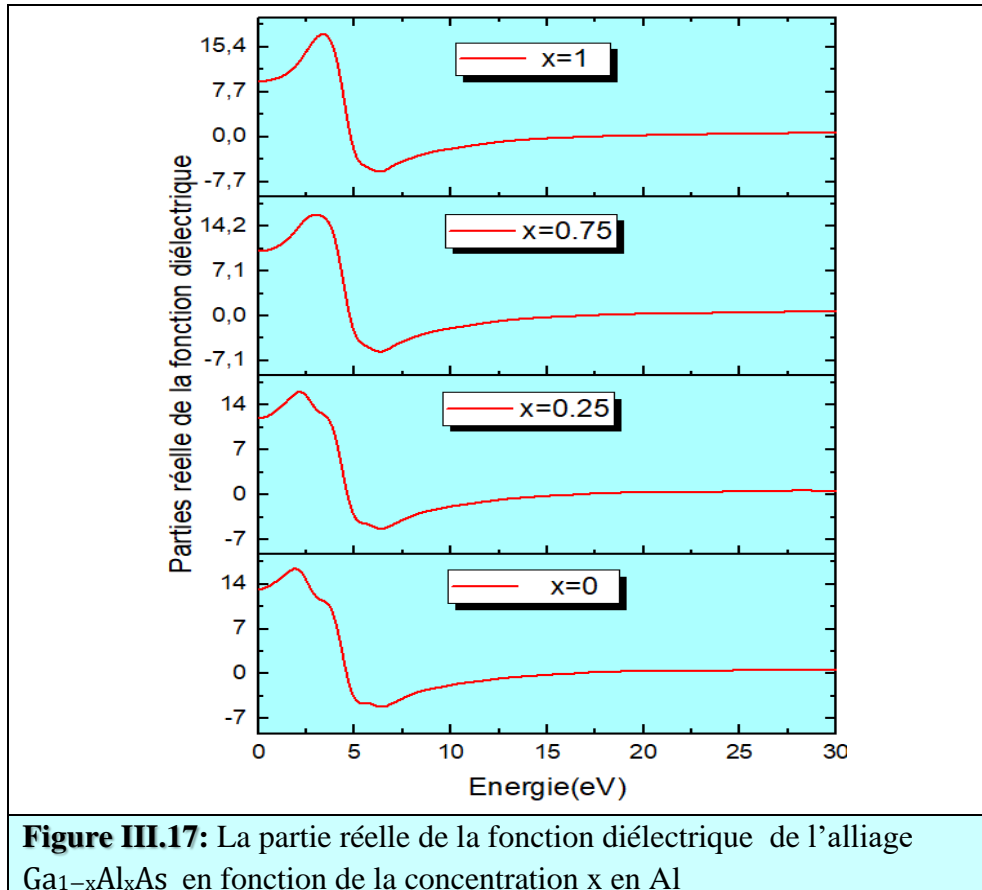
On a calculé les propriétés optiques (la fonction diélectrique, l'indice de réfraction et le coefficient d'absorption) de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ à différentes concentrations x en Al.

La courbe de la variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\varepsilon_2(\omega)$ en fonction de l'énergie dans la gamme (0-30 eV) de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ sont illustrées dans la figure (III.16).



La courbe de $\varepsilon_2(\omega)$ indique que les premiers points critiques de la fonction diélectrique se produit à 0,30, 0,52, 1,12 et 1,91 eV de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ pour les concentrations $x = 0$, 0,25, 0,75 et 1, respectivement. Ces points correspondent à la transition optique directe du haut de la bande de valence au bas de la bande de conduction selon le point G.

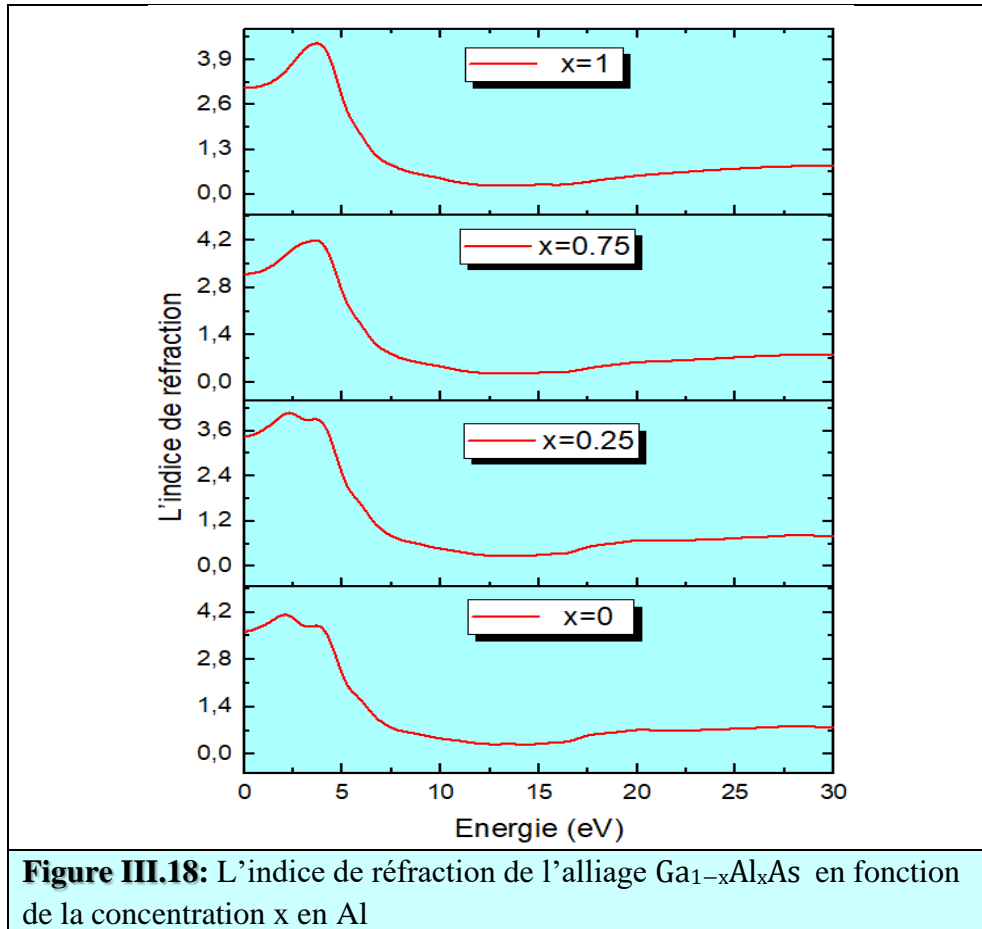
A partir de la figure (III. 17), on peut maintenant observer que les spectres de la partie réelle augmentent avec l'augmentation de l'énergie du photon à l'extérieur de la région délimitée par (1.88, 6.38 eV), par (2.13, 6.37 eV), par (3.03, 6.31 eV) et par (3.36, 6.28 eV) de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ pour les concentrations $x = 0, 0.25, 0.75$ et 1 respectivement. En revanche et à l'intérieur de ces régions les parties réelles diminuent avec l'augmentation de l'énergie.



La constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)$ est obtenue comme la limite de la partie réelle de la fonction diélectrique près des fréquences nulles. Pour l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ la constante $\epsilon_1(0)$ est de 13,240, 11,974, 10,241 et 9,505 pour les concentrations $x = 0, 0.25, 0.75$ et 1 , respectivement. D'après nos résultats, on remarque que la constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)$ diminue avec l'accroissance de la concentration x . Notre résultat est proche à la valeur expérimentale (10.9[18]) et avec d'autre valeur théorique (14.13 [12]) à $x=0$. Pour $x=1$ on a trouvé que la valeur de constant diélectrique statique obtenu par l'approximation (GGA) et globalement en bon accord avec la valeur théorique (7.644 [12]).

La propagation du faisceau à travers un milieu transparent est décrite par l'indice de réfraction n [19, 20] qui est défini par la relation suivante :

$$n(\omega) = \left[\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} + \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} / \sqrt{2} \quad (\text{III.6})$$

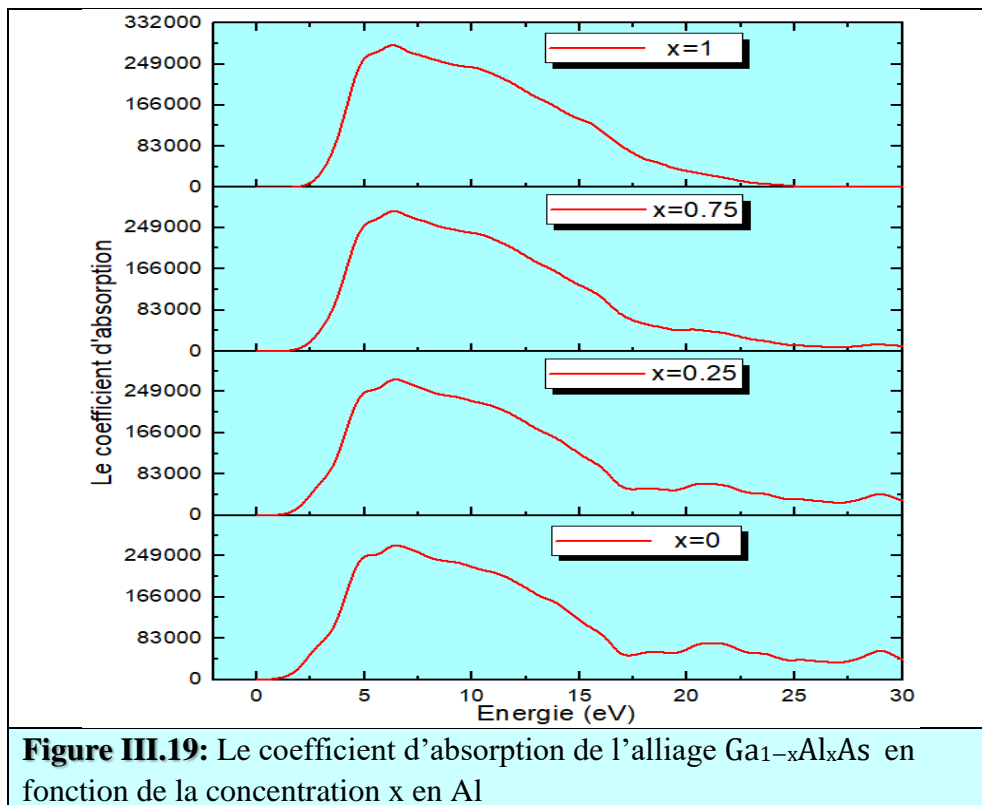


A partir de cette courbe, on remarque que le spectre d'indice de réfraction possède la même allure que le spectre de la partie réelle de la fonction diélectrique pour l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. On observe clairement que l'indice de réfraction prend des valeurs maximales aux énergies 1.88, 2.13, 3.03 et 3.36 eV pour les compositions en Al ($x=0, 0.25, 0.75$ et 1), respectivement. Selon notre calcul, on trouve que l'indice de réfraction statique $n(0)$ prend les valeurs 3,639, 3,460, 3,200 et 3,083 pour $x=0, 0.25, 0.75$ et 1, respectivement. nos résultat est proche à la valeur expérimentale (3.28[18] et 3.00[21]) et avec d'autre valeur théorique (2.70 [12] et 2.833[22]) a $x=0$. Pour $x=1$ on a trouvé que la valeur de constant diélectrique statique obtenu par l'approximation (GGA) et globalement en bon accord avec la valeur théorique (2.76 [12]). En analysant les résultats précédents, on voit bien que lorsque la concentration x de Al augmente de 0 à 1 (en allant de GaAs à AlAs), l'indice de réfraction statique $n(0)$ diminue.

L'absorption de la lumière par un milieu est caractérisée par le coefficient d'absorption α , défini comme étant la fraction de la lumière absorbée dans une unité de longueur du milieu il est défini par la relation suivant [19, 20].

$$\alpha(\omega) = 2\sqrt{2}\pi \left[\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} / \lambda \quad (\text{III.7})$$

La figure (III.19) montre la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans l'intervalle (0-30 eV). A partir de la figure (III.19), on remarque que les seuils d'absorption fondamentaux commencent à environ 0.76, 1.06, 1.54 et 1.91 eV. Ces valeurs correspondent aux gaps d'énergie pour GaAs, $\text{Ga}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$, $\text{Ga}_{0.25}\text{Al}_{0.75}\text{As}$, et AlAs, respectivement.



III.6. Propriétés élastiques

Les propriétés élastiques des solides jouent un rôle très important dans la détermination de la résistance des matériaux. Elles ont un grand intérêt pour connaître des informations importantes sur la mécanique et les propriétés dynamiques des matériaux. Les propriétés élastiques sont également liées thermodynamiquement avec la chaleur spécifique, la température de Debye, ... etc. Pour un matériau qui se cristallise dans une structure cubique, le nombre de constantes élastiques se réduit par symétrie à trois constantes C_{ij} indépendantes C_{11} , C_{12} et C_{44} .

Les valeurs obtenues des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration x en Al sont représentés dans le **tableau III.4**.

Tableau III.4 : Les constants élastiques (C_{ij} en GPa) de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ comparés à d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

Structures		C_{ij} (GPa)		
		C_{11}	C_{12}	C_{44}
GaAs	Nos calculs	108.3621	45.679	56.965
	Autres calculs	105.748 ^a	39.518 ^a	71.213 ^a
	Exp	119 ^b	53.8 ^b	59.5 ^b
$Ga_{0.75}Al_{0.25}As$	Nos calculs	111.227	48.132	58.653
	Autres calculs			
$Ga_{0.25}Al_{0.75}As$	Nos calculs	116.612	52.637	60.395
	Autres calculs			
AlAs	Nos calculs	119.191	54.994	61.125
	Autres calculs	110.31 ^c	55.17 ^c	54.42 ^c
	Exp	119.90 ^d	57.50 ^d	56.60 ^d

^aRef.[23], ^bRef.[24], ^cRef.[14], ^dRef.[25]

On a constaté que la concentration d'Aluminium "Al" augmente, les constants élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{33}) augmentent, comme illustré dans le **tableau (III.4)**.

Pour un cristal cubique, les critères de stabilité généralisés sont[26]:

$$\begin{aligned}
 (C_{11} - C_{12}) &> 0, \\
 C_{11} > 0, C_{44} &> 0, \\
 (C_{11} + 2C_{12}) &> 0
 \end{aligned}
 \tag{III.8}$$

D'après ces résultats, nous constatons que l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ est mécaniquement stable pour toutes les valeurs x car les constantes élastiques calculées respectent les conditions de stabilité cubique dans l'équation (III. 8).

Le module de compression B , le module de cisaillement G , le module de Young E et le coefficient de Poisson pour les différentes concentrations ($x= 0, 0.25, 0.75$ et 1) de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ sont rassemblés dans le **tableau III.5**.

Pour la structure cubique, les expressions suivantes sont utilisées pour calculer le module de compression B et de cisaillement G approximés dans les limites de Voigt et de Reuss:

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (\text{III.9})$$

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5 \quad (\text{III.10})$$

$$G_R = 5(C_{11} - C_{12})C_{44}/3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44} \quad (\text{III.11})$$

Dans l'approximation de Voigt-Reuss-Hill, le module de compression B et le module de cisaillement G sont représentés par:

$$B_H = (1/2)(B_V + B_R) \quad (\text{III.12})$$

$$G_H = (1/2)(G_V + G_R) \quad (\text{III.13})$$

Tableau III.5 : Le module de compression (B), le module de cisaillement (G), le module de Young (E), le coefficient de poisson (σ), le B/G et le facteur d'anisotropie A de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ en comparaison avec des autres résultats théoriques et expérimentaux disponibles.

		$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$			
		$x=0$	$x=0.25$	$x=0.75$	$x=1$
B	Nos calculs	66.57	69.16	73.96	76.39
	Autres calculs	68.778 ^a , 75.5 ^b			72.031 ^c , 82.000 ^d
G	Nos calculs	44.82	45.73	46.80	47.20
	Autres calculs	51.211 ^a , 32.6 ^b			42.67 ^c
E	Nos calculs	109.82	112.42	115.94	117.42
	Autres calculs	123.084 ^a , 85.5 ^b			107.57 ^c
σ	Nos calculs	0.225	0.229	0.239	0.244
	Autres calculs	0.201 ^a			0.26 ^c
B/G		1.48	1.51	1.58	1.62
A		1.82	1.86	1.89	1.90

^aRef.[27], ^bRef.[24], ^cRef.[14], ^dRef.[28]

Ensuite, le module de Young E et le coefficient de Poisson σ peuvent être obtenus par :

$$E = \frac{2BG}{3B + G} \quad (\text{III.14})$$

$$\sigma = \frac{3B - 2G}{6B + 2G} \quad (\text{III.15})$$

Pour un matériau isotrope, A est égal à 1, alors que n'importe quelle valeur plus petite ou plus grande que 1 indique l'anisotropie, le facteur d'anisotropie « A » est calculé par l'expression[29] :

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{12} - C_{12}} \quad (\text{III.16})$$

On sait que la valeur du rapport B/G (le critère Pugh) [30] est utilisée comme critère qui permet la séparation entre la ductilité et la fragilité des matériaux. Lorsque ce rapport ($B/G > 1.75$) on peut considérer le matériau comme ductile sinon il est fragile. D'après le tableau (II.8), on peut constater que nos matériaux sont fragiles.

D'après le **Tableau (III.6)**, on remarque que :

- ☐ On note que les valeurs du module de compression, présentées dans le tableau (III.6) et calculées à partir des constantes élastiques, possède presque la même valeur que celle obtenue à partir des points de lissage E (V) en utilisant l'équation d'état de Murnaghan.
- ☐ On constate que les valeurs de constants élastiques, du module de compression B , le module de cisaillement G et le module de Young E augmentent avec l'augmentation de la concentration x (Al).
- ☐ Nous voyons que la valeur de A est tout différente de un, ce qui indique que l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ pour toutes les valeurs x est des matériaux anisotropes élastiquement.
- ☐ Les valeurs de rapport B/G sont inférieurs à 1.75 ce qui signifie que pour n'importe quel concentration de l'atome Al, l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ est un matériau fragile.
- ☐ Le module de compression B est plus élevé en valeur comparé au module de cisaillement G . Par conséquent, le matériau étudié est plus résistifs au changement de volume (compression) qu'au changement de forme (cisaillement).
- ☐ Les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) et le module de compression (B), le module de cisaillement (G), le module de Young (E), le coefficient de poisson (σ) de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ en fonction de la concentration x en Al obtenus sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques .

III.7. Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, optiques et élastiques de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ en fonction de la concentration x en Al dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), nous avons mené notre travail en utilisant la méthode ab initio des pseudopotentiels et ondes planes (PP-PW).

- ↻ L'étude des propriétés structurales de cet alliage a montré que le paramètre de réseau et le module de compression de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ sont généralement comparables avec les valeurs théoriques et les données expérimentales disponibles dans la littérature.
- ↻ Le paramètre du réseau diminue avec l'augmentation de la concentration x d'Al. Cette décroissance est due au rayon atomique de l'atome Gallium qui est plus élevée que celle de l'atome d'Aluminium. Par contre le module de compression augmente.
- ↻ Nos calculs de la structure électronique l'alliage ternaire pour les concentrations ($x=0, 0,25, 0.75$ et 1) indique la présence d'un gap direct au point G, ce qui est en accord avec l'expérience et les résultats de calculs ab initio d'autres auteurs.
- ↻ Les constantes élastiques de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ croissent avec l'augmentation de la concentration x .
- ↻ On constate que les valeurs de constants élastiques, du module de compression B , le module de cisaillement G et le module de Young E augmentent avec l'augmentation de la concentration x (Al).
- ↻ Les valeurs des paramètres d'anisotropie A obtenues sont supérieures à 1 indiquent que l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ pour toutes les valeurs de x présente un comportement anisotrope.
- ↻ L'étude des propriétés élastiques a confirmé la stabilité mécanique de l'alliage ternaire pour les différentes concentrations d'Aluminium.
- ↻ Les valeurs de rapport B/G sont inférieures à 1.75 ce qui signifie que pour n'importe quel concentration de l'atome Al, l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ est un matériau fragile.

Références

- [1] M. Segall *et al.*, "First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code," *Journal of physics: condensed matter*, vol. 14, no. 11, p. 2717, 2002.

- [2] S. J. Clark *et al.*, "First principles methods using CASTEP," *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, vol. 220, no. 5-6, pp. 567-570, 2005.
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple," *Physical review letters*, vol. 77, no. 18, p. 3865, 1996.
- [4] D. Hamann, M. Schlüter, and C. Chiang, "Norm-conserving pseudopotentials," *Physical review letters*, vol. 43, no. 20, p. 1494, 1979.
- [5] B. G. Pfrommer, M. Côté, S. G. Louie, and M. L. Cohen, "Relaxation of crystals with the quasi-Newton method," *Journal of Computational Physics*, vol. 131, no. 1, pp. 233-240, 1997.
- [6] F. Birch, "Finite strain isotherm and velocities for single-crystal and polycrystalline NaCl at high pressures and 300 K," *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, vol. 83, no. B3, pp. 1257-1268, 1978.
- [7] L. Vegar, *Z. Phys*, vol. 5, p. 7, 1921.
- [8] K.H. Hellwege, "Landolt-Bornstein(Eds.), Numerical Data, New Series, Group III," *Springer, New York*, vol. Vol. 17, 1982
- [9] O. Nemiri *et al.*, "Structural, electronic and thermal properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ternary alloys: Insights from DFT study," *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 92, pp. 140-146, 2019.
- [10] M. Yang, B. Chang, G. Hao, H. Wang, and M. Wang, "Optoelectronic properties of GaN, AlN, and GaAlN alloys," *Optik*, vol. 126, no. 22, pp. 3357-3361, 2015.
- [11] R. Srivastava, P. Yadav, S. Agrawal, B. Agrawal, and S. Kumar, "A first-principles study of structural and electronic properties of $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ alloys," *Solid State Communications*, vol. 118, no. 9, pp. 479-484, 2001.
- [12] R. MOUSSA, "Étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage quaternaire quadratique GaAlAsP par la méthode ab- GaAlAsP par la méthode ab-initio," UNIVERSITE DJILLALI LIABES (SIDI BEL ABBES), 2016.
- [13] A. Abdiche *et al.*, "First principle study of structural and electronic properties of cubic quaternary $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_1-y\text{N}_y$ alloys," *Solid State Communications*, vol. 206, pp. 56-64, 2015.
- [14] G. Benabdellah and K. Benkabou, "Structural, elastic, and optoelectronic properties of ternary alloy $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 544, pp. 52-60, 2018.
- [15] X. Yu, Y. Du, B. Chang, Z. Ge, and H. Wang, "Study on the electronic structure and optical properties of different Al constituent $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$," *Optik*, vol. 124, no. 20, pp. 4402-4405, 2013.
- [16] O. Madelung, "Physical data," in *Semiconductors—Basic Data*: Springer, 1996, pp. 5-298.
- [17] S. Adachi, "GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications," *Journal of Applied Physics*, vol. 58, no. 3, pp. R1-R29, 1985.
- [18] S. Tripathy, "Refractive indices of semiconductors from energy gaps," *Optical materials*, vol. 46, pp. 240-246, 2015.
- [19] M. Dressel and G. Grüner, "Electrodynamics of solids: optical properties of electrons in matter," ed: American Association of Physics Teachers, 2002.
- [20] M. Fox, "Optical Properties of Solids: Oxford University Press," *New York*, 2010.
- [21] R. R. Reddy *et al.*, *J. Alloys Compd*, vol. 473, p. 28, 2009.
- [22] F. Annane, H. Meradji, S. Ghemid, and F. E. H. Hassan, "First principle investigation of AlAs and AlP compounds and ordered $\text{AlAs}_{1-x}\text{Px}$ alloys," *Computational Materials Science*, vol. 50, no. 2, pp. 274-278, 2010.
- [23] S. Menezla *et al.*, "Ab-initio DFT FP-LAPW GGA and LDA TB-mBJ and SO theoretical study of structural and elastic properties of Zinc-Blende crystal phase $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ alloys," *Superlattices and Microstructures*, vol. 88, pp. 18-31, 2015.

- [24] J. Blakemore, "Semiconducting and other major properties of gallium arsenide," *Journal of Applied Physics*, vol. 53, no. 10, pp. R123-R181, 1982.
- [25] M. Krieger, H. Sigg, N. Herres, K. Bachem, and K. Köhler, "Elastic constants and Poisson ratio in the system AlAs–GaAs," *Applied Physics Letters*, vol. 66, no. 6, pp. 682-684, 1995.
- [26] M. Born and K. Huang, "Dynamical Theory of Crystal Lattices, édité par Clarendon," ed: Oxford, 1956.
- [27] S. Gagui *et al.*, "Ab-initio study on the phase transition, elastic, optoelectronic, and thermodynamic properties of GaAs_{1-x}Sb_x," *Optik*, vol. 219, p. 165253, 2020.
- [28] K.-H. Hellwege and O. M. (Eds.), "Semi-conductor, intrinsic properties of Group IV elements and III–V, II–VI and I–VII compounds, Landolt- Bornstein New Series, Group III," *Pt Springer*, vol. vol. 22, Berlin, 1982.
- [29] V. Tvergaard and J. W. Hutchinson, "Microcracking in ceramics induced by thermal expansion or elastic anisotropy," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 71, no. 3, pp. 157-166, 1988.
- [30] S. Pugh, "XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 45, no. 367, pp. 823-843, 1954.

Conclusion Générale

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, optiques et élastiques de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ en fonction de la concentration Al ($x=0, 0.25, 0.75$ et 1) par la méthode du pseudo-potentiel et ondes planes (PP-PW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémentée dans le code CASTEP. Le potentiel d'échange et de corrélation sont traités dans le cadre de l'approximation du Gradient Généralisé (PBE-GGA). Dans cette conclusion, nous tenons à souligner les points essentiels suivants :

☆ Propriétés structurales

- ☐ Le paramètre de maille diminue avec l'augmentation de la concentration en Aluminium. Cette décroissance est due au rayon atomique de l'atome Gallium qui est plus élevée que celle de l'atome d'Aluminium.
- ☐ Le module de compression augmente avec l'augmentation de la concentration x ; ce comportement suggère que lorsque on augmente la concentration d'Aluminium (Al) (x augmente de $x=0$ à $x=1$) ces matériaux deviennent plus durs et donc moins compressibles, par contre la dérivée du module de compression (B') décroît avec l'augmentation de même concentration.

🕒 Propriétés électroniques

- ☐ Le gap de l'alliage ternaire augmente en augmentant la composition x (Al).
- ☐ L'alliage ternaire a un gap direct pour les concentrations ($x=0, 0.25, 0.75$ et 1) ou le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au point G de la zone de Brillouin.

🕒 Propriétés optiques

- ☐ La constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)$ diminue avec l'accroissance de la concentration x .
- ☐ L'indice de réfraction statique $n(0)$ diminue avec l'augmentation de la concentration x de Al.

🕒 Propriétés élastiques

- ☒ Les constants élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) augmentent avec l'augmentation de la concentration de d'Aluminium (Al)
- ☒ L'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ est mécaniquement stable pour toutes les valeurs x car les constantes élastiques calculées respectent les conditions de stabilité cubique.
- ☒ Les valeurs du module de compression calculées à partir des constantes élastiques, possède presque la même valeur que celle obtenue à partir des points de lissage E (V) en utilisant l'équation d'état de Murnaghan.
- ☒ Les valeurs du module de compression B , le module de cisaillement G et le module de Young E augmentent avec l'augmentation de la concentration x (Al).
- ☒ La valeur de A est tout différente de un, ce qui indique que l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ pour toutes les valeurs x est des matériaux anisotropes élastiquement.
- ☒ Les valeurs de rapport B/G sont inférieurs à 1.75 ce qui signifie que pour n'importe quel concentration de l'atome Al, l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ est un matériau fragile.

Tous les résultats obtenus tels que les propriétés structurales, électroniques, optiques et élastiques sont en bon accord avec ceux obtenus par d'autres travaux théoriques et les résultats expérimentaux existant à la littérature.

Résumé

المخلص :

تُظهر أشباه الموصلات III-V أداءً متميزًا عند استخدامها في الأجهزة الإلكترونية الضوئية والتطبيقات الأخرى في تطوير التقنيات الجديدة. الهدف من هذا العمل هو دراسة الخواص التركيبية والإلكترونية والبصرية والمرنة لسبائك $Ga_{1-x}Al_xAs$ بدلالة التركيز x ، استنتجنا أن معامل الشبكة يقل مع زيادة التركيز في الألومنيوم. تزداد الفجوة في الشبكة الثلاثية لـ $Ga_{1-x}Al_xAs$ مع زيادة التركيز. ثابت العزل الكهربائي الساكن $\epsilon_1(0)$ ومعامل الانكسار الساكن $n(0)$ يتناقص بزيادة التركيز x وتزداد ثوابت المرونة (C_{11} و C_{12} و C_{44}) مع زيادة تركيز الألمنيوم (Al). وفي النهاية، تكون الشبكة الخاصة بنا مستقرة ميكانيكيًا لجميع القيم x لأن الثوابت المرنة المحسوبة تحترم شروط الاستقرار التكميلي.

الكلمات المفتاحية: CASTEP, GGA, GaAs, $Ga_{1-x}Al_xAs$, الخصائص الإلكترونية, الضوئية و المرئية.

Abstract :

III-V semiconductors exhibit exceptional performance when used in optoelectronic devices and other applications in the development of new technologies. The objective of this work is to study the structural, electronic, optical and elastic properties of the $Ga_{1-x}Al_xAs$ alloy as a function of Al concentration. It was concluded that the lattice parameter decreases with increasing Al concentration. The gap of the ternary $Ga_{1-x}Al_xAs$ alloy increases with increasing x (Al) concentration. The static dielectric constant $\epsilon_1(0)$ and the static refractive index $n(0)$ decrease with increasing Al concentration x . The elastic constants (C_{11} , C_{12} and C_{44}) increase with increasing concentration of Aluminum (Al). And finally our alloy is mechanically stable for all x -values because the calculated elastic constants respect the cubic stability conditions.

Keywords: CASTEP, GGA, GaAs, $Ga_{1-x}Al_xAs$, electronic, optical and elastic properties.

Résumé :

Les semiconducteurs III-V présentent des performances exceptionnelles lorsqu'ils sont utilisés dans des dispositifs optoélectroniques et d'autres applications dans le développement de nouvelles technologies. L'objectif de ce travail est d'étudier les propriétés structurales, électroniques, optiques et élastiques de l'alliage $Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction de la concentration de Al. On a conclu que le paramètre de maille diminue avec l'augmentation de la concentration en Aluminium. Le gap de l'alliage ternaire de $Ga_{1-x}Al_xAs$ augmente en augmentant la concentration x (Al). La constante diélectrique statique $\epsilon_1(0)$ et l'indice de réfraction statique $n(0)$ diminue avec l'augmentation de la concentration x de Al. Les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) augmentent avec l'augmentation de la concentration de d'Aluminium (Al). Et en fin notre alliage est mécaniquement stable pour toutes les valeurs x car les constantes élastiques calculées respectent les conditions de stabilité cubique.

Mots clés : CASTEP, GGA, GaAs, $Ga_{1-x}Al_xAs$, electronic, optical and elastic properties.