

Introduction

Dans ce travail nous présentons une étude d'optimisation de Lasers à semiconducteurs émettant dans l'infrarouge et le visible. Ces Lasers sont conçus sur la base de nanostructures semiconductrices à puits quantiques réalisées à partir de matériaux composés III-V du Bismuth ; les alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x qui combinent le binaire GaBi avec les composés III-V du Gallium ; GaAs et GaN.

- Les matériaux III-V à base de Bismuth présentent un très grand intérêt pour de nombreuses applications potentielles touchant des domaines très variés. Citons d'abord celui des technologies à haut rendement telles que les cellules solaires, les transistors Bipolaires à hétérojonction, la spintronique pour les mémoires et les ordinateurs quantiques du futur, et enfin, les composants optoélectroniques dans pratiquement toute la gamme du spectre électromagnétique optique et, en particulier dans les domaines infrarouge et visible.

- Ces matériaux à base de Bismuth tels que GaN_{1-x}Bi_x, GaAs_{1-x}Bi_x sont très peu étudiés car ils sont très difficiles à fabriquer. Ceci est dû au fait que leurs structures cristallines sont très désaccordées (highly mismatched), car elles possèdent des atomes qui sont très éloignés les uns des autres sur la même colonne du Tableau périodique des éléments: l'Azote (Z=7), l'Arsenic (Z=33) et le Bismuth (Z=83).

- Cependant, ces matériaux à base de bismuth sont très intéressants car leurs alliages ternaires GaN_{1-x}Bi_x et GaAs_{1-x}Bi_x, couvrent en principe un large domaine de longueurs d'ondes qui va de l'Infrarouge lointain dans le semimétal GaBi où $E_g = -1.51$ eV et jusqu'à l'Ultra-violet dans GaN où $E_g = 3.4$ eV, en passant par le Visible pour GaN_{1-x}Bi_x à $x > 10\%$.

Les propriétés de ces matériaux de Bismuth sont en fait similaires à celles des matériaux semiconducteurs II-VI faible largeur de bande interdite du système HgTe-CdTe qui permettent également de couvrir la gamme de longueurs d'ondes allant de l'Infrarouge lointain dans le semimétal HgTe qui a un gap négatif $E_g = -0.21\text{eV}$ et jusqu'au proche Infrarouge dans CdTe qui a un gap positif $E_g = 1.45\text{eV}$. Cependant, ce système HgTe-CdTe, connaît des problèmes technologiques essentiellement liés à l'évaporation rapide mercure Hg qui empêche la fabrication de matériaux $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ de la qualité requise pour les applications optoélectroniques. Ces difficultés persistent malgré la sophistication des techniques de croissance telles que l'épitanie par jets moléculaires (MBE) et la méthode de dépôt chimique en phase vapeur d'organométalliques (MOCVD) et la recherche sur les techniques de dépôt et d'incorporation du Hg.

- Par ailleurs, GaAs_{1-x}Bi_x est caractérisé par un fort couplage Spin-Orbite, ce qui conduit à de fortes interactions et couplages au sein de la bande de valence conduisant à des levées de dégénérescence de la bande SO et également des bandes de trous lourds et de trous légers. Ceci peut être utilisé pour contrôler et éviter les effets de recombinaisons Auger qui limitent sérieusement le gain Laser et donc son bon fonctionnement. Ce fort couplage spin-orbitale conduit également à une forte séparation en énergie entre les états de spin up et ceux de spin down dans la bande de valence. Il en résulte des possibilités d'applications en spintronique.

- De plus, il a été établi que de petites quantités de Bi < 1% ajoutées à GaAs sont suffisantes pour induire une très forte réduction du gap (bowing) bien en dessous d'une variation linéaire correspondant au comportement du cristal virtuel. Ceci promet la réalisation de composants optoélectronique dans l'infrarouge moyen, pour des énergies bien au dessous du gap de GaAs et ce, pour des couches faiblement dopées en Bi, c'est-à-dire peu désaccordées de maille par rapport à GaAs. En d'autres termes cette technologie peut bénéficier de celle de GaAs qui est largement maîtrisée et qui peut être utilisé comme substrat et comme barrières dans des nanostructures à puits quantiques.

Donc dans ce travail nous allons procéder à deux études théoriques et de simulation : la méthode ab-initio et la théorie **k.P**. La première étude est effectuée en utilisant le code Wien2k ce programme est basée sur la théorie FP-LAPW les Ondes Planes Augmentées Linéairement avec Potentiel Totale (**F**ull **P**otential **L**inearized **A**ugmented **P**lane **W**ave) cette théorie est basée sur la théorie DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité), le potentiel d'échange et corrélation qui nous avons utilisé dans le calcul c'est les deux approximation

LDA (Approximation Densité Local) et GGA (Approximation du Gradient Généralisée). En utilisant ce code de calcul, nous déterminons les propriétés structurales telles que le volume du maille, la structure cristalline, paramètre du maille et propriétés électroniques telles que la structure de bande, le gap, la densité d'état de ces matériaux III-V à base de bismuth.

Dans la deuxième partie, nous utilisons la théorie **K.P** pour étudier les propriétés des structures lasers, telles que le confinement des porteurs dans les hétérostructures, le gain optique du laser et la densité de courant de seuil de laser.

-Dans le chapitre I nous avons étudié les propriétés des matériaux III-V à base de Bismuth et leurs hétérostructures et nous avons montré l'intérêt des composés du Bismuth et leurs applications potentielles

-Dans le chapitre II, en utilisant la méthode ab-initio, nous étudions les propriétés structurales et électroniques des matériaux Binaires tels que GaAs, GaBi, GaN

- Dans le chapitre III nous avons étudié par la méthode ab-initio, les propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires de III-V à base de Bismuth tels que GaAs_{1-x}Bi_x et GaAs_{1-x}N_x et GaN_xBi_{1-x} où nous montrons les variations du volume du maille et paramètre de maille et l'énergie du gap en fonction de la composition d'alliage de Bismuth.

-Dans le chapitre IV nous avons utilisé la théorie **K.P** pour déterminer les confinements des porteurs dans les hétérostructures à puits quantiques lasers GaAs_{1-x}Bi_x /GaAs et GaN_xBi_{1-x} /GaAs. Nous avons également étudié l'optimisation de ces structures lasers et ceux en déterminant les propriétés optiques telles que le gain laser, la densité de courant de seuil,...

Chapitre 1

Etude des matériaux composés du Bismuth: Intérêt et Applications

1. Introduction
2. Intérêt des domaines Infrarouge et Visible.
3. Les Lasers à Puits Quantiques pour l'Infrarouge et le Visible
4. Intérêt des matériaux GaN_{1-x}Bi_x et GaAs_{1-x}Bi_x et leurs hétérostructures
5. Conclusion

1. Introduction :

Dans ce chapitre, nous étudions les propriétés spécifiques et très intéressantes des alliages semi-conducteurs composés du Bismuth (Bi) tels que GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x ainsi que leurs applications potentielles.

Parmi les matériaux III-V du tableau périodique, nous nous intéressons plus particulièrement au composé binaire GaBi ainsi que GaAs, GaN que nous combinons pour obtenir les alliages ternaires qui nous intéressent dans cette étude : GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x.

Les composants optoélectroniques à base de ces alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x couvrent un large domaine de l'infrarouge (GaBi $E_g = -1.45$ eV) jusqu'à l'ultra violet (GaN $E_g = 3.4$ eV) en passant par le visible, donc les alliages sont intéressants, à cause des propriétés de leur alliages ternaires. il présentent plusieurs application et intérêt technologique dans le domaine infrarouge et l'infrarouge lointain. Dans ce chapitre nous allons étudier les propriétés de spectre l'infrarouge et le visible et les application de ce spectre infrarouge puis on discutera les propriétés de lasers à puits quantiques dans les deux domaine infrarouge et le visible et quel est l'avantage de ces matériaux dans le domaine infrarouge. L'intérêt majeur des matériaux à base de bismuth par rapport aux matériaux à base de mercure, parce qu'on ne peut pas fabriquer des matériaux de mercure à cause de l'évaporation du mercure, en plus les lacunes créent des centres de recombinaison non radiatif donc on remplace l'alliage HgCdTe par GaAsBi qui est caractérisé par plusieurs propriétés : grande conductivité thermique, grand mobilité électronique pour obtenir des dispositifs plus performants en communication, le gap et la bande interdite directe ce qui donnent des transition électroniques directes.

On ne peut pas fabriquer l'alliage à base de Bismuth supérieur de 1%, parce que l'atome de Bismuth est très lourd ($Z=83$) par rapport à l'arsenic ($Z=33$), donc il crée des contraintes.

Lorsque la composition du Bismuth dans l'alliage GaAsBi est inférieure de 1%, on le considère comme dilué, donc il va décaler la bande de valence en haut donc l'énergie du gap diminue on appelle ce processus « Redshift »

L'énergie du spin Orbite pour l'atome Bismuth (Bi) va créer un nouveau système car il va décaler l'orbitale du spin -orbite vers le bas, ce processus est très important car il diminue l'effet Auger et fait disparaître les photons.

Dans ce chapitre nous étudierons également les différents types d'hétéro-structure laser pour l'infrarouge et le visible et l'intérêt de ces matériaux dans les applications lasers.

2. Intérêt des domaines Infrarouge et visible :

Le spectre de l'électromagnétisme est composé de plusieurs spectres : visible, Infrarouge, Ultra violet, spectre des ondes radio, rayon X, parmi ces spectres que nous avons étudiés c'est le spectre l'infrarouge, le spectre infrarouge est inférieur au spectre visible, est en dehors du spectre rouge, Le rayonnement infrarouge (IR) est un rayonnement non visible similaire à celui de la lumière visible, et de ce fait invisible, n'est pas visible à l'œil, parmi ces propriétés de l'infrarouge par rapport au visible ce que il absorbe la chaleur, détecte la nature et propriétés des liaisons chimiques dans les molécules, l'infrarouge est un spectre qu'il couvre un large domaine de longueur d'onde de 0.8 μm jusqu'à 200 μm, ce domaine est divisé en 3 parties : Near Infra-red NIR (0.8 μm-1.9 μm), Medium Infra-red MIR (1.9 μm-10 μm), Far Infra-red FIR (10 μm-200 μm) et en représente le schéma du spectre de longueur d'onde (1)

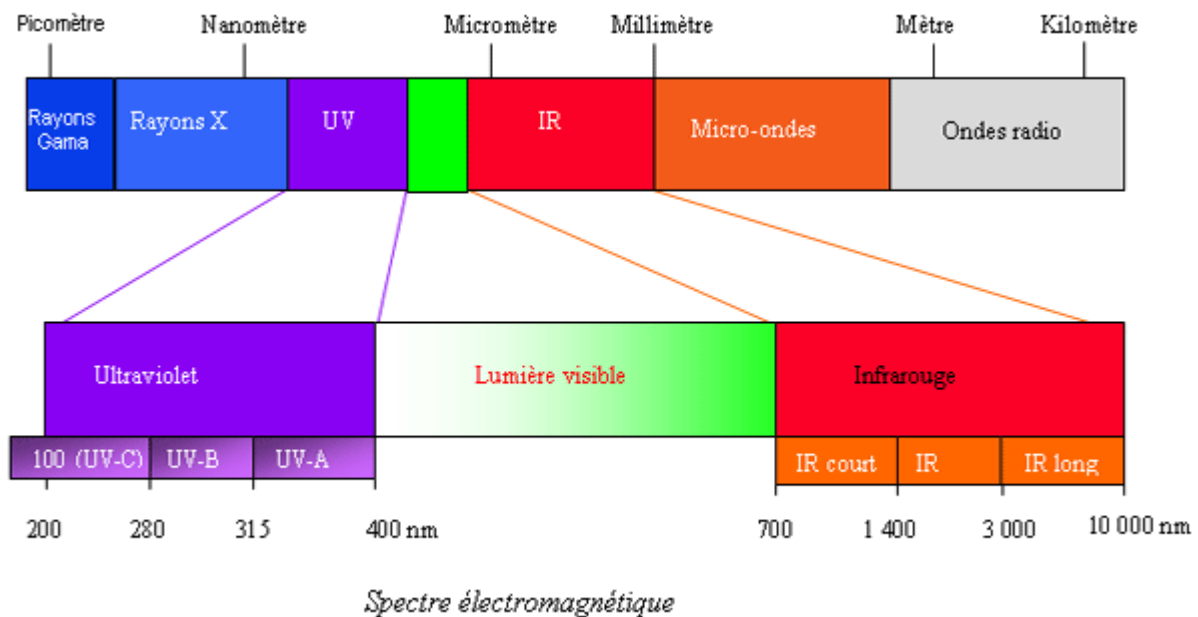


Figure 1.1 : Schéma du spectre de longueur d'onde⁽¹⁾

parmi ces propriétés de l'infrarouge est le rayonnement thermique qui produit de la chaleur. Les rayons infrarouges peuvent aussi être guidés, ce qui leur confirme d'autres propriétés utilisées, le guidage balistique, les détecteurs de mouvements, les télécommandes, la mesure (thermographie, spectroscopie)

2.1. Spectre Proche Infrarouge :

Le spectre proche infrarouge, couvre un large domaine de longueur d'onde de 0.8µm jusqu'à 1.9 µm. La spectroscopie proche infrarouge (NIR - Near InfraRed Spectroscopy) est appliquée dans le domaine proche Infrarouge basée sur le fait que chaque molécule absorbe la lumière de différentes fréquences et par la spectroscopie on analyse le spectre de lumière et on détecte les propriétés et les composés de ces molécules (2)

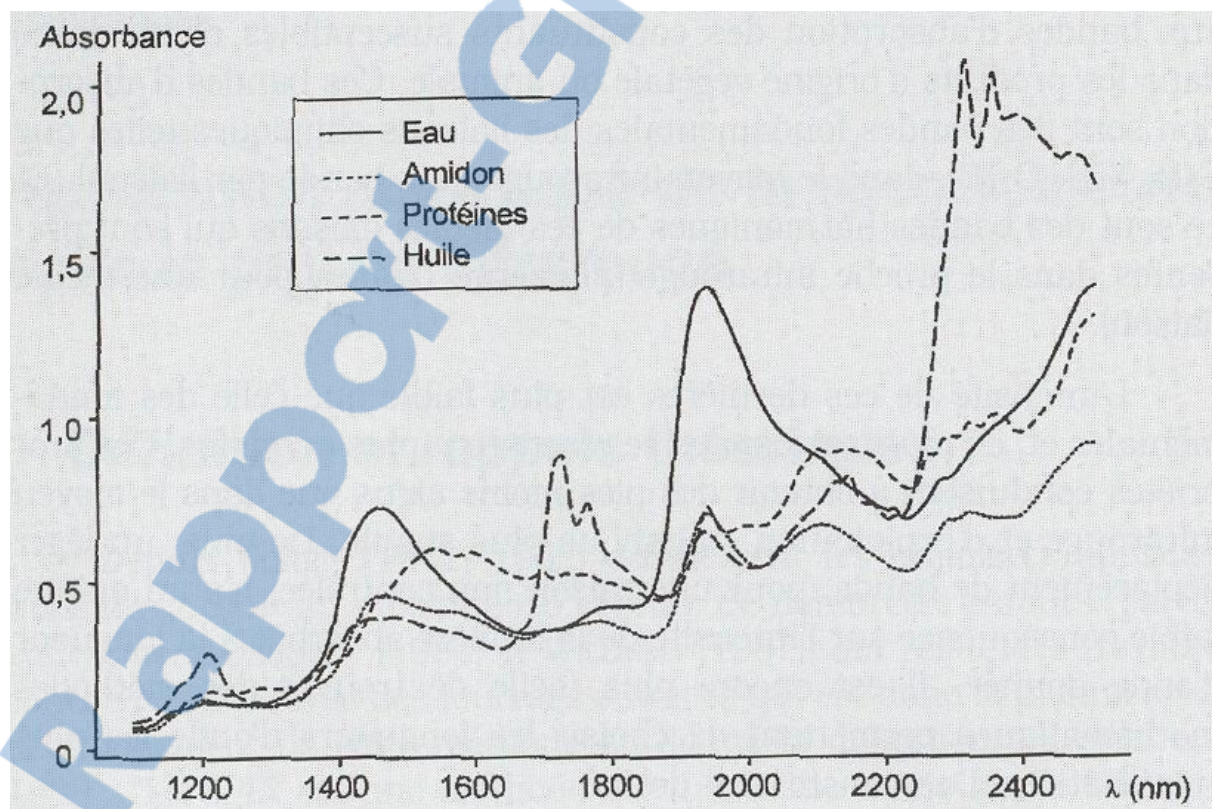


Figure 1.2 : Spectres dans le proche infrarouge de produits purs montrant le recouvrement des bandes spectrales²

2.2. Spectre infrarouge moyen :

Spectre infrarouge moyen (MIR Medium Infra-red) ce spectre est situé juste après le proche infrarouge dans la gamme (1.9µm-10µm) qui est utilisé pour étudier l'agriculture pour cartographier les couvertures végétales, l'atmosphère est en grande partie opaque aux rayonnements du moyen infrarouge qui sont absorbés par la vapeur d'eau.

2.3. Spectre infrarouge lointain :

C'est le dernier spectre de l'infrarouge qui couvre un large domaine du (10µm-200µm).

2.4. Applications

L'intérêt de ce domaine de l'infrarouge dans différentes applications technologiques et leurs applications, parmi celles que nous trouvons sont les applications dans la Spectroscopie, les communications spatiales, militaires, environnementales, médicales.

2.4.1. Spectroscopie

La spectroscopie infrarouge est un moyen de diagnostic permettant de déterminer la nature des liaisons chimiques présentes dans une molécule.

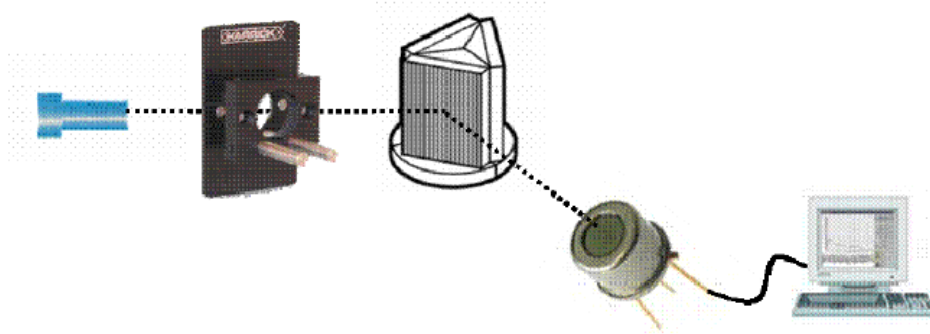


Figure 1.3 :Schéma de spectroscopie infrarouge³

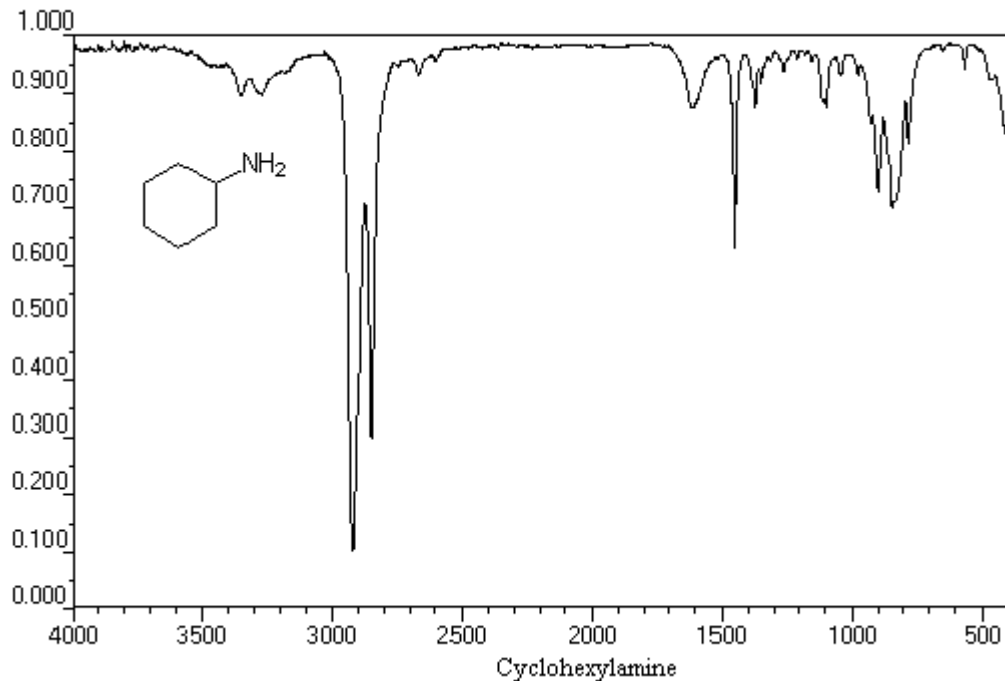


Figure 1.4 : Spectre d'absorption Infrarouge de cyclohexylamine⁴

2.4.2. Communications spatiales

Ce domaine est en domaine de télécommunication ou c'est une technologie optique, le domaine de spectre infrarouge est utilisable par la télédétection pour mesurer la température de sol, des Océan

2.4.3. Militaire :

L'application dans le domaine militaire est l'utilisation des lasers et caméra thermique appliquée dans la gamme de l'infrarouge. Ces caméras sont utilisés dans la détection et la surveillance. Exemple de camera thermique (4)



FLIR Série PT *



Thermo Vision 2000/3000 *

Figure 1.6: les camera thermique⁶

2.4.4. Médicales :

Les rayons infrarouges sont utilisés dans le domaine médical. Avec les nouveau scanners et caméra thermique qui fonctionnent avec des longueurs d'onde dans la gamme de l'infrarouge en peut détecter des cancers chez les malades.

Une nouvelle technologie qui concerne l'infrarouge est l'étude par thermographie infrarouge qui étudie la peau de l'humain ou l'animal pour voir avec précision l'état physiologique, (5)

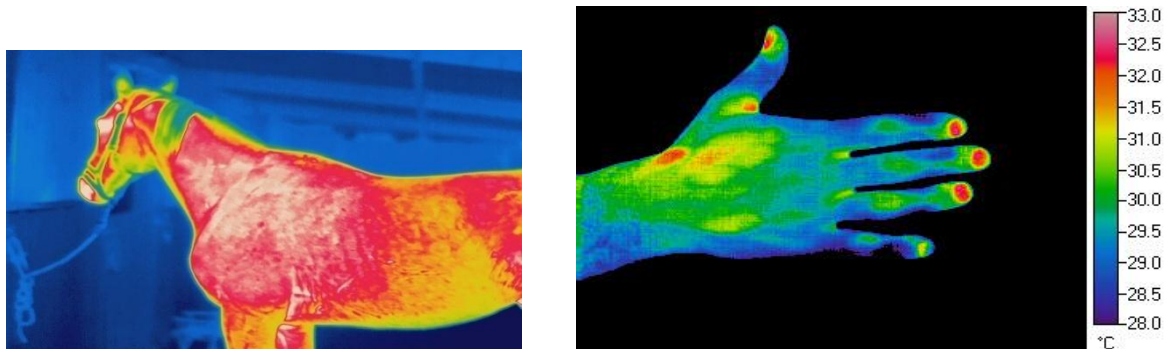


Figure 1.7 : Les images obtenues par thermographie peuvent être réalisées à l'aide des détecteurs de rayonnements infrarouges (caméra à infrarouge)⁷

3. Les Lasers à Puits Quantiques pour l'Infrarouge et le visible

Les lasers a puits quantique sont composés d'hétérostructure à base de matériaux III-V. Ces hétérostructures sont composés de juxtaposition de deux semi conducteur qui forment le puits et la barrière. Le matériau à faible gap et à plus petite affinité électronique forme le puits quantique et le matériau à plus grande valeur de l'affinité électronique forme la barrière.

Il existe plusieurs types de puits quantique trois types de puits quantique : type I, type II, ou type III

3.1.Puits quantique Type I :

Ce puits quantique de type I est caractérisé par le fait que les électrons et les trous sont confinés dans le même puits quantique. Les conditions pour obtenir une hétéro structure de type I sont au nombre de 3 comme suit :

Condition 1 : $E_{g1} > E_{g2}$;

Condition 2 : $e\chi_1 < e\chi_2$;

Condition 3 : $e\chi_1 + E_{g1} > e\chi_2 + E_{g2}$

Où ; E_{g1} est le gap ou l'énergie de la bande interdite du matériau (1) qui forme la barrière

E_{g2} est le gap du matériau (2) qui forme le puits quantique

$e\chi_1$ est l'affinité électronique du matériau (1)

$e\chi_2$ est l'affinité électronique du matériau (2)

Parmi les propriétés qui caractérisent l'hétérostructure de type I, les transitions électroniques entre les états de bandes de valence et de conduction sont des transitions directes car les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau qui forme le puits quantique.

Ces transitions optiques directes ont à leur tour des conséquences très importantes sur les propriétés optoélectroniques dans les récepteurs (photo-détecteurs) et surtout dans les émetteurs de lumière (Diodes Emettrices de Lumière ou LED et les Diodes Lasers), où elles permettent de minimiser la densité de courant de seuil d'émission et de maximaliser le rendement et le gain optiques.

C'est pour ces raisons que les hétérostructures de type I sont très recherchées pour fabriquer des émetteurs de lumière LED et surtout LASER.

niveau du vide

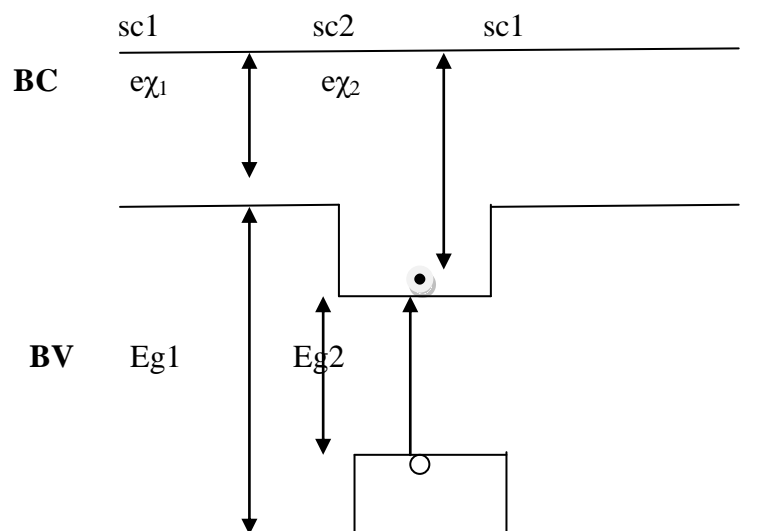


Figure 1.8.Schéma du Puits quantique type I

3.2. Puits quantique type II

Pour ce puits quantique est dite de type II si les électrons et les trous ne sont pas confinés dans le même matériau :

- le matériau SC1 joue le rôle de puits quantique pour les électrons et de barrière de potentiel pour les trous,
- Le matériau SC2 joue le rôle de puits quantique pour les trous et de barrière de potentiel pour les électrons;

Ce puits quantique de type II est différent de ce type I, donc il y aura une conséquence importante : les transitions seront indirectes et, en particulier, les transitions optiques seront indirectes.

Pour ce raisons, les puits quantiques de type II sont évitées pour fabriquer des émetteurs de Lumière LED et surtout LASER utilisant les transitions inter-bandes.

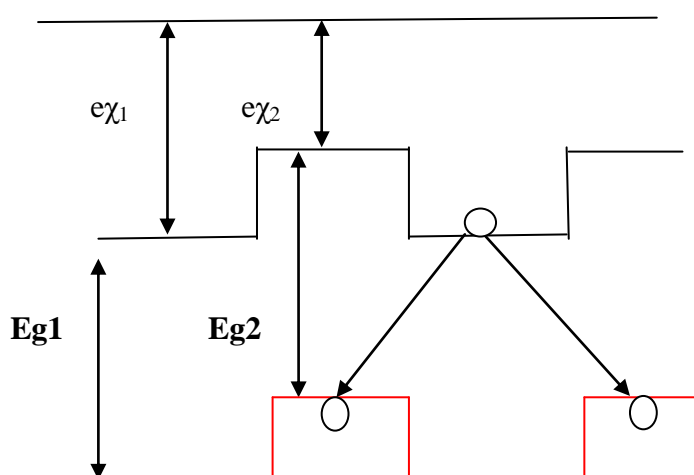


Figure 1.9.Schéma de Puits quantique type II

3.3. Puits quantique type III

Le puits quantique du type III est en fait un cas particulier de puits quantique de type II lorsque la bande de conduction du Semi-conducteur 1 (SC1) a une énergie inférieure à celle de la bande de valence du semi-conducteur 2 (SC2). On dit qu'on a une structure à "gap brisé". Il en résulte une structure typique telle que celle où les électrons confinés dans le puits d'électrons SC1 sont en face des trous confinés dans le puits de trous SC2. Les conséquences sont :

- Absence totale de toute transition directe inter-bandes dans ce type d'hétérostructures,
- Même les transitions indirectes sont éteintes,

Ces hétérostructures de type III sont utilisées surtout pour l'Effet Tunnel dans les composants hyper-fréquences.

Cependant les hétérostructures de type III sont également utilisés dans des cas particuliers de Lasers dont par exemple :

- Les Laser de type III à super-réseau. Exemple Laser à super-réseau d'InAs/GaSb,

La configuration dite de type-III qui est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. Cette situation, appelé aussi configuration semi-métallique,

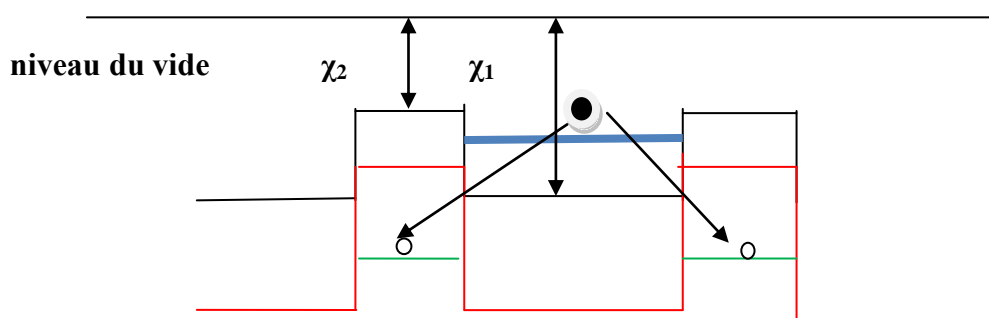


Figure 1.10.Schéma de puits quantique type III

4. Intérêt des matériaux GaN_{1-x}Bi_x et GaAs_{1-x}Bi_x et leurs hétérostructures dans les applications Lasers (versus HgCdTe)

Dans ce travail nous allons étudier l'intérêt des alliages ternaires GaN_xBi_{1-x} et GaAs_{1-x}Bi_x, à cause de leur propriété très intéressantes dans le domaine Optoélectronique

4.1. Structure cristalline :

Les matériaux III-V cristallisent soit dans la phase Zinc Blende tels que : GaAs, GaSb, AlAs, InAs soit dans la phase Wurtzite tels que GaN, InN, AlN

Les alliages à base de bismuth GaAsBi et GaN_xBi_{1-x}, sont composés respectivement de matériaux binaires GaAs et GaBi et de GaBi et GaN

Les matériaux qui cristallisent en phase cubique type Zinc Blend (GaAs, GaBi, GaN) appartiennent au groupe d'espace (F43m) (deux sous réseaux cubique face centre (CFC) translatsés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonal principal. Cette structure est représentée sur la figure 1.11

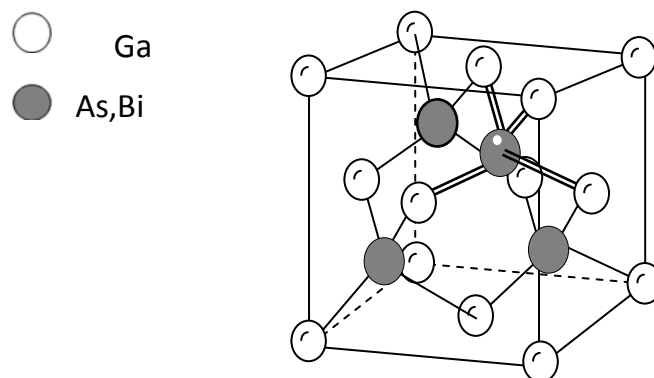
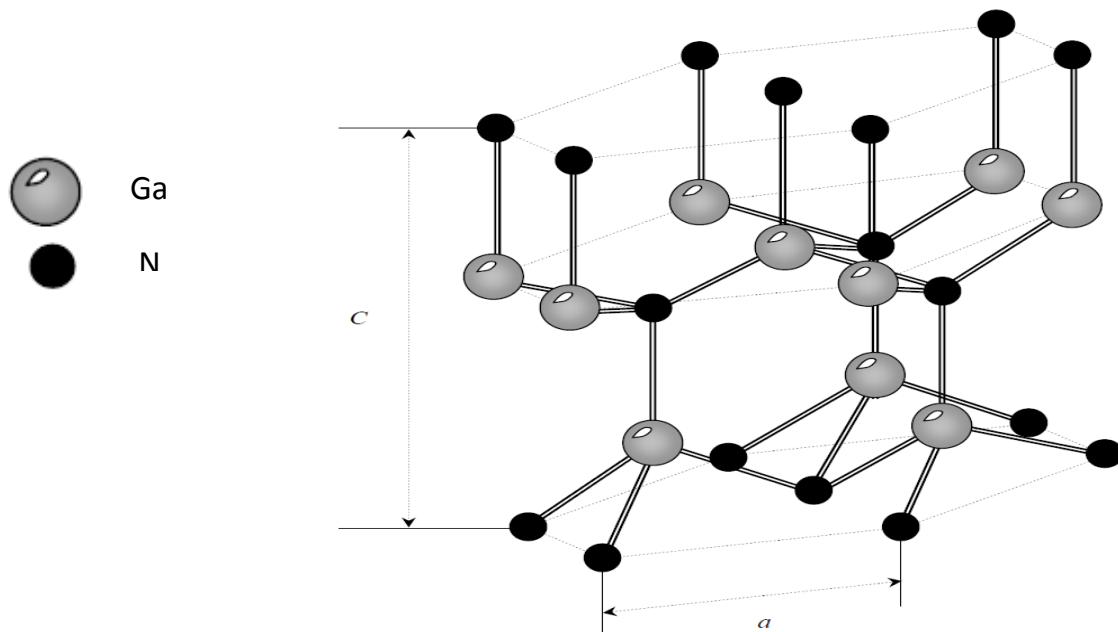


Figure 1. 11 structure Zinc Blende

Le matériau GaN se cristallise naturellement dans la structure Würtzite, c'est la phase la plus stable thermodynamiquement, cette structure appartient au groupe d'espace (P63mc). GaN peut également cristalliser dans la structure Zinc-blende (1). Cette structure est formée de deux sous réseau Hexagonale compact interpénétré de chaque type d'atomes, donc ces t'adire qui contient 4 atome Chaque atome de Ga est entouré par 4 atomes d'azote disposés au Sommet d'un tétraèdre et vice-versa; Cette coordination tétraédrique provoque la symétrie

polaire le long de l'axe hexagonale. L'un des deux sous réseaux est composé d'anions (atomes de type V : N) et l'autre de cations (atomes de type III : Ga), les deux sous réseaux sont décalés par la longueur égale à la Liaison Ga-N $u=3/8=0.3768$. Dans la Würtzite idéale, le long de l'axe c.



Et dans le tableau donne des paramètres théoriques et expérimentaux des deux Binaires GaAs et GaBi

Tableau 1: valeur experimentales de paramètre de maille pour les trois matériaux Binaires GaAs, GaBi, GaN dans la phase Zinc Blende

	GaAs	GaBi	GaN
Valeur expérimentales du paramètre de maille a [Å]	5.65325 ^a	6.33 ^b	4.5 ^a
Valeurs théoriques du paramètre de maille a [Å]	5.649 ^c 5.726 ^d	6.28 ^e	4.46 ^f

A(6) b(9) c(10) d(11) e(12) f(13) g(14)

Dans le tableau 2 : donne des paramètres de maille de GaN expérimentales et théoriques dans la phase Wurtzite

GaN	GaN (Wurtzite)	GaN (Wurtzite)
Paramètre de maille a et c (Å)	A	C
Valeurs expérimentales	3.189 ^a	5.185 ^a
Valeurs théoriques	PP-PW 3.245 ^b HF 3.199 ^c PP-GB 3.15 ^d	

A(7) b(16) c(17) d(18)

4.2. Propriétés électroniques :

Pour la structure de bande pour les trois binaires GaAs et GaN sont caractérisé par un gap direct Γ , et pour le GaBi est caractérisé par un gap indirect, l'énergie gap pour les trois binaires GaAs, GaBi, GaN respectivement 1.45 eV, -1.5 eV, 3.554 eV

A partir de ces énergies on peut déduire que pour le gap du GaBi est -1.5 eV indirect du Γ vers L

	GaAs	GaN	GaBi
Eg (Bande Interdite eV)	1.52 ^a	3.507 ^a	-1.45 ^b
A (affinité électronique)	4.07	4.1 ^c	6.48
SO (Spin-Orbit)	0.36 ^a	0.014 ^a	2.2 ^b

a(7) b(8) c(9)

4.2.1. Variation de l'énergie du gap pour les trois alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x, GaAs_{1-x}N_x, GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth (Bi) et l'Azote (N)

L'équation de variation de l'énergie du gap des différents alliages s'écrivent :

$$E_g(\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x) = (1-x)E_{g(\text{GaAs})} + xE_{g(\text{GaBi})} - b * x * (1-x)$$

$$E_g(\text{GaN}_{1-x}\text{Bi}_x) = (1-x)E_{g(\text{GaAs})} + xE_{g(\text{GaBi})}$$

$$E_g(\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x) = (1-x)E_{g(\text{GaAs})} + xE_{g(\text{GaN})} - b * x * (1-x)$$

Où b c'est le bowing du gap du GaAs_{1-x}Bi_x défini par $b = \frac{\alpha}{1-\beta}$ et α, β sont des paramètres pour l'alliage GaAsBi $\alpha=9.5$, $\beta=10.4$ pour l'alliage le bowing est 25 eV

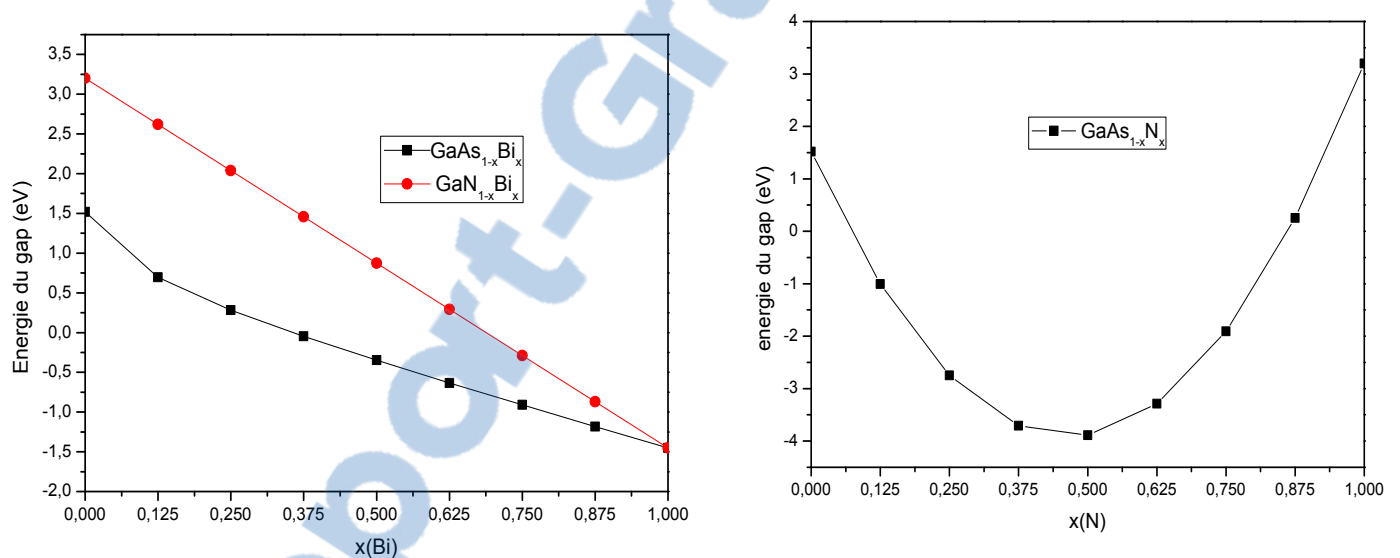


Figure 1.14 : Variation de l'énergie du gap pour les trois alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x, GaAs_{1-x}N_x, GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth (Bi) et l'Azote (N)

4.2.2. Variation de l'énergie du spin Orbite pour les trois alliages ternaires $GaAs_{1-x}Bi_x$, $GaAs_{1-x}N_x$, GaN_xBi_{1-x} en fonction du Bismuth (Bi) et l'Azote (N)

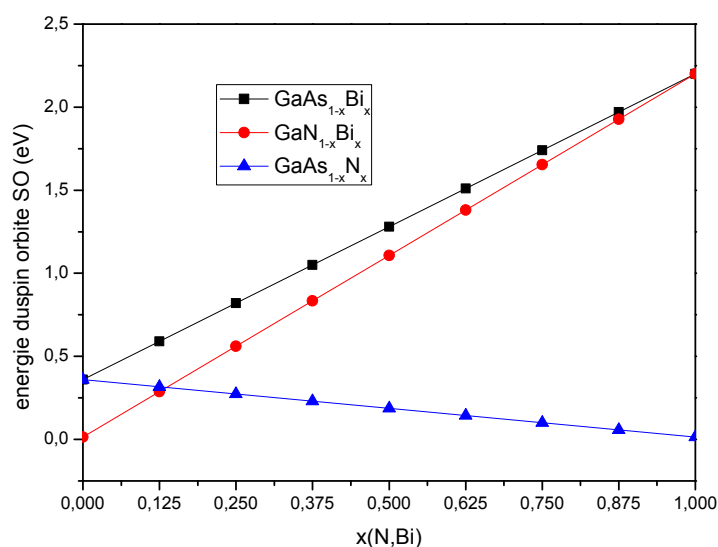


Figure 1.15 Variation de l'énergie du spin Orbite pour les trois alliages ternaires $GaAs_{1-x}Bi_x$, $GaAs_{1-x}N_x$, GaN_xBi_{1-x} en fonction du Bismuth (Bi) et l'Azote (N)

Dans cette figure (1.15) nous représentons la variation de l'énergie du spin orbite pour les trois alliages, nous remarquons l'effet du bismuth dans les deux composés Binaires GaAs et GaN, l'énergie augmente avec l'augmentation du Bismuth (Bi), par contre l'effet de l'azote dans GaAs est négligeable l'énergie est diminuée avec l'augmentation de l'azote (N)

4.2.3. Variation de l'affinité électronique pour les trois alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x, GaAs_{1-x}N_x, GaN_xBi_{1-x} en fonction du Bismuth (Bi) et l'Azote (N)

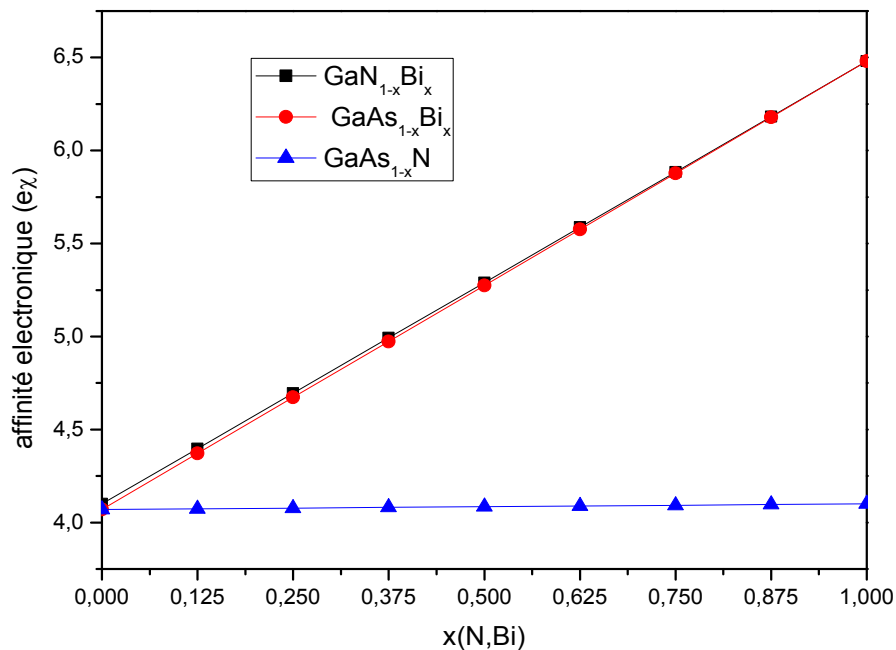


Figure 1.16 : Variation de l'affinité électronique pour les trois alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x, GaAs_{1-x}N_x, GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth (Bi) et l'Azote (N)

Dans cette figure (1.16) nous représentons la variation de l'énergie de l'affinité électronique pour les trois alliages, nous remarquons l'effet du bismuth dans les deux alliages ternaires GaAsBi et GaN_xBi_{1-x}, l'énergie augmente avec l'augmentation du Bismuth (Bi), par contre l'affinité électronique de l'alliage GaAsN reste constante dans toute la gamme de composition de l'azote (N)

Band-offset

a-1GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs

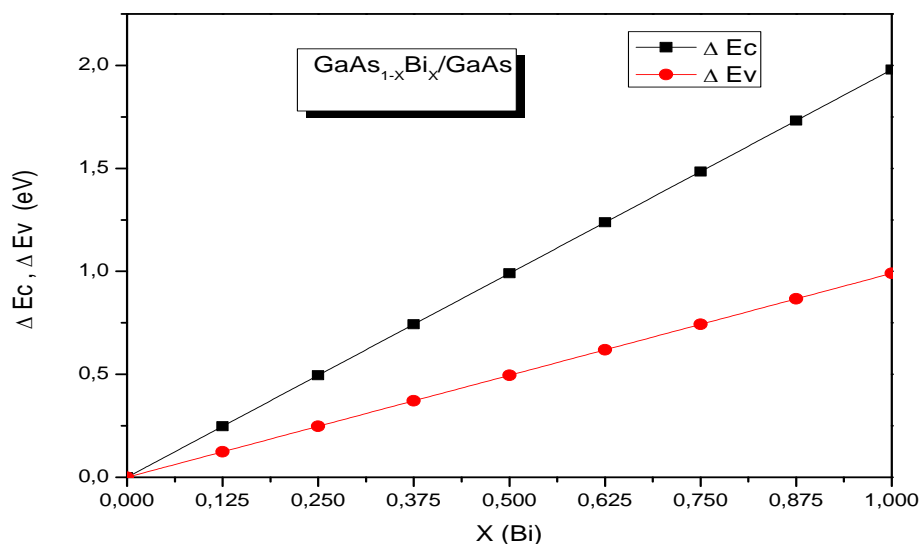


Figure 1.17 variation du band offset de l'heterostructure de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs

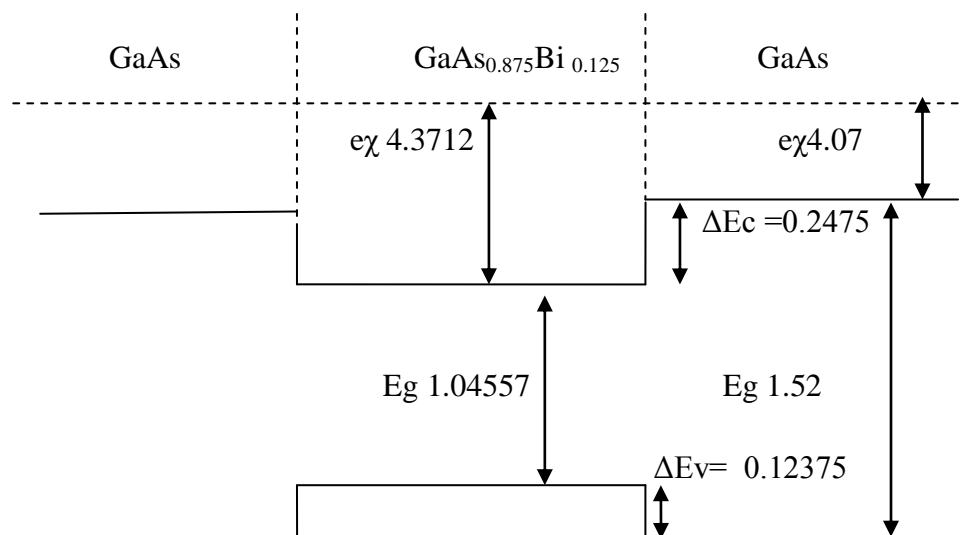


Figure 1.18 :Diagramme d'énergie GaAs_{0.875}Bi_{0.125}/GaAs

Nous représentons le diagramme d'énergie de l'hétérostructure à puits quantique de GaAs_{0.875}Bi_{0.125} /GaAs.

Nous remarquons que le type de cette heterostructure est type I, parce que l'affinité électronique de la barrière GaAs est inférieure à l'affinité électronique du puits GaAs_{0.875}Bi_{0.125}, en plus la somme de l'affinité électronique plus l'énergie de la bande interdite de la barrière GaAs ($E_g=1.52$ eV, $e\chi = 4.07$ eV) est supérieure à celle du puits quantique GaAs_{0.875}Bi_{0.125} ($E_g = 1.1487$ eV, $e\chi = 4.3712$ eV), ce puits quantique est toujours type I pour la gamme de composition du puits où l'énergie du gap est positive non nulle.

a.2. Etude de la contrainte

Sur la figure suivante, nous représentons la variation de la contrainte en fonction du Bismuth.

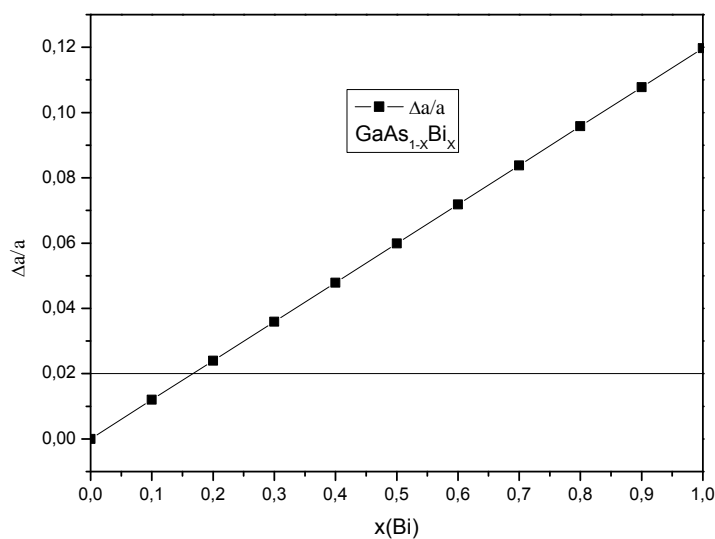


Figure 1.19. Variation de contrainte GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du composé Bismuth (Bi)

cette étude montre que la contrainte est limitée pour les compositions inférieures à $x \leq 0.16$, donc on ne peut pas fabriquer cet alliage pour des compositions supérieures à $x \geq 0.16$ à cause de cette contrainte qui empêche la fabrication de cet alliage.

B-GaN_{1-x}Bi_x/GaAs (ZB)

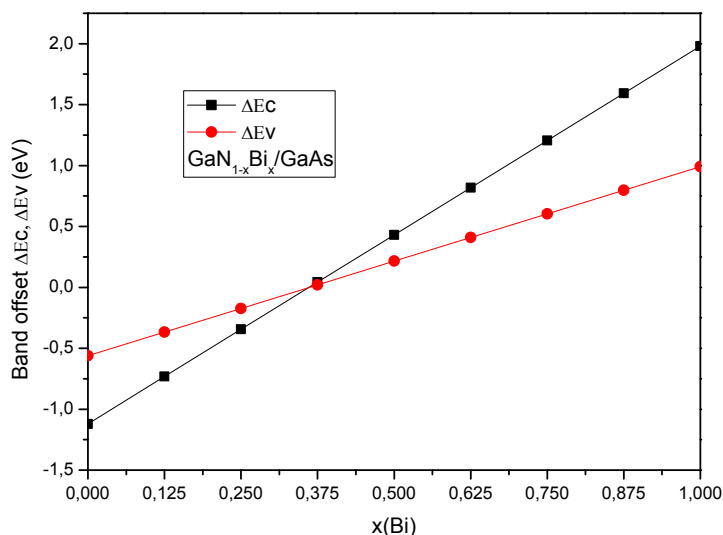


Figure 1.20 variation de bande offset de l'heterostructure GaN_{1-x}Bi_x/GaAs

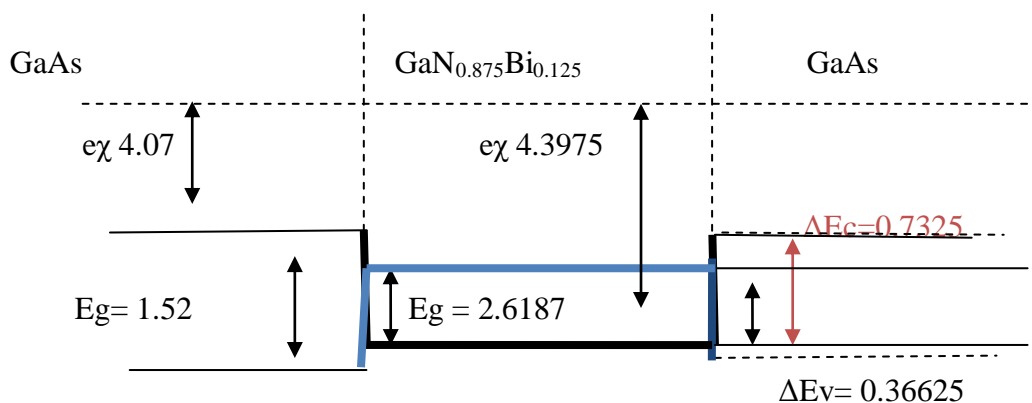


Figure 1.21 Diagramme d'énergie de l'heterostructure GaN_{0.125}Bi_{0.875}/GaAs

Le diagramme d'énergie de puits quantique de GaN_{0.125}Bi_{0.875} /GaAs , le puits c'est l'alliage ternaire de GaN_{1-x}Bi_x a composition du X=0.125 et le barrière c'est le composés binaires

GaAs, le type de l'hétérostructure est type III , donc cette hétérostructure est néfaste les composant optoelectroniques

C-GaNBi/GaN

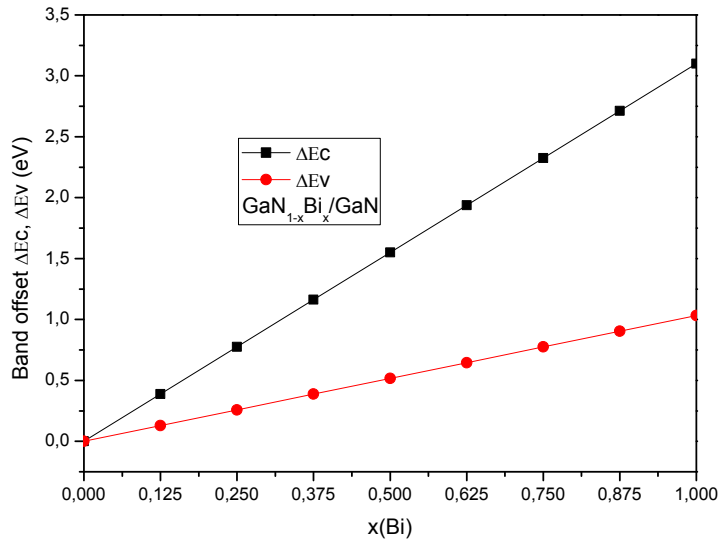


Figure 1.22 : variation de band offset pour l'hétérostructure GaN_{1-x}Bi_x/GaN

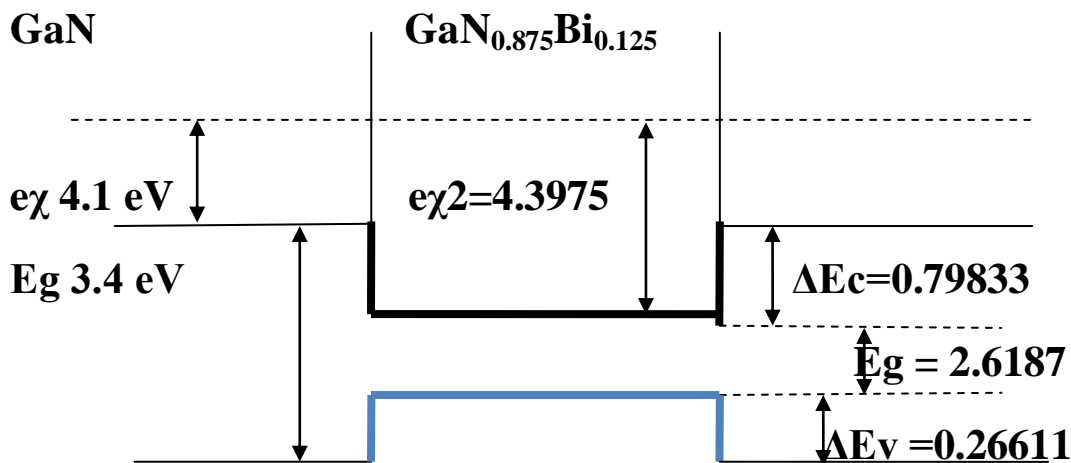


Figure 1.23 Diagramme d'énergie de l'hétérostructure GaN_{0.875}Bi_{0.125}/GaN

Nous représentons le diagramme d'énergie de l'hétérostructure a puits quantique de GaN_{0.875}Bi_{0.125} /GaN.

Nous remarquons que le type de cette heterostructure est type I, parce que l'affinité électronique de la barrière GaN est inférieur a l'affinité électronique du puits GaN_{0.125}Bi_{0.875}, en plus la somme de l'affinité électronique et l'énergie du gap de la barrière GaN ($E_g=3.4$ eV , $e\chi = 4.1$ eV) est supérieur a celui du puits quantique GaN_{0.875}Bi_{0.125} ($E_g = 2.6187$ eV , $e\chi = 4.3975$ eV) , ce puits quantique est toujours type I pour les gamme de composition du puit ou l'énergie du gap est positif non null

d. GaAs_{1-x}N_x/GaAs

Dans cette figure nous représentons les énergies de bande offset de l'hétérostructure GaAs_{1-x}N_x/GaAs

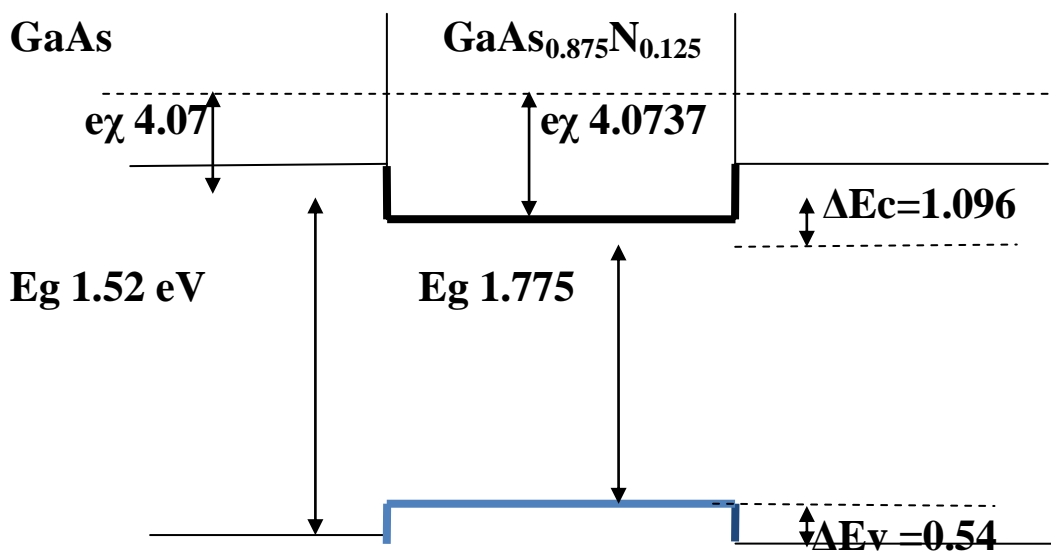


Figure 1.24 Diagramme d'énergie de l'heterostructure GaAs_{0.875}N_{0.125}/GaAs

Dans ce schéma de diagramme d'énergie de l'heterostructure GaAs_{0.875}N_{0.125}/GaAs , nous avons remarque que le diagramme est le type I des composition qui est ou l'energie du gap du puit GaAsN est inferieur de l'energie du gap de barrière GaAs

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés des composés semi-conducteurs à base de Bismuth (Bi) tels que les matériaux GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_xBi_{1-x} et leurs applications potentielles.

Les matériaux III-V tels que les alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x couvrent un large domaine de l'infrarouge (GaBi Eg= -1.5 eV) jusqu'à l'ultra violet (GaN Eg = 3.4 eV) en passant par le visible, donc les alliages sont intéressants, à cause des propriétés des alliages ternaires, ils présentent plusieurs applications et un intérêt technologique dans le domaine infrarouge et l'infrarouge lointain, on va présenter dans ce chapitre les propriétés de spectre infrarouge et le visible et les applications de ce spectre infrarouge puis nous avons discuté des propriétés des lasers à puits quantiques dans les deux domaines infrarouge et le visible et quel est l'avantage de ces matériaux dans le domaine infrarouge. L'intérêt majeur des matériaux à base de bismuth par rapport à des matériaux à base de mercure, parce que on ne peut pas fabriquer des matériaux de mercure à cause de l'évaporation très vite de mercure.

Dans ce chapitre nous avons étudiés les différents types de l'hétérostructure de laser pour l'infrarouge et le visible et l'intérêt de ces matériaux et les applications laser

References:

1. <http://www.uv-industrie.com/lire/v-au-royaume-des-ondes-7.html>
2. M. Lila et V. Furstoss Fourrages (2000) 161, 69-81
3. Claude Kergomard, Professeur école supérieur paris, la télédétection Aérospatiale
4. <http://www.flir.com/cs/emea/fr/view/?id=42309>
5. <http://www.aftib.org/exemples-applications-thermographie-infrarouge.php>
6. <http://www.flir.com/cs/emea/fr/view/?id=42309>
7. I. Vurgaftmana and J. R. Meyer. L. R. Ram-Mohan JOURNAL OF APPLIED PHYSICS VOLUME 89, NUMBER 11(2001)
8. Yu I Mazur ¹, V G Dorogan ¹, M Benamara ¹ J.Phys.D Appl .Phys 46(2013)065306(8pp)
9. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaN/bandstr.html>
10. Francoeur S, Seong M-J, Mascarenhas A, Tixier S, Adamcyk M and Tiedje T, Appl. Phys. Lett. 82 3874 (2003).
11. Su-Huai, Alex. Zunger, Phys. Rev. B 60 (1999) 5404.
12. Viktor N. Staroverov, Gustavo E. Scuseria, Jianmin Tao, John P. Perdew, Phys. Rev. B 69 (2004) 075102
13. M. Ferhat, A. Zaoui, Phys. Rev. B 73 (2006) 115107.
14. M. Van Schilfgaarde, A. Sher, A. B. Chen, J. Cryst. Growth. 178 (1997) 8
15. S. Logothetidis, J. Petalas, M. Cardona and T. D. Moustakas, Phys. Rev. B, 50, (1994), 18 017.
16. C. Stampfl, C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B 59 (1999)5521
17. R. Pandey, J. E. Jaffe, N. M. Harrison, J. Phys. Chem. Solides 55 (1994) 1357
18. D. Vogle, P. Krueger, J. Pollmann, Phys. Rev. B 55 (1997)12836

Chapitre 2

Etude ab-initio FP-LAPW/TB-mBJ des matériaux binaires III-V : GaAs, GaN et GaBi

1. Introduction
2. objectifs des calculs et intérêt
3. Etude des propriétés structurales et électroniques du binaire GaAs
 - 3.1. Propriétés structurales de GaAs
 - 3.2. Propriétés électroniques de GaAs
4. Etude des propriétés structurales et électroniques du binaire GaN
 - 4.1. Propriétés structurales de GaN
 - 4.2. Propriétés électroniques de GaN
5. Etude des propriétés structurales et électroniques du binaire GaBi
 - 5.1. Propriétés structurales de GaBi
 - 5.2. Propriétés électroniques de GaBi
6. Conclusion

1. Introduction

Dans ce chapitre nous présentons les résultats des calculs ab-initio que nous avons effectué sur les matériaux Binaires III-V (GaAs, GaBi, GaN) par la méthode FP-LAPW (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves)

Les calculs ont été effectués dans les trois phases Zinc Blende et Wurzite et Rocksalt dans le cas sans correction spin –Orbite (SO) et avec correction Spin –Orbite , Modification Beck-johnson (MBJ), , chaque phase de calcul est effectué avec les approximations LDA et GGA , MBJ (modification Becke-Johnson). Tous ces calculs ont été effectués en utilisant le code Wien2k.

2. Objectifs des calculs et intérêt

L'objectif de ce travail est l'étude théorique des propriétés structurales, électroniques, des matériaux Binaires GaAs, GaBi, GaN

L'étude de ces matériaux nous permet de déterminer la variation de la structure cristalline et le paramètre de maille (Volume) ainsi que la variation de structure de bande et de l'énergie de Gap pour des alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x , GaAs_{1-x}N_x , GaN_{1-x}Bi_x .

Nous avons calculé les propriétés structurales chaque composé binaire pour déterminer les paramètres d'équilibre (paramètre de maille (a), Volume de maille (V), coefficient de compressibilité (B), Derivé de coefficient de compressibilité (B'), Energie l'équilibre de chaque Binaire (Etot)) La détermination des structures d'équilibre constitue l'étape fondamentale dans tout calcul. Le paramètre interne est optimisé par une minimisation des forces, et l'énergie totale a été calculée en variant le volume dans le but de déterminer les paramètres d'équilibre du réseau et le module de compressibilité nous utilisons dans ce travail les deux correction spin –orbite et la modification Beck-Johnson pour voir la contribution du couplage spin-orbite dans les matériaux binaires

Les paramètres du réseau de l'équilibre sont calculés en ajustant l'énergie totale en fonction du volume, en utilisant l'équation de Murnaghan [6] donnée par

$$V = V_0 \left(1 + \frac{B' P}{B}\right)^{\frac{1}{B'}} \quad (1.1)$$

La dérivée du module de compressibilité B' est déterminé par :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (1.2)$$

Donc Les courbes obtenues ont été ajustées par l'équation d'état de Murnaghan

Détail du calcul

Les calculs de ces binaires chaque binaire est calculé dans les 3 phases Zinc Blende, phase wurzite, Rocksalt

La phase Zinc Blende appartient au groupe d'espace (F43m) (deux sous réseaux cubique face centre (CFC) translétés l'un par rapport a l'autre d'un quart de la diagonal principal, la différence entre cella et le diamant on trouve des atome de la colonne III dans un des deux sous réseaux CFC et des atome de la colonne V dans l'autre

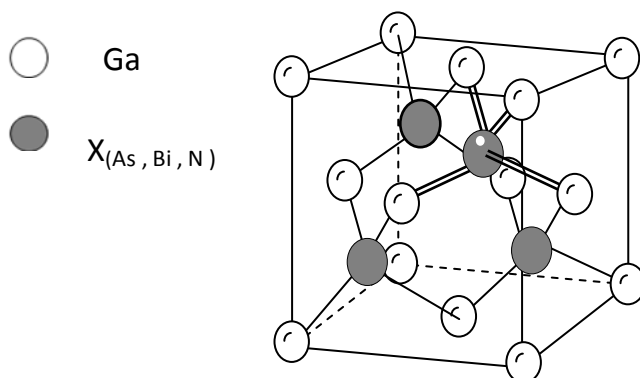


Figure 1 : structure Zinc blende

Et pour la phase Würzite, Cette structure est formée de deux sous réseau Hexagonale l'un des deux sous réseaux est composé d'anions (atomes de type V : N , As , Bi) et l'autre de cations

(atomes de type III : Ga), les deux sous réseaux sont décalés par la longueur égale à la liaison Ga-N $u=3/8= 0.3768$. (Dans la Würtzite idéale) le long de l'axe c.

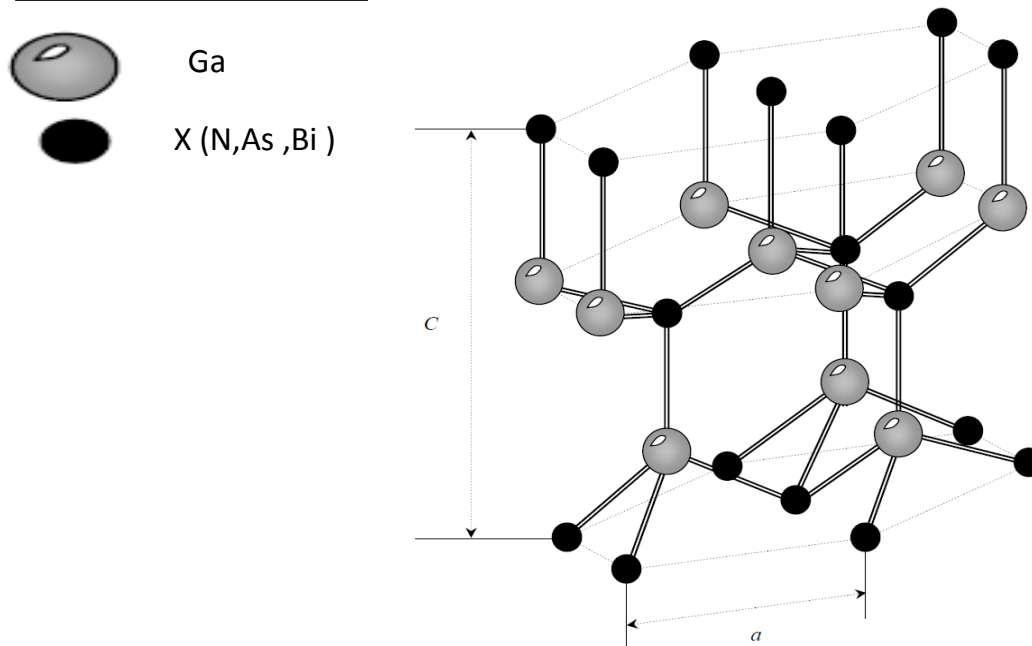


Figure 2 : Structure Wurtzite

La méthode ab-initio calculée par le code Wien2k est décrite dans l'annexe 1. La solution self-consistante des équations de Kohn et Sham [4] décrit l'électron de valence dans un potentiel créée par un réseau périodique. Les fonctions de base, les densités électroniques, et les potentiels sont étendus en combinaison d'harmoniques sphériques autour des sites atomiques, c'est à dire les sphères atomiques, avec un cutoff $l_{\max} = 10$, et en série de Fourier dans la région interstitielle. Afin d'obtenir la convergence des valeurs propres, les fonctions d'ondes dans la région interstitielle sont étendues en ondes planes avec un cutoff de $RMT \times k_{\max}$ égale à 8 (où RMT est le rayon moyen des sphères muffin-tin).

Dans nos calculs, l'énergie de séparation entre les états de valence et les états de cœur est 6.0 Ry pour la phase Zinc Blende et pour la phase Würzite, Rocksalt. Ainsi, les configurations électroniques sont $[Ar]3d^{10}4s^24p^1$, $[Ar]3d^{10}4s^24p^3$, $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$ pour les binaires : Galium, Arsenic et le Bismuth respectivement,.

L'intégration sur la zone de Brillouin a été effectuée, en utilisant le schéma de Monkhorst et Pack [5] ; La convergence est achevée en utilisant les valeurs représentées dans le tableau I qui contient les rayons muffin-tin RMT.

Table II.1 : Détails de calculs

Composés	RMT * Kmax	RMT	K point
GaAs (ZB)	8	Ga=2.21 As=2.21	56
GaBi (ZB)	8	Ga=2.47 Bi=2.5	56
GaN (Wz)	8	Ga=2.68 N=2.92	49

3. Etude des propriétés structurale et électroniques de binaires GaAs :

3.1. Propriétés structurales :

Nous présentons les propriétés structurales et électroniques pour GaAs. Sur la figure 3.1.1 et 3.1.2. nous représentons la variation de l'énergie totale en fonction du volume de GaAs dans les trois phases Zinc Blende et Würzite et Rocksalt par la méthode LDA et GGA en utilisant la correction MBJ. Ce calcul nous permet de déduire les paramètres d'équilibre tels que le paramètre de maille et l'énergie d'équilibre, volume de la maille, coefficient de compressibilité ainsi que la dérivée de coefficient de compressibilité.

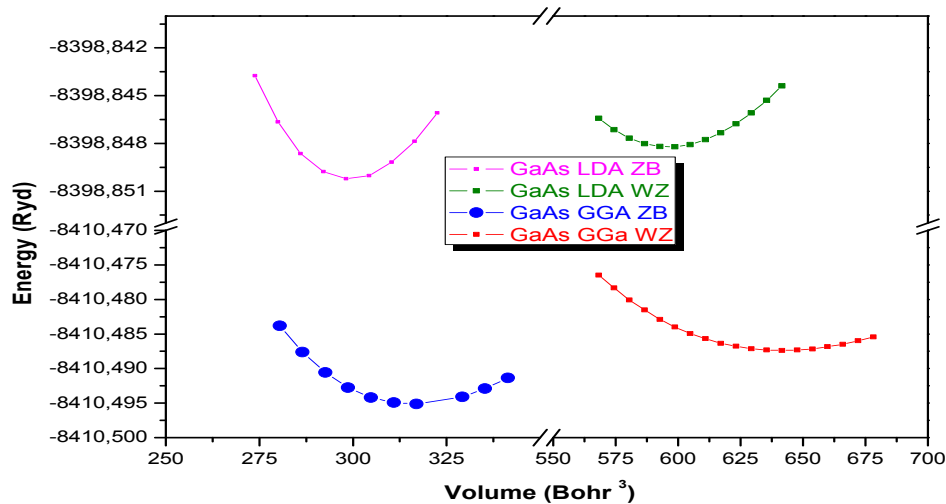


Figure 3.1.1 :Variation de l'énergie total en fonction du Volume pour GaAs sans spin orbite et MBJ

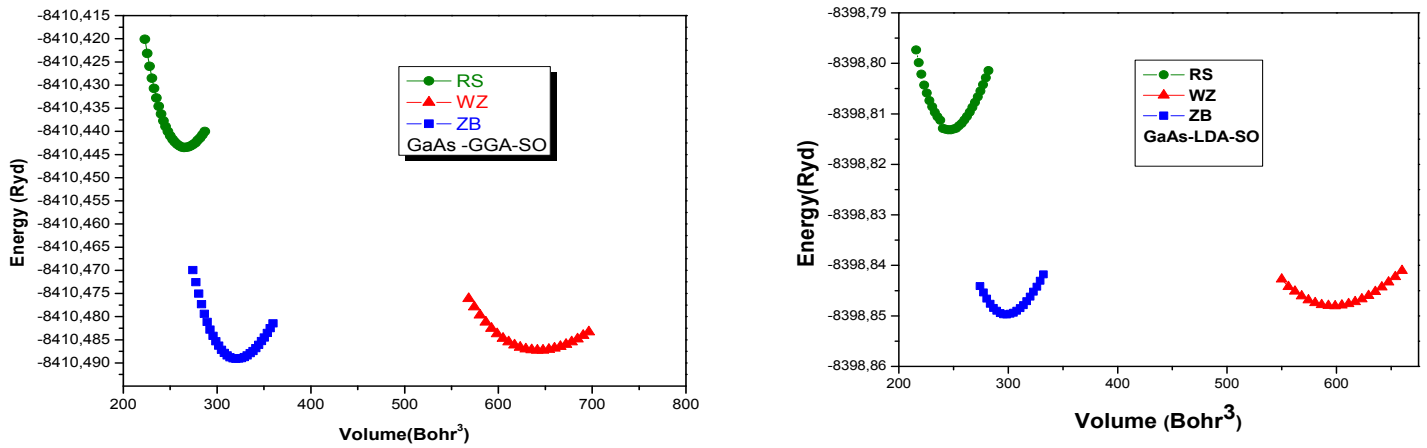


Figure 3.1.2 :Variation de l'énergie total en fonction du Volume pour GaAs avec spin orbite et MBJ

A partir de ces graphes on peut déduire que la phase stable pour GaAs c'est la phase Zinc Blende parmi les trois phases , la phase Rocksalt est la plus loin par rapport les deux phases les résultats sont confirmés pour les deux approximations LDA et GGA On en déduit les paramètres d'équilibre pour ce composé Binaires GaAs dans le tableau suivant :

Tableau III.1.1 : les paramètres d'équilibre (paramètre de maille, Volume, coefficient de compressibilité, Energie d'équilibre) pour le GaAs phase ZB

GaAs (ZB)	Notre travail				Autre travail				Exp	erreur	
	Sans SO		Avec SO		Sans SO		avec SO			Sans SO	Avec SO
	GGA	LDA	GGA	LDA	GGA	LDA	GGA	LDA			
a(A)	5.72375	5.61708	5.75404	5.61372	5.726 ^a	5.55 ^c	5.72 ^c	5.51 ^d	5.65325 ^b	ExG=1.24%	1.75
V(Bohr) ³	316.3280	298.9993	321.4075	298.4626	5.79 ^d				5.653 ^e	EtG=0.03%	0.48
B (GPa)	64.5891	75.3174	60.6216	73.6435	58 ^c	79 ^c	61 ^d	76 ^d		ExL=0.64%	0.70
B	4.7858	4.9433	4.5633	4.36						EtL=1.19%	1.13
E (Ryd)	-8410.495195 - 8398.85021		-8410.489116 - 8398.8497								

(a) :1 (b) :2 (c) :3 (d) :4 (e) : 5

Tableau III.1.2 : les paramètres d'équilibre (paramètre de maille, Volume, coefficient de compressibilité, Energie d'équilibre) pour le GaAs phase WZ

GaAs (WZ)	Notre travail				exp
	Sans SO		Avec SO		
	GGA	LDA	GGA	LDA	
a(Å)	4.061337	3.96341	4.01703	3.98454	4.00627
c(Å)	6.656611	6.4921	6.81854	6.43327	6.5138
U					
V(Bohr ₃)	641.6605	596.005	643.0274	596.9214	
B (GPa)	61.2538	74.5371	60.8178	72.8118	
B'	4.3677	4.7934	4.2818	4.0041	
E (Ryd)	-8410.48737	-8398.84822	-8410.4872	-8398.8480	

Pour la phase Rocksalt

Tableau III.1.3 : les paramètres d'équilibre (paramètre de maille, Volume, coefficient de compressibilité, Energie d'équilibre) pour le GaAs phase RS

GaAs-RS-SO	LDA	GGA	Expérimentales
V(Bohr ³)	247.9221	265.9338	
a(Å)	5.27707	5.40189	5.25785
B(GPa)	89.2082	70.6905	
B'	3.5917	4.6843	
E _{tot} (Ryd)	-8398.8129	-8410.443491	

Nous remarquons que les résultats de calculs que nous obtenons sont en bon accord avec les résultats expérimentaux ou théoriques pour les deux phases et les deux approximations dans les deux modèles de correction, pour les résultats de LDA sont sous-estimés par rapport a l'expérimental, et surestimé pour l'approximation GGA

3.2. Propriétés électroniques :

La détermination de la structure de bande d'un semi conducteur est essentiel pour la réalisation de dispositif a base du semi-conducteur .Un des points important de la structure de bande est la largeur de la bande interdit (gap), valeur de l'énergie séparant le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence.

Nous utilisons les résultats d'équilibre de GaAs que nous avons déterminé pour calculer la structure de bande et la densité d'état de GaAs

Nous représentons les structure de bande et densité d'état pour GaAs dans les trois phase cubique et wurzite , rocksalt chaque phase nous repreontons sans correction SO-MBJ et avec correction SO-MBJ .

3.2.1.1-Zinc Blende (GaAs-sans SO-MBJ)

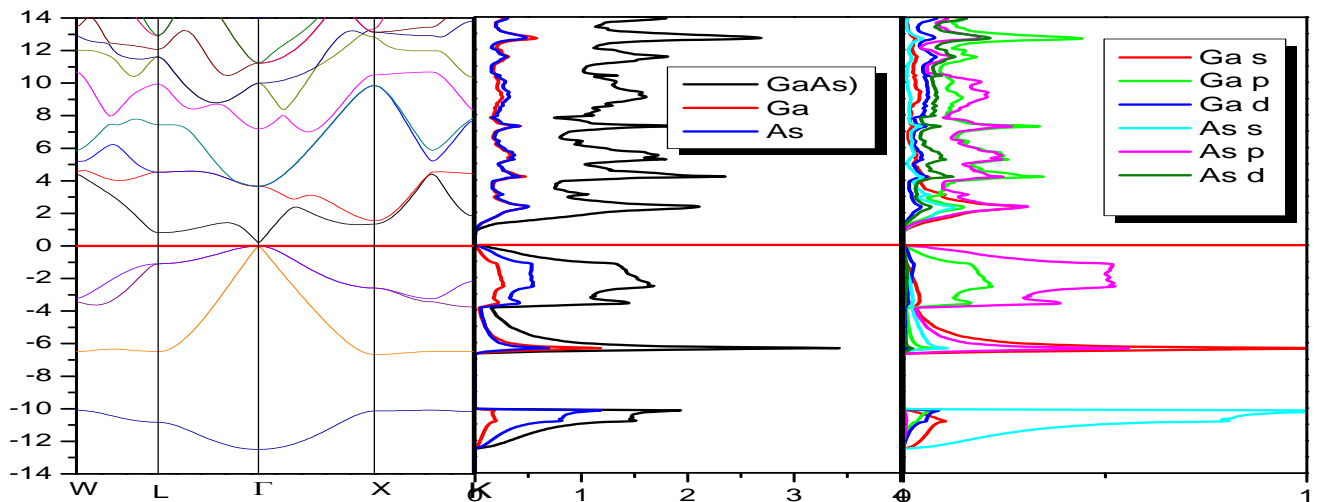


Figure 3.2.1.1 : structure de bande et densité d'état de GaAs ZB (GGA-sans SO-MBJ)

3.2.1.2-Zinc Blend (LDA-sans SO-MBJ)

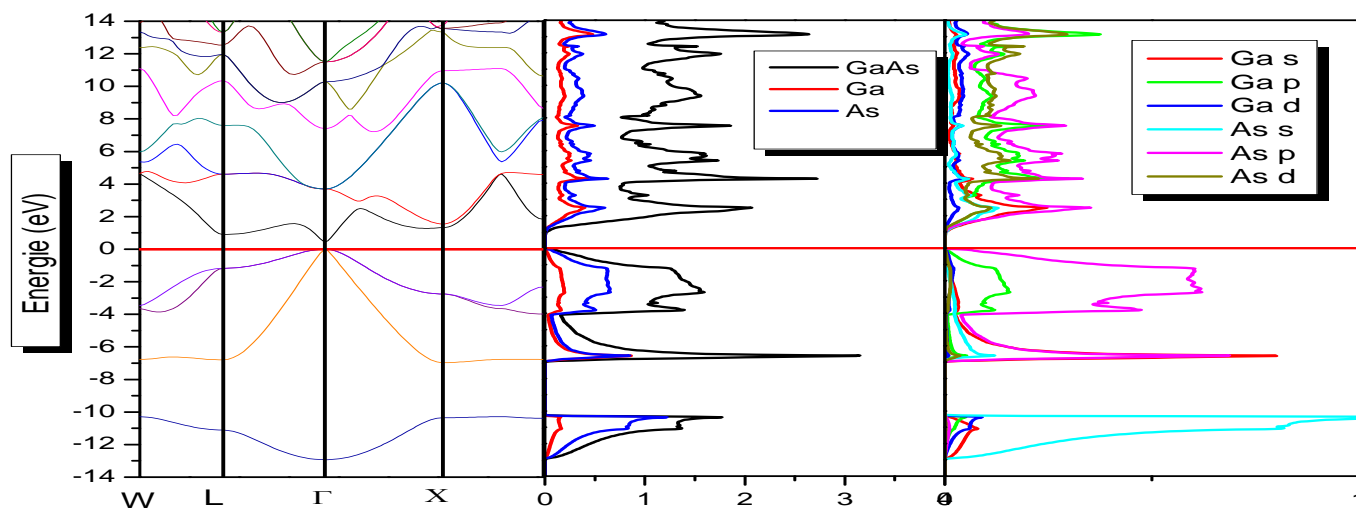


Figure 3.2.1.2: structure de bande et densité d'état de GaAs ZB (LDA- sans SO-MBJ)

3.2.1.4-zinc Blende (LDA-avec SO-MBJ)

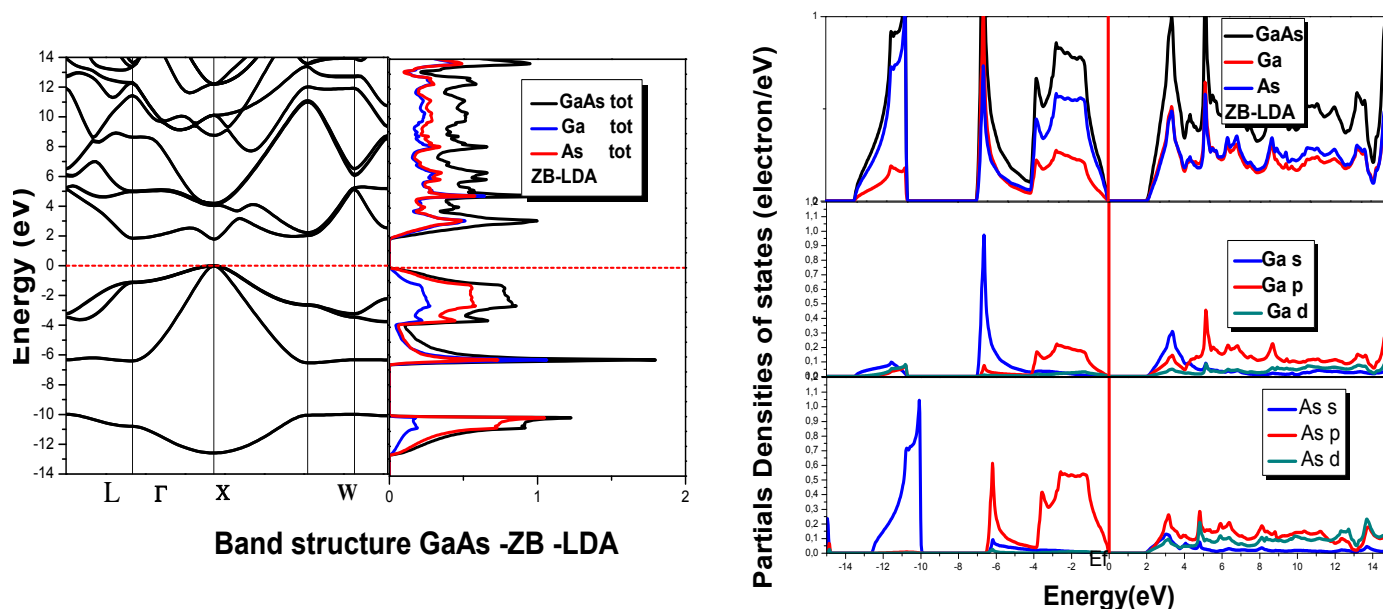


Figure 3.2.1.4: structure de bande et densité d'état de GaAs ZB (LDA- avec SO-MBJ)

Tableau III.2.1 : paramètre de l'énergie de structure de bande de GaAs (sans spin-orbite)

GaAs	Phase	Energie (eV)	Notre calcul	Autre calcul	expérimentales	erreurs
LDA	ZB	$E_v(\Gamma)$	-0.00001			
		$E_c(\Gamma)$	0.42404			
		E_g	0.42405	0.49 ^a	1.51	150%
	WZ	$E_v(\Gamma)$	0.0000			
		$E_c(\Gamma)$	0.41365			
		E_g	0.41365			
GGA	ZB	$E_v(\Gamma)$	-0.00001			
		$E_c(\Gamma)$	0.19577			
		E_g	0.19577		1.51	
	WZ	$E_v(\Gamma)$	0.0000			
		$E_c(\Gamma)$	0.2135			
		E_g	0.2135			

Tableau III.2.2 : paramètre de l'énergie de structure de bande de GaAs (avec spin-orbite)

GaAs	Phase	Energie (eV)	Notre calcul	Autre calcul	expérimentales	erreurs
LDA	ZB	$E_v(\Gamma)$	0.00003			
		$E_c(\Gamma)$	1.77949			
		E_g	1,77946	0.49 ^a	1.51	17%
	WZ	$E_v(\Gamma)$	0.0000			
		$E_c(\Gamma)$	0.41365			
		E_g	1,35971			
GGA	ZB	$E_v(\Gamma)$	0.00051			
		$E_c(\Gamma)$	1.21589			
		E_g	1.21538		1.51	19%
	WZ	$E_v(\Gamma)$	0.0000			
		$E_c(\Gamma)$	0.2135			
		E_g	0,08155			

On remarque dans la structure de bande la nature du gap est un gap direct dans le point Γ , l'énergie de maximum de bande valence est -0.0001 eV et l'énergie de bande de conduction est 0.19577 eV donc l'énergie de bande interdite est 0.19578 eV, ce résultat est totalement différent par rapport au calcul avec spin-orbite et modification MBJ ou nous avons trouvé l'énergie maximum de bande de valence est 0.00051 eV et l'énergie minimum de la bande de conduction est 1.12589 eV donc la valeur de l'énergie du gap 1.12538, nous concluons que la correction MBJ modifie la valeur du gap et toujours sous-estimé par rapport à l'énergie du gap expérimentale aucune comparaison sérieuse ne peut être effectuée tout de même comme la DFT sous-estime quelque peu la largeur de la bande interdite.

Pour la densité d'état la contribution des états dans les matériaux GaAs, la densité est divisée en 4 régions (-12.-10) (-6.-4) (-4.0) (1.14) dans la première région on remarque que l'atome Arsenic contribue et l'état s de l'atome qui contribue dans cette région et dans la 2^{ème} région c'est l'orbital s de l'atome de Gallium et dans la 3^{ème} région ou région de la bande de valence c'est l'orbitale P de l'atome Arsenic et dans la 4^{ème} région (1.14) ou la région de conduction on remarque que l'orbital p pour les deux atomes qui contribue dans cette région. Cette contribution est la même pour la phase wurzite dans les deux modèles de calcul sans et avec spin-orbite, MBJ.

4. Etude de propriétés structurales et électroniques de GaN

4.1. Propriétés structurales de GaN

Dans ce calcul de GaN, nous présentons la variation de l'énergie totale en fonction du volume de GaN pour les deux approximations LDA et GGA dans les deux phases Zinc Blende et Wurzite pour calcul sans correction SO et dans les trois phases Zinc Blende, Wurzite, Rocksalt avec correction SO.

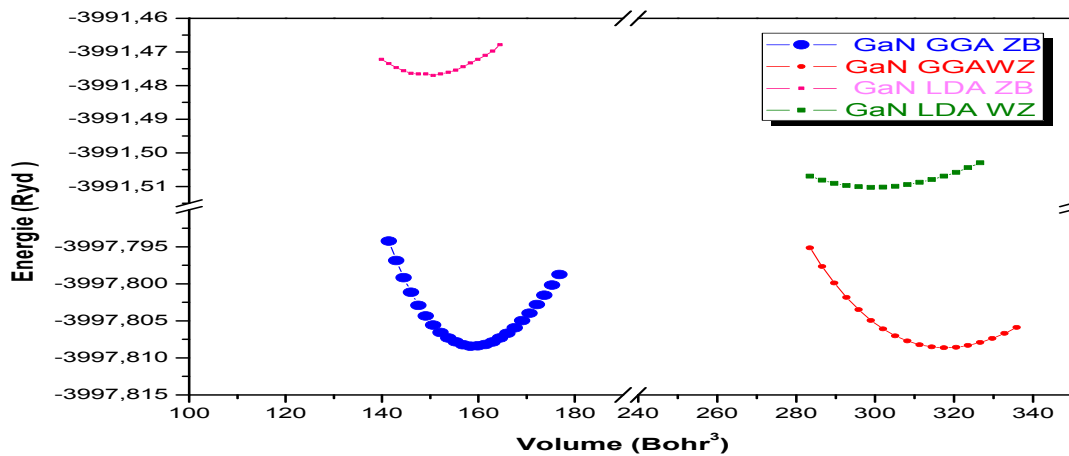


Figure 4.1 Variation de l'Energie total en fonction du Volume pour GaN-sans SO

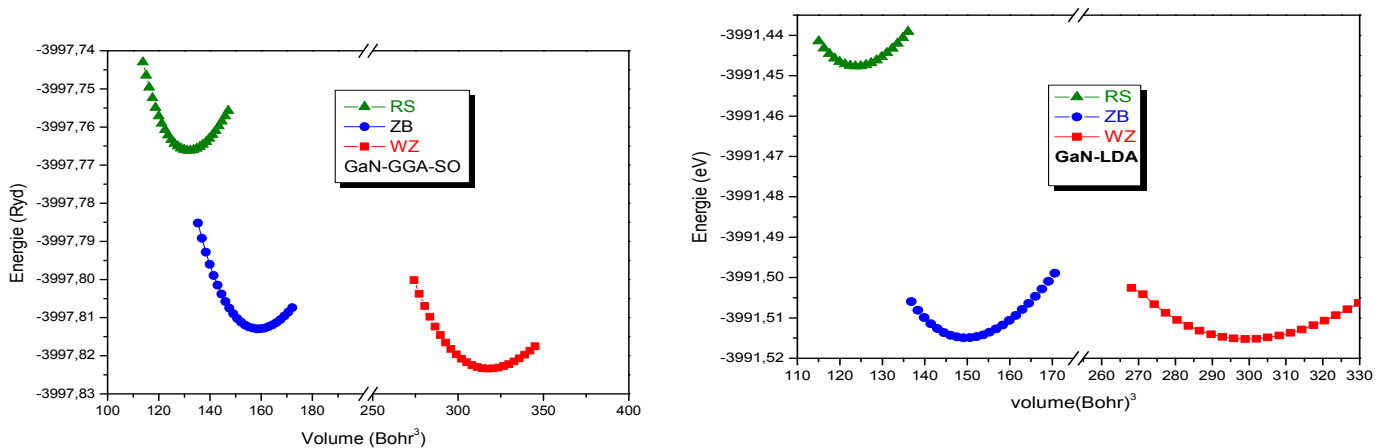


Figure 4.2 Variation de l'Energie total en fonction du Volume pour GaN –avec –MBJ-SO

A partir de ces graphes on peut déduire que la phase Wurzite c'est la phase plus stable pour l'approximation GGA et pour l'approximation LDA nous remarquons que le matériaux il se peut cristallise dans les deux phase les deux calcul (avec correction du spin orbite et sans correction du spin orbite)

on déduire les paramètres d'équilibre de ce binaires dans ce tableau suivant :

Tableau IV.1.1 : les paramètres d'équilibre (paramètre de maille, Volume, coefficient de compressibilité, Energie d'équilibre) pour le GaN

GaNZB	Notre travail		Autre travail		expérimentales	erreur	
	GGA	LDA	GGA	LDA		GGA	LDA
a(A)	4.55057	4.461788	4.59 ^f	4.446 ^e	4.5 ^a		
V(Bohr)	158.9775	149.8525					
B (GPa)	172.6034	203.3996	191 ^f	201 ^d			
B'	4.5263	4.73	4.25 ^f	4.14 ^f			
E (Ryd)	-3997.80593 (ZB) -3991.47730 (ZB) -3997.80863 (WZ) -3991.5102 (WZ)						

Tableau IV.1.2 les paramètres d'équilibre de binaire GaN pour la phase Wurzite

GaN (WZ)	Notre travail		Autre travail		expérimentales	erreur	
	GGA	LDA	GGA	LDA		GGA	LDA
a(A)	3.22051	3.15603	a=3.22a	3.15b	3.189 c	Ex a 0.97%	C 0.107 %
c (A)	5.24309	5.14518	c 5.21a	5.13b	5.185 c	ET a 0.96%	C 0.47%
V(Bohr)	446.5489	417.8811	317.7992	299.5094			
B (GPa)	38.8252	46.2993	174.2422	204.3707			
B'	4.7858	4.9433					
E (Ryd)	-3997.80593(ZB) -3991.47730 (ZB) -3997.80863(wz) -3991.5102 (wz)						

(a) :6 (b) : 7 (C) : 2 (d) :17 (e) :18 (f) :19 (g) :2

Tableau IV.1.3 : paramètre d'équilibre de matériau binaire GaN rocksalt

GaN-RS-SO	LDA	GGA	expérimentales
V(Bohr ³)	123.83	131.7689	
a (Å)	4.18699	4.27456	4.18526
B (GPa)	250.085	131.7689	
B'	4.6832	209.9874	
E _{tot} (Ryd)	-3991.44764	-3997.766127	

Rapport-gratuit.com 

a. Propriétés électroniques :

Nous avons calculé la structure de bande de GaN dans les deux phase, la phase wurzite sans correction et la phase cubique avec les deux correction mbj (modifie belk jonhson) et la correction Engel Voscko. On représente le schéma de structure de bande et densité d'état pour GaN dans la phase wurzite

on représente les figures de structure de bande et densité d'état pour GaN sans et avec la correction

4.2.2.2. GaN Wurzite LDA (sans SO-MBJ)

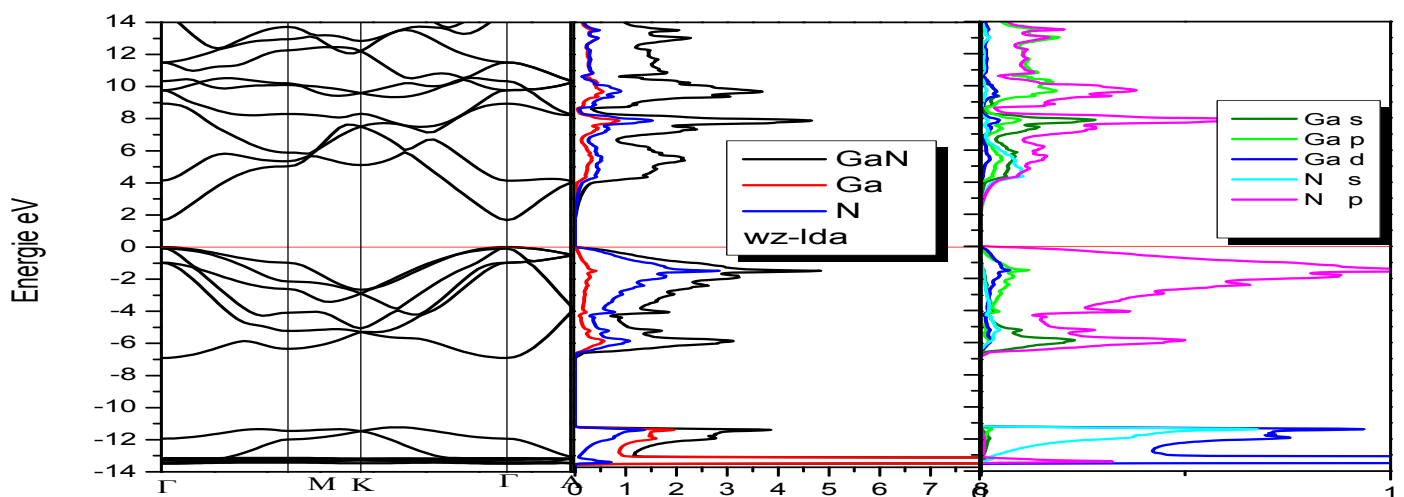


Figure 4.2.2.2 structure de bande et densité d'état de GaN WZ (LDA sans SO-MBJ)

4.2.2.4 GaN Wurzite (LDA avec SO-MBJ)

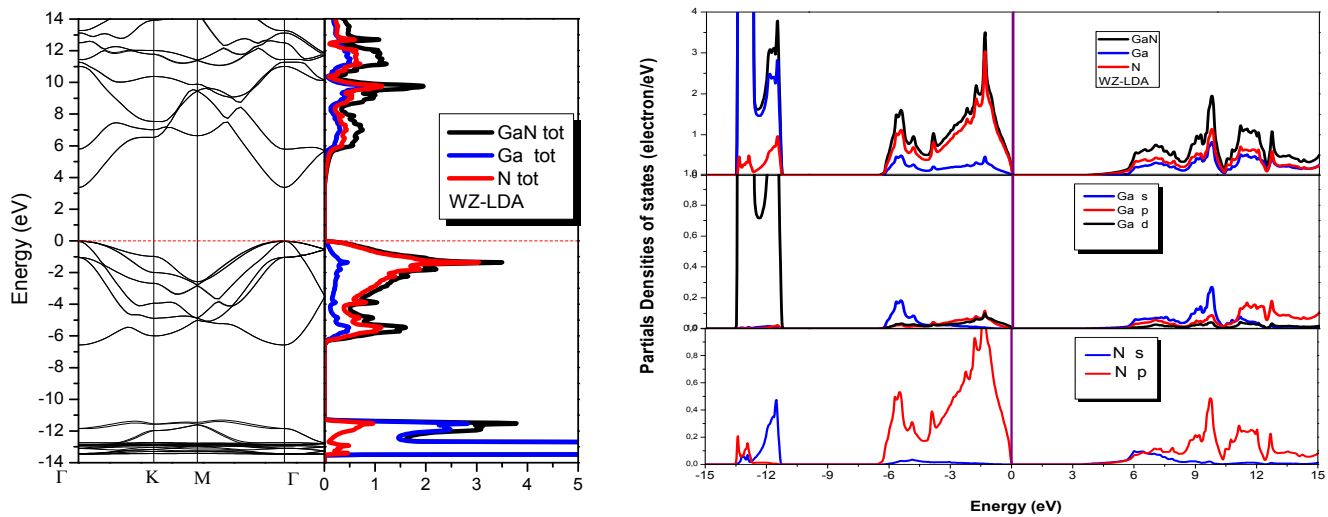


Figure 4.2.2.4 structure de bande et densité de GaN WZ (LDA avec SO-MBJ)

On remarque dans la structure de bande de binaire GaN pour les deux compositions wurzite et Zinc Blende le gap est direct en point Γ , on représente les énergies de structure de bande dans le tableau suivant

Tableau IV.2.1 paramètres de ie de structure de bande de GaN sans correction SO-MBJ

GaN	Phase	Energie (eV)	Notre calcul	Autre calcul	expérimentales
LDA	ZB	E_V(Γ)	-0.00003		
		E_C(Γ)	1.93392		
		E_g	1.93325	pW 3.211 ^a	3.229
	WZ	E_v(Γ)	0.0000		
		E_c(Γ)	2.15326		
		E_g	2.15326		3.5
GGA	ZB	E_v(Γ)	1.18481		
		E_c(Γ)	2.72403		
		E_g	1.53922		
	WZ	E_v(Γ)	0.0000		
		E_c(Γ)	1.67766		
		E_g	1.67766		

Tableau IV.2.2. paramètre de structure de band de GaN avec correction SO-MBJ

GaN	Phase	Energie (eV)	Notre calcul	Autre calcul	expérimentales
LDA	ZB	EV (Γ)	0.00848		
		EC (Γ)	3.16013		
		Eg	3.15165	pW 3.211 ^a	3.229
	WZ	Ev(Γ)	0.0000		
		Ec(Γ)	2.15326		
		Eg	3.3697		3.5
GGA	ZB	Ev(Γ)	0.00677		
		Ec(Γ)	2.77141		
		Eg	2.76464		
	WZ	Ev(Γ)	0.00041		
		Ec(Γ)	2.90922		
		Eg	2.90881		

aucune comparaison sérieuse ne peut être effectuée toute fois comme la DFT sous-estimé quelque peu la largeur de la bande interdite .

Pour la densité d'état nous remarquons est divisé en 3region (-14, -12) (-7, 0) (1.6, 14) pour la première région l'orbital d de l'atome du galium est fortement contribué et pour les deux région l'orbital p de l'atome d'Azote, donc l'électron de l'orbital p qui va passe de la bande valence de GaN vers bande du conduction

Pour la phase zinc blende nous avons calculé la structure de bande avec l correction , on représente les schéma de structure de bande pour chaque correction du GaN dans la figure

On remarque pour tout les schéma le gap reste direct au point gamma Γ mais l'énergie de gap varie la correction du mBJ donne des resultat bonne pae rapport de Engel Voscko

5. Etude des propriétés structurale et électroniques de binaires GaBi

5.1. Propriétés structurales

Nous présentent les propriétés structurales et électroniques pour GaBi par deux type de calcul premier sans spin orbit pour les deux phase et la deuxième avec spin orbit pour la phase zinc blende, on commence par les propriétés structurales ou nous avons calculés les variations de l'énergie total en fonction du Volume pour les deux phases Zinc Blende et Wurzite .ce calcul peut déterminer les paramètres d'équilibre tell que le paramétré de maille et Energie d'équilibre

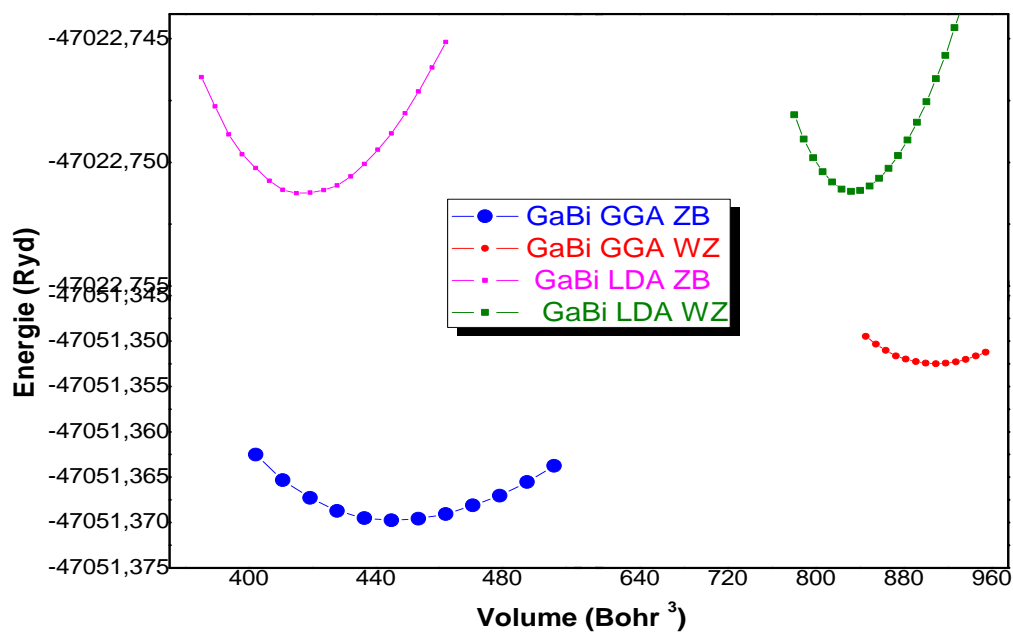


Figure V.1 variation de l'énergie total en fonction du volume GaBi

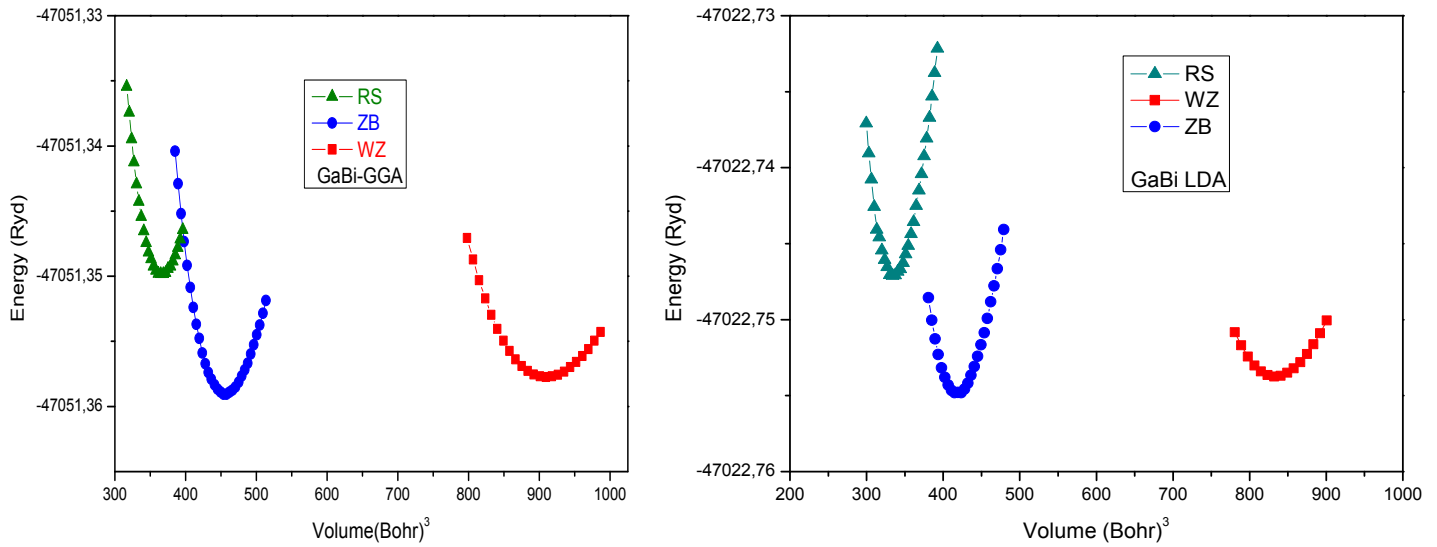


Figure V.2 Variation de l'Energie total en fonction du Volume pour GaBi avec correctio spin orbite

A partir de ces graphes en peut déduire que la phase plus stable pour GaBi est la phase Zinc Blende donc on représente les paramètres d'équilibre dans le tableau suivant tableau II.2

Tableau V.1.1 : paramètre d'équilibre (paramètre de maille, coefficient de compressibilité, énergie d'équilibre) dans la phase Zinc Blende

GaBi (ZB)	Notre travail				Autre travail				exp	erreur	
	Sans SO		Avec SO		Sans SO		avec SO			Sans SO	SO
	GGA	LDA	GGA	LDA	GGA	LDA	GGA	LDA			
a(A)	6.42062	6.28018	6.465132	6.2814	6.47 e 6.44 i	6.28e			6.33	ExG=1.41% EtG= -0.3% ExL=0.78% EtL=0.002	
V(Bohr) ³	446.5489	417.8811	455.8999	418.1275							
B (GPa)	38.8252	46.2993	35.93	46.0326							
B'	4.7858	4.9433	4.6461	4.9774							
E (Ryd)	-47051,3297	-47022,751275	- 47051.3590	-47022.7548							

Tableau V.1.2 paramètre d'équilibre de matériaux binaire GaBi dans la phase wurzite

GaBi (WZ)	Notre travail				Valeurs théorique
	Sans SO		Avec SO		
	GGA	LDA	GGA	LDA	
a(A)	4.57123	4.44056	4.52529	4.45327	4.48586
C	7.44139	7.23634	7.59981	7.19091	7.29357
U			0.3768	0.3745	
V(Bohr) ³	908.7578	833.8907	909.5429	833.4352	
B (GPa)	35.4482	46.4778	36.2697	45.6924	
B'	4.1371	5.0646	4.2617	4.313	
E (Ryd)	-47051,10251	-47022,75021	-47051.3577	-47022.7537	

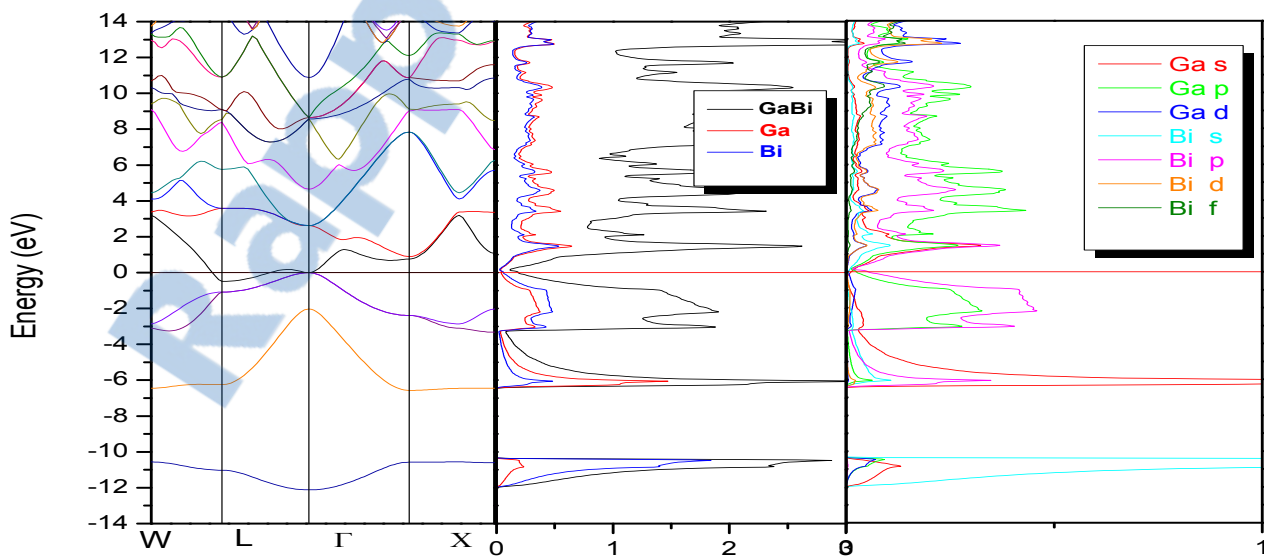
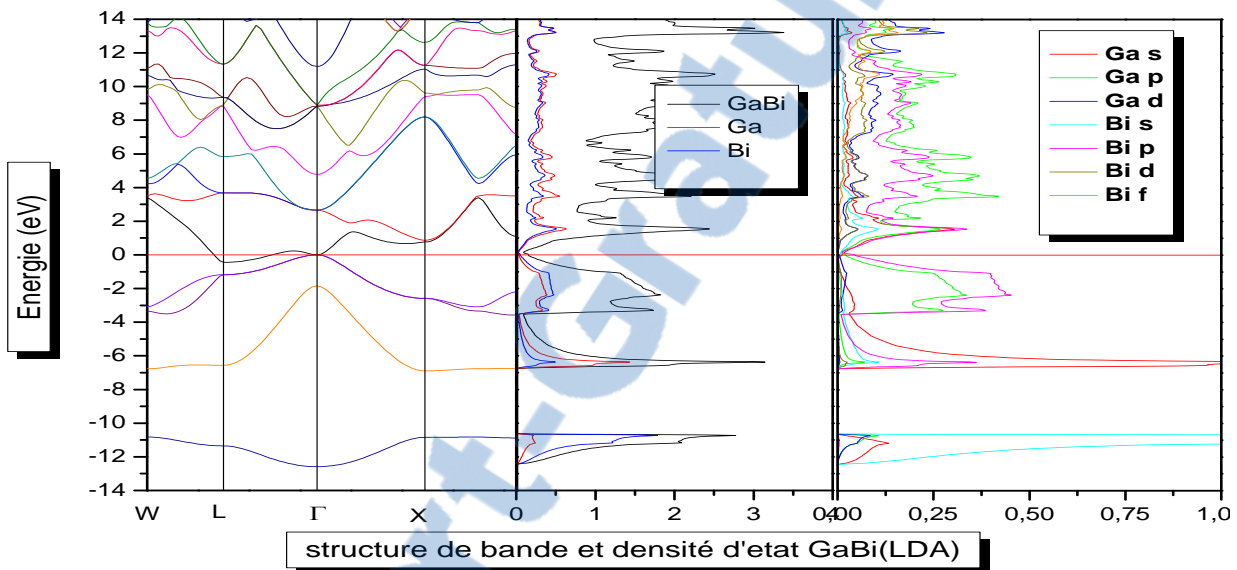
Tableau V.1.3 paramètre d'équilibre de matériaux binaire GaBi dans la phase Rocksalt

GaBi-RS-SO	LDA	GGA	expérimentales
V(Bohr ³)	335.4001	366.3741	
a (Å)	5.83636	6.01076	5.88727
B (GPa)	60.7218	48.4708	
B'	4.9515	4.3843	
E _{tot} (Ryd)	-47022.74711	-47051.349868	

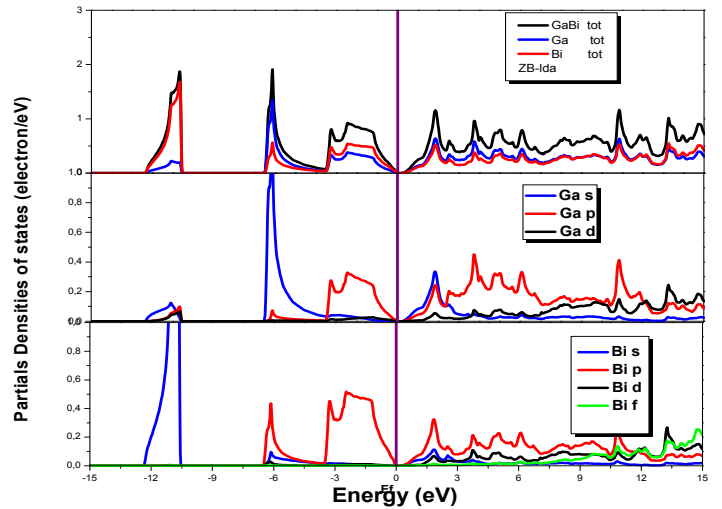
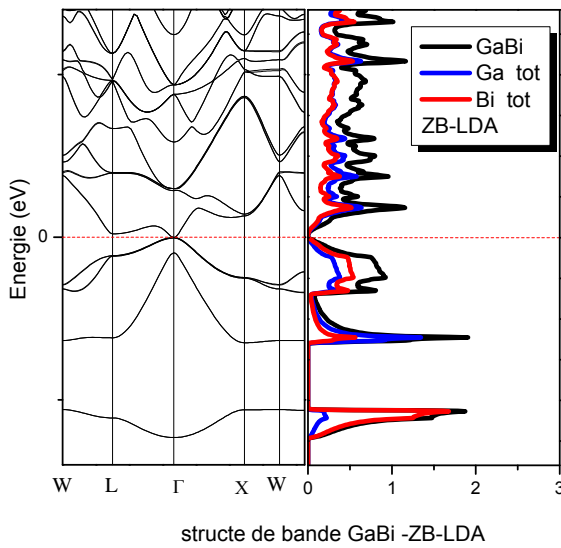
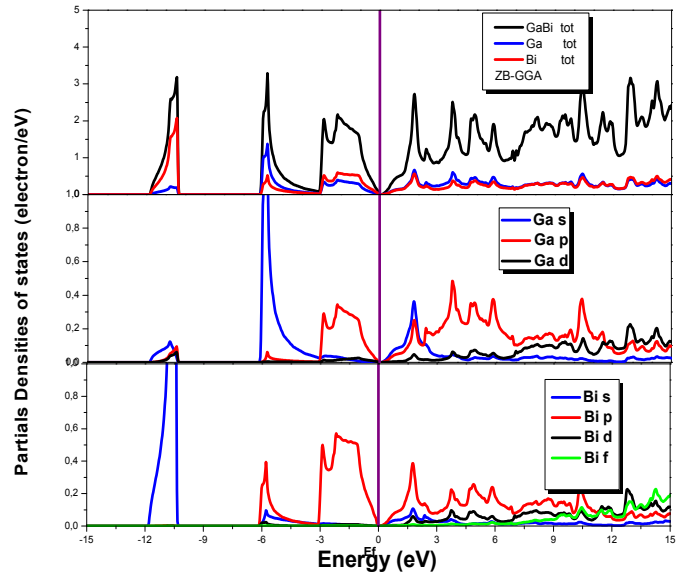
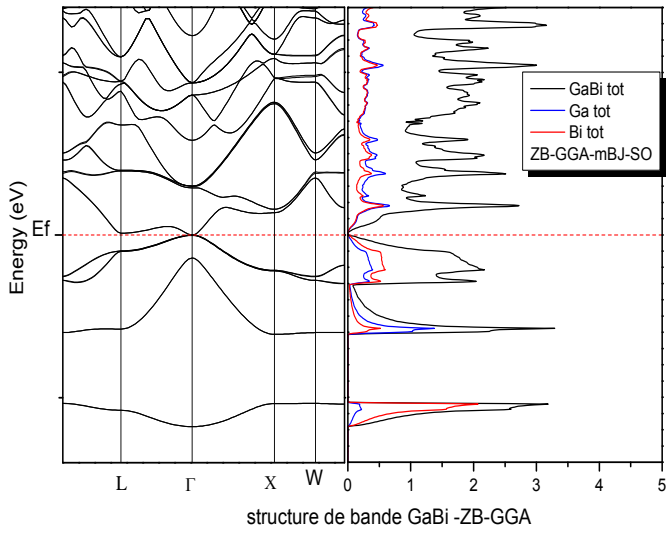
5.2. Propriétés électroniques :

On représente la structure de bande et la densité d'état de GaBi pour les deux phase

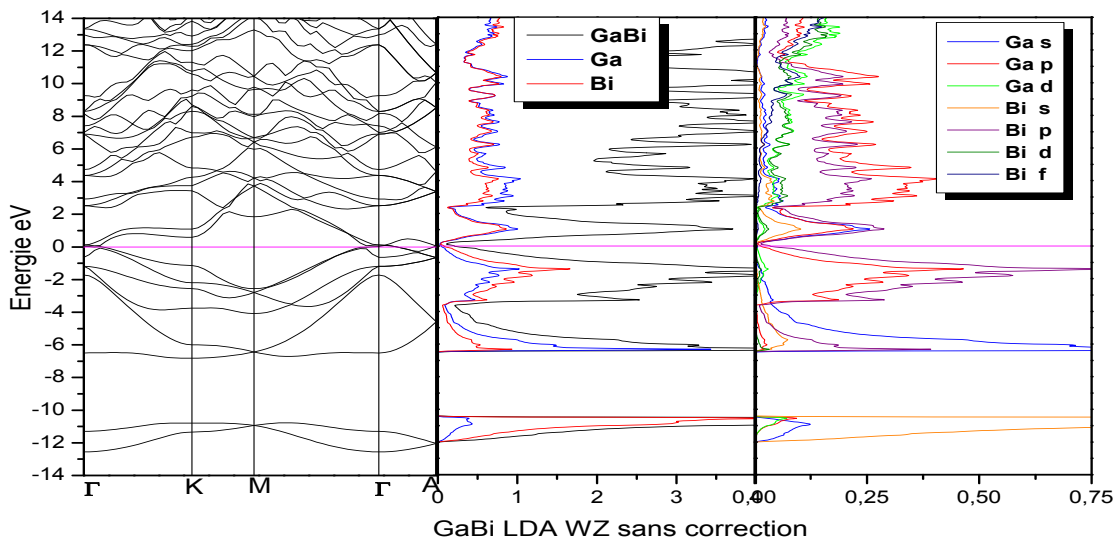
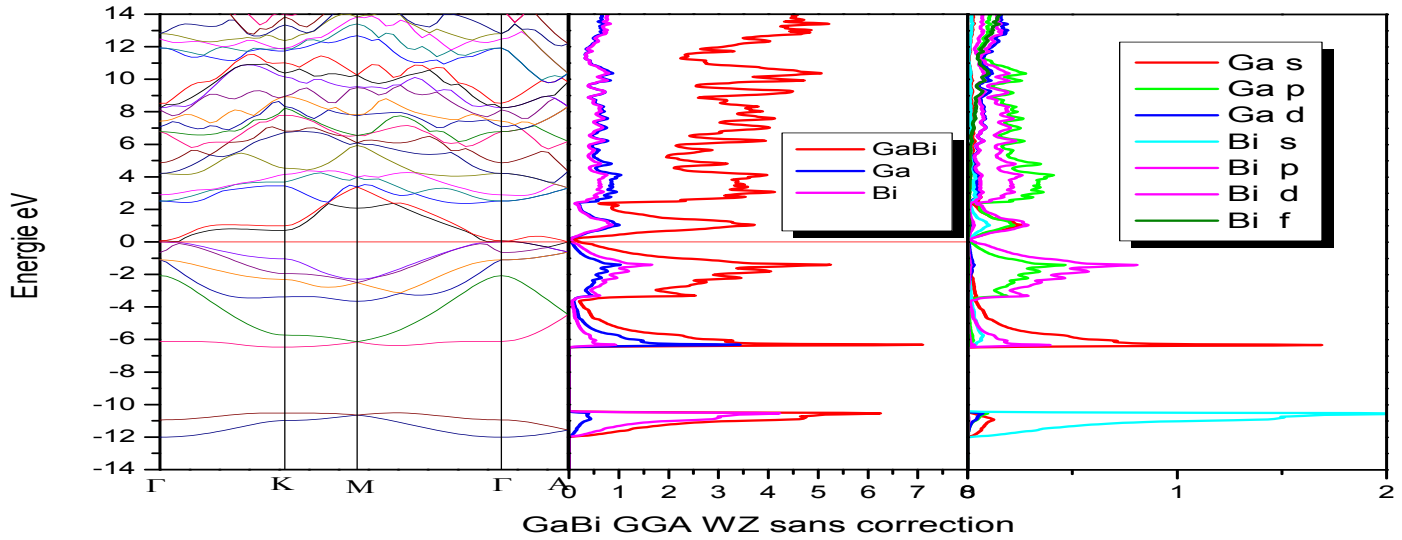
a-1-Zinc Blend (sans SO)



a-2-GaBi Zinc Blende (avec SO-MBJ)

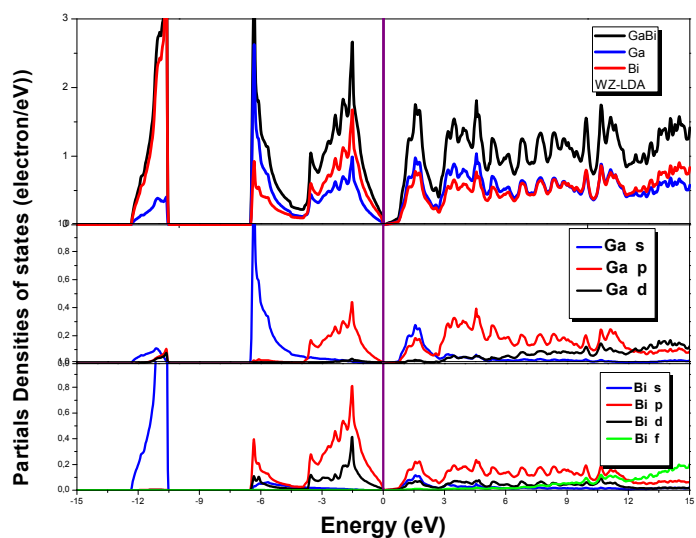
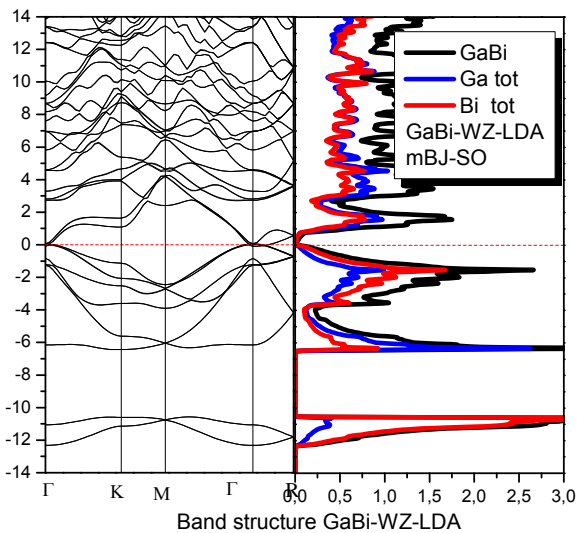
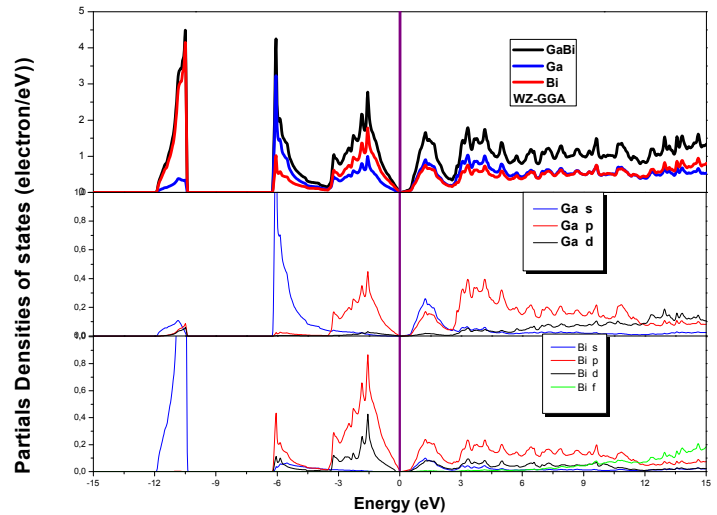
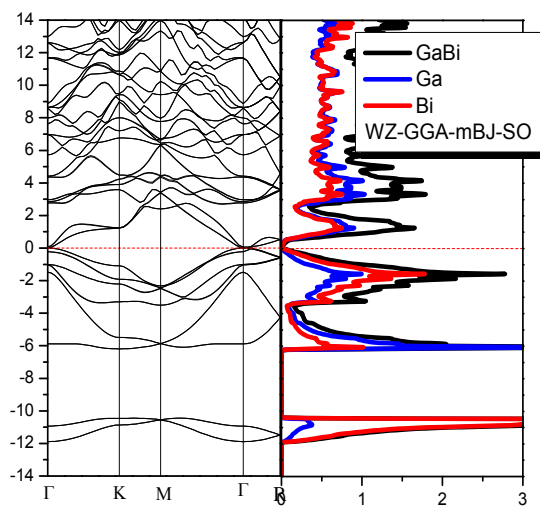


c-3-GaBi Wurzite (sans SO)



Rapport-gratuit.com

c-4—GaBi Wurzite (avec SO)



c-5-GaBi Rocksalt (avec SO-MBJ)

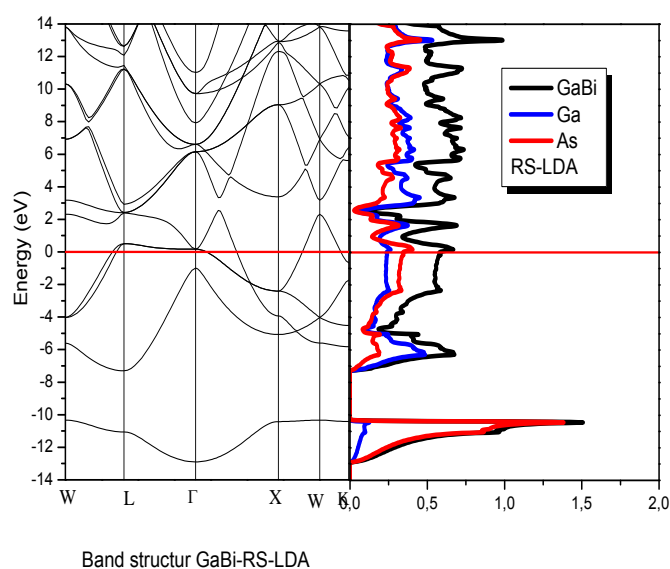
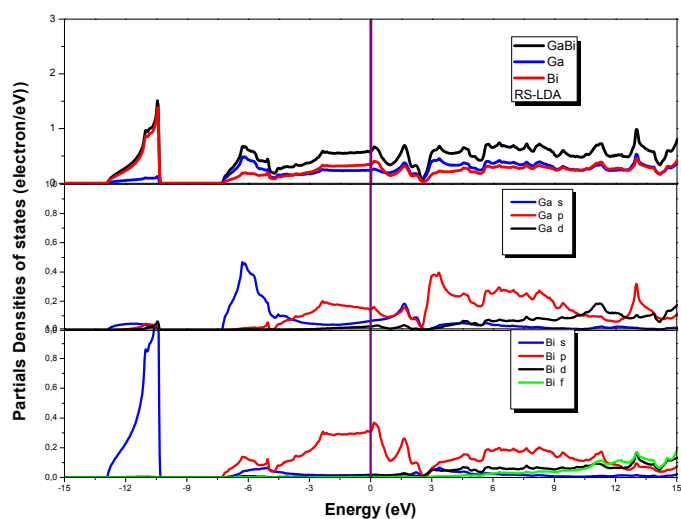
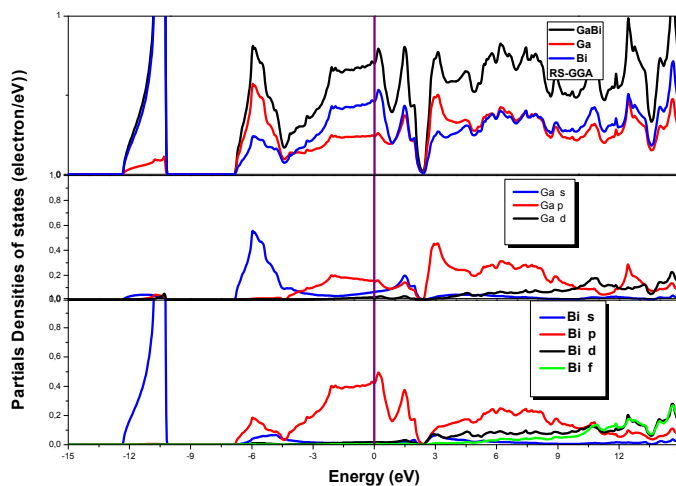
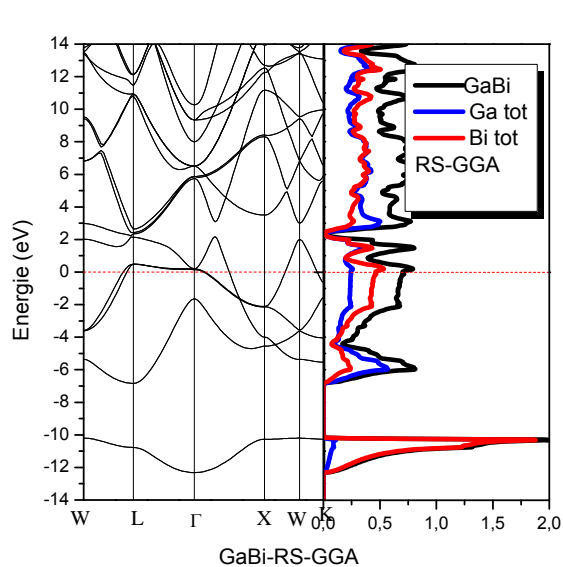


Tableau II.5.2.1. les énergies du structure de bande GaBi sans correction SO-MBJ

GaBi	Phase	Energie (eV)	Notre calcul	Autre calcul
LDA	ZB	EV (Γ)	0.15808	
		EC (L)	-0.28962	
		E _g	-0.4477	
	WZ	Ev(Γ)	0,02784	
		Ec(Γ)	0,11642	
		E _g	0,08858	
GGA	ZB	Ev(Γ)	0.16303	
		Ec(L)	-0.32896	-1.45
		E _g	-0.49199	
	WZ	Ev(Γ)	0,03459	
		Ec(Γ)	0,09912	
		E _g	0,06453	

Tableau II.5.2.2 tableau des énergies de structure de bande GaBi avec correction SO-MBJ

GaBi	Phase	Energie (eV)	Notre calcul	Autre calcul
LDA	ZB	EV (Γ)	-0.02018	
		EC (Γ)	-0.02018	
		E _g	0	-1.45
	WZ	E _v (Γ)	0,00576	
		E _c (Γ)	0.04562	
		E _g	0,03986	
GGA	ZB	E _v (Γ)	-0.02079	
		E _c (L)	-0.02079	-1.45
		E _g	0	
	WZ	E _v (Γ)	0.00094	
		E _c (Γ)	0,0211	
		E _g	0.02016	

On remarque dans la structure de bande de GaBi la nature du gap est un gap indirect dans le point Γ - L , l'énergie de maximum de bande valence est -0.16303 eV et l'énergie de bande de conduction est -0.32869 eV donc l'énergie de bande interdite est négative - 0.49199 eV

Et pour la densité d'état est divisée en 3 régions (-12 , -10) (-6.4 , -3) (-3,0) (0 , 2) (2,14) dans la première région on remarque l'état s de l'atome Bismuth qui contribue dans cette région et dans la 2^{ème} région c'est l'orbital s de l'atome de gallium et l'orbitale P de l'atome Bismuth qui contribue dans la 3^{ème} et 4^{ème} région et la dernière région nous remarquons l'orbital p du gallium

6. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons étudié ab-initio sur les binaires III-V (GaAs, GaBi, GaN) par la méthode FP-LAPW. Nous avons calculé les propriétés structurales et électronique de GaAs, GaBi, GaN, pour GaBi nous avons calculé les propriétés par deux processus sans spin orbit et avec spin orbit et les propriétés électroniques GaN et GaBi nous avons étudiés avec les deux corrections (Engel Voscko et MBJ modifie belk johnson) et le GaAs nous avons calculé sans correction et sans couplage spin-Orbite.

Nous avons trouvé que la phase zinc blende est la plus stable pour GaAs et GaBi et pour la phase wurzite pour GaN.

A partir de ce calcul de l'énergie du gap nous avons prouvé que la correction MBJ de l'énergie du gap pour GaAs et GaN, GaBi, il modifie l'énergie du gap et diminué l'erreur de calcul par rapport de calcul sans correction SO-MBJ.

Cette partie de calcul est intéressante pour calculer les alliages ternaires de GaAsBi et GaN_{1-x}Bi_x et GaAsN pour comprendre la variation de la structure cristalline et le paramètre de maille et le Volume et le changement de la structure de bande et variation de l'énergie du gap.

Références:

- (1) - Viktor N. Staroverov, Gustavo E. Scuseria, Jianmin Tao, John P. Perdew, Phys. Rev. B 69 (2004) 075102.
- (2) - I. Vurgaftmana and J. R. Meyer. L. R. Ram-Mohan JOURNAL OF APPLIED PHYSICS VOLUME 89, NUMBER 11(2001)
- (3) - R. Miotto, G.P. Srivastava, Phys. Rev. B 59 (1999) 3008.
- (4) - A. DalCorso, A. Pasquarello, A. Baldereschi, R. Car, Phys. Rev. B 53 (1996) 1180
- (5) - O. Madelung (Ed.), Semiconductors, Group IV Elements and III–V, Compounds, Landolt–Bornstein, New Series, Group III, vol. 17, Pt.a, Springer, Berlin, 1991
- (6) - J. J. Zhang, G. J. Zhao, and X. X. Liang , International Journal of Applied Physics and Mathematics, Vol. 3, No. 4, July 2013
- (7) - D. Vogel, P. Krüger, and J. Pollmann, "Structural and electronic properties of group-III nitrides," Phys. Rev. B, vol. 55, pp.12836-12839, May 1997.
- (8) - Francoeur S, Seong M-J, Mascarenhas A, Tixier S, Adamcyk M and Tiedje T, Appl. Phys. Lettre. 82 3874 (2003).
- (9) -M.Ferhat and A.Zaoui, Phys. Rev. B 73, 115107 (2006).
- (10)-S.Q. Wang, H.Q. Ye, Phys. Rev. B 66 (2002) 235111.
- (11) J. S. Blakemore, J. Appl. Phys. 53, R123 ~1983! and références thérien
- (12) -MR. Boufatah, A.E. Merad Materials Science in Semiconductor Processing 19 (2014) 179–185
- (13) -S. Kacimi, H. Mehnane, A. Zaoui, Journal of Alloys and Compounds 587 (2014) 451–458
- (14) -A. Janoti, –H. Su, P. Wei, S.B. Zhang, Phys. Rev. B 65 (2002) 115203.
- (15) Ali Hussain Reshak ^{a,b,n}, H. Kamarudin ^b, S. Auluck ^c, I.V. Kityk ^d, Journal of Solid State Chemistry 186 (2012) 47–53
- (16) S. Q. Wang and H. Q. Ye., J. Phys. Condens. Matter, 14, (2002), 9579.
- (17). S. Logothetidis, J. Petalas, M. Cardona and T. D. Moustakas, Phys. Rev. B, 50, (1994), 18 017.
- (18). K. Kim, W. R. L. Lambrecht and B. Segall, Phys. Rev. B, 53, (1996), 16 310.
- (19)C. Stampfl, C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B 59 (1999)5521

Chapitre 3

Etude ab-initio FP-LAPW/TB-mBJ des alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x

1. Introduction
2. Objectifs des calculs et intérêts
3. Etude des propriétés structurales et électroniques de l'alliage ternaires GaAs_{1-x}Bi_x
4. Etude des propriétés structurales et électroniques de l'alliage ternaires GaN_{1-x}Bi_x
5. Conclusion

1. Introduction :

Dans ce chapitre nous présentons des calculs ab-initio effectués sur les alliages ternaires III-V (GaAs_{1-x}Bi_x, GaN_{1-x}Bi_x) par la méthode FP-LAPW (Full Potentiel Linearized Augmented Plane Waves) les calculs ont été effectués pour les deux phases (Zinc Blende et Wurzite), chaque phase de calcul est effectuée avec les deux approximations LDA et GGA. les calculs faits par le code Wien2k nous avons fait avec et sans correction Spin –Orbite SO et l'approximation MBJ (Modifié Beck –Johnson). les calculs ont été effectués au sein de notre laboratoire d'Etude des Matériaux Optoélectroniques et Polymère (L.E.M.O.P)

2. Objectifs des calculs et intérêt

l'objectif de cette étude pour voir les propriétés structurales et électroniques pour les deux alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x, GaN_{1-x}Bi_x en fonction de la composition du Bismuth (Bi), nous avons étudiés ces alliages pour les trois compositions du Bismuth pour x=0.25, 0.5, 0.75% chaque étude faite avec et dans la correction du TB-mBJ-SO pour l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x et avec TB-mBJ-SO pour l'alliage GaN_{1-x}Bi_x dans les trois phases cristallines Zinc Blende et Wurzite et Rocksalt pour étudier la variation de volume et paramètre de maille et coefficient de compressibilité et la structure de bandes et les densités d'état et leur variation de l'énergie du gap, parce que nous avons trouvés dans le chapitre II que les trois matériaux binaires qui composent ces alliages ne cristallisent pas à la même phase cristalline sachant que le GaAs et GaBi cristallisent dans la phase Zinc Blende et le GaN cristallise dans la phase Wurzite

3. Etude des propriétés structurales et électroniques de l'alliage ternaire GaAsBi

3.1. Propriétés structurales

Nous présentons les résultats de calculs ab-initio des propriétés structurales et des propriétés élastiques avec correction spin-Orbite et MBJ (Modification Beck-Johnson) de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x pour différentes compositions de Bismuth x=0.25, x=0.5, x=0.75, les résultats de calcul des propriétés structurales sont donnés dans le tableau (III.1.1) (III.1.2) (III.1.3) pour les trois différentes phases (Zinc Blende, Wurzite, Rocksalt)

Dans les figures (3.1.1) , (3.1.2) , (3.1.3) nous montrons les variations de l'énergie totale en fonction du volume pour trois compositions de l'alliage GaAs_{0.75}Bi_{0.25} GaAs_{0.5}Bi_{0.5} GaAs_{0.25}Bi_{0.75}

Les résultats de l'approximation GGA et de l'approximation LDA sont reportés sur les figures 3.1.1 à 3.1.3. On remarquera que dans toutes les figures, la phase zinc-blende est la plus stable pour toutes les compositions de Bi.

Les variations de l'énergie totale en fonction du volume sont obtenues par l'équation d'état de Murnaghan [28] qui est donnée comme suit :

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{B_0 V}{B_0' (B_0' - 1)} \right] \times \left[B_0' \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B_0'} - 1 \right]$$

E_0 : énergie totale d'équilibre

V_0 : volume d'équilibre de la cellule unitaire

B_0 : bulk modulus

B_0' : première dérivée de bulk modulus

Comme on le voit sur les figures, les résultats de l'approximation LDA sont légèrement différents de GGA, LDA sous-estime les énergies et les volumes et tandis que l'inverse se produit pour GGA, la phase zinc-blende est la plus stable pour les trois phases pour toute la gamme de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x

Ce comportement est habituellement obtenu pour tous les calculs DFT-FP-LAPW, avec ou sans corrections TB-MBJ, à cause des approximations inhérentes réalisées dans chacune des deux LDA et GGA méthodes.

Pour toutes les compositions de l'alliage GaAsBi dans les deux approximations, l'énergie d'équilibre de la phase RS est la plus élevée et le volume le plus bas par rapport aux deux phases cristallines, ce qui indique que la phase moins favorable pour l'alliage GaAsBi

-la phase zinc-blende est la plus basse énergie pour toute la gamme de composition de l'alliage, donc la phase ZB est la plus stable aux autres structures cristallines. Ces résultats sont confirmés avec la bibliographie.

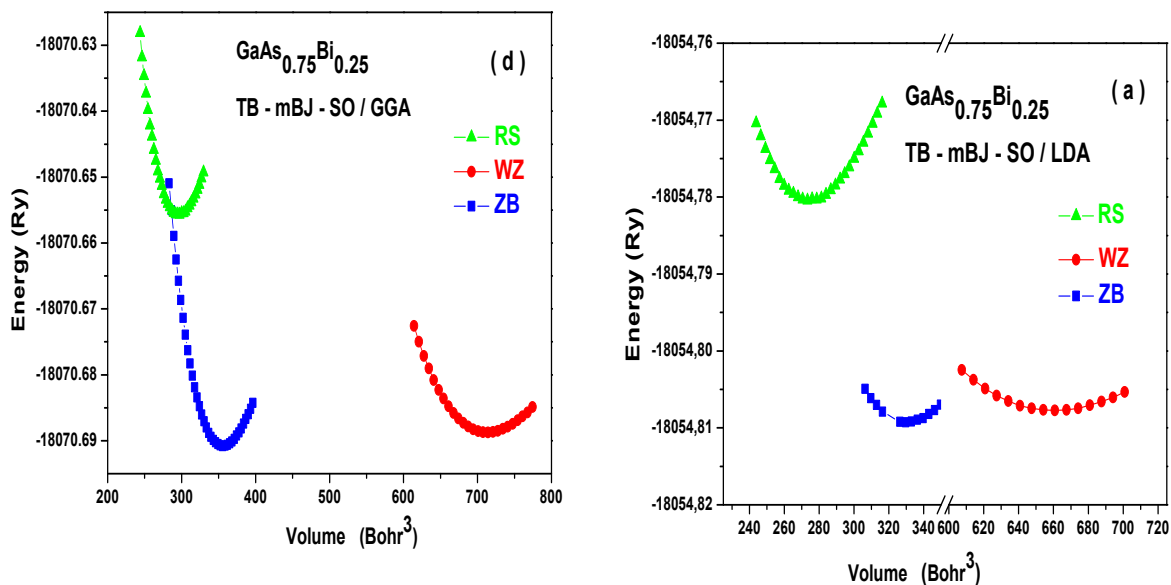


Figure 3.1.1 variation de l'énergie total en fonction du volume pour l'alliage GaAs_{0.75}Bi_{0.25}

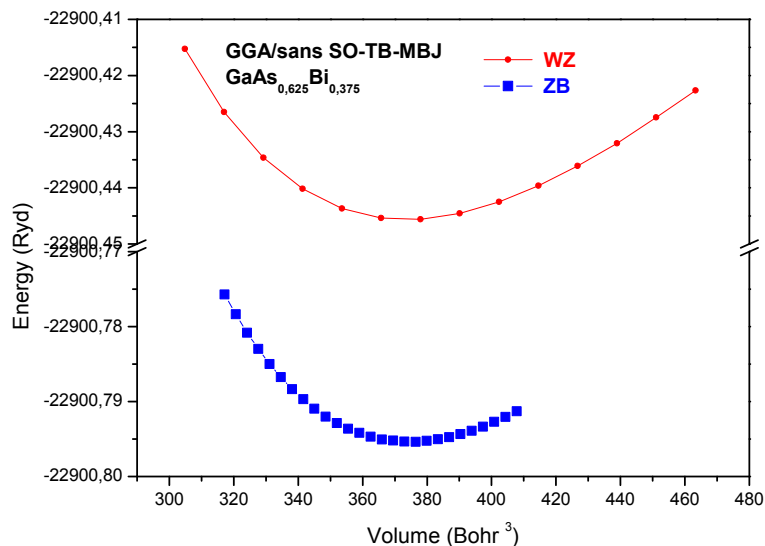


Figure 3.1.2. variation de l'énergie total en fonction du volume pour GaAs_{0.625}Bi_{0.375} sans correction SO-MBJ

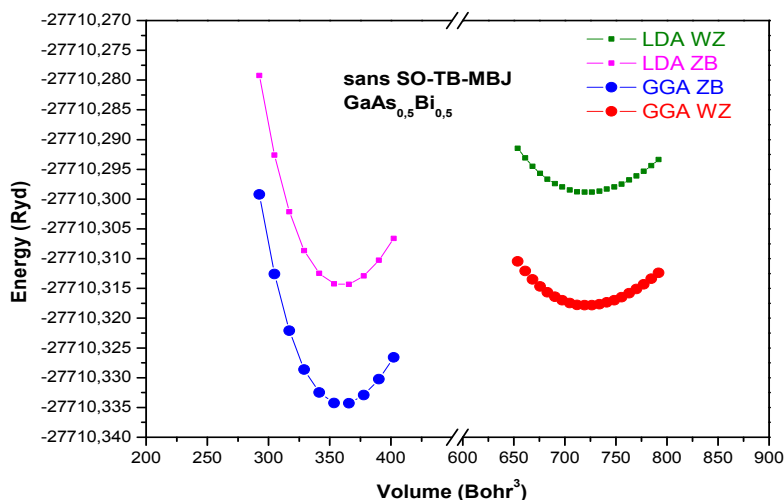


Figure 3.1.3 variation de l'énergie total en fonction du volume pour GaAs_{0.5}Bi_{0.5} sans correction SO-MBJ

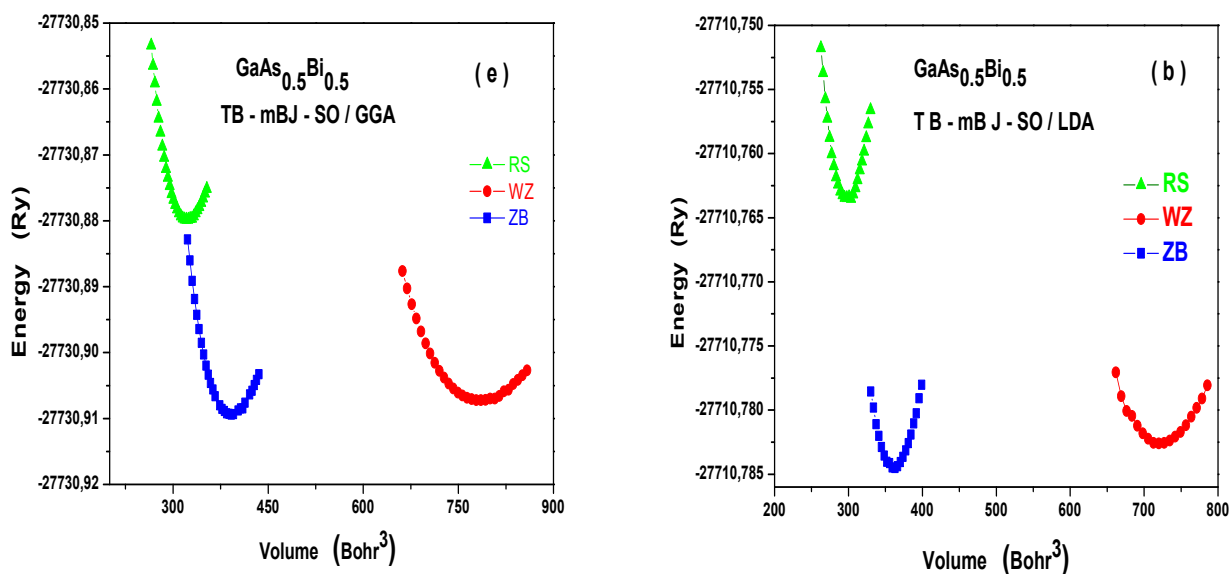


Figure 3.1.4 variation de l'énergie total en fonction du volume pour GaAs_{0.5}Bi_{0.5} avec correction SO-MBJ

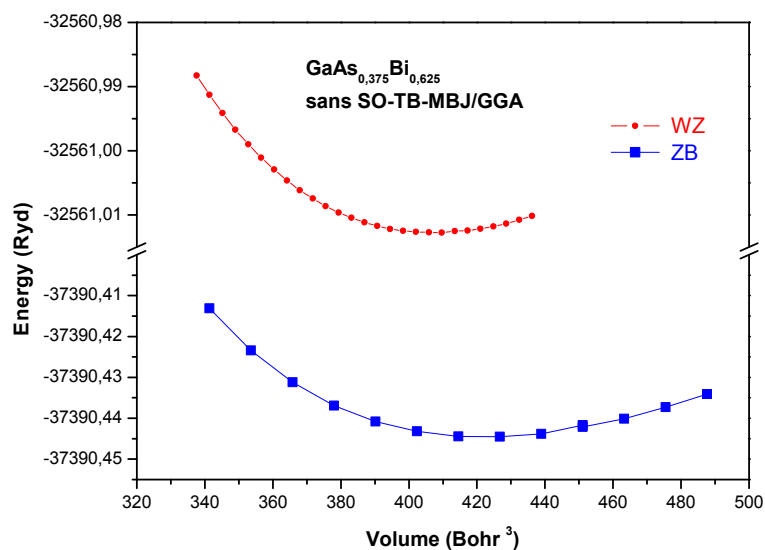


Figure 3.1.5 variation de l'énergie total en fonction du volume pour GaAs_{0.375}Bi_{0.625} sans SO-MBJ

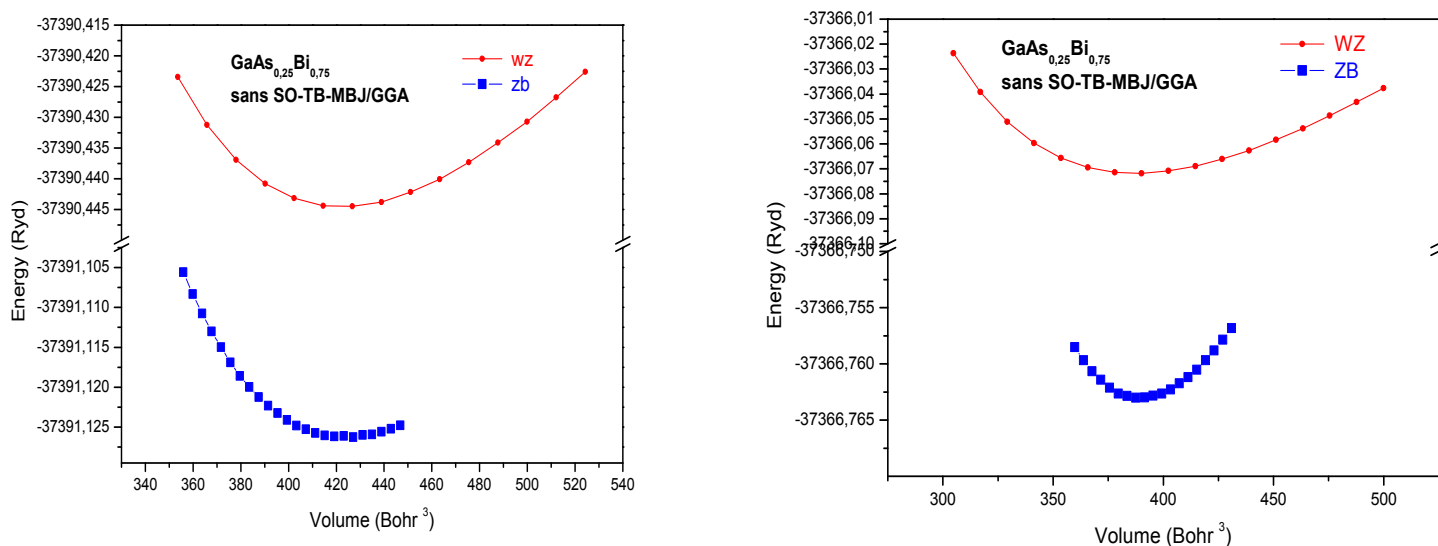
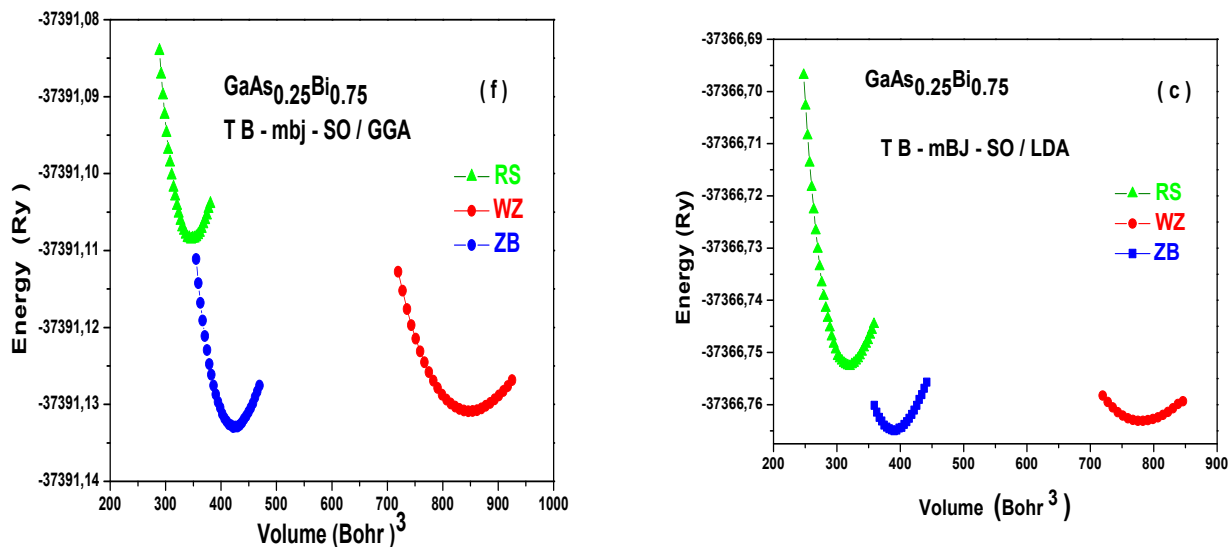
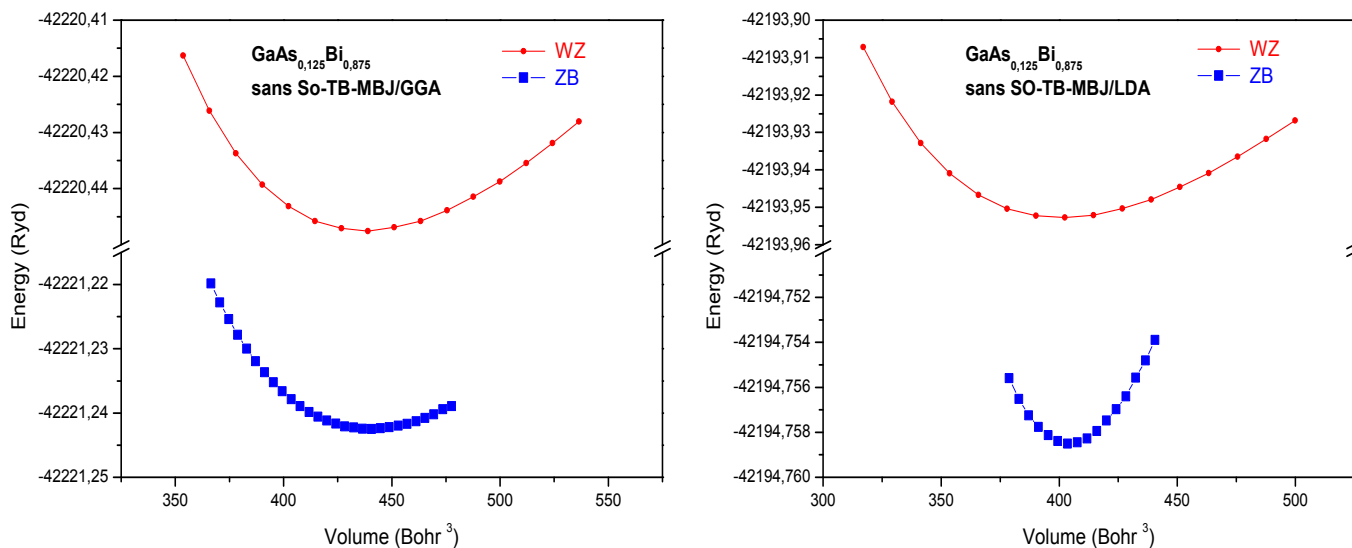


Figure 3.1.6 variation de l'énergie total en fonction du volume pour GaAs_{0.25}Bi_{0.75} sans SO-MBJ



3.1.7. Variation de l'énergie total en fonction du volume d l'alliage GaAs_{0.25}Bi_{0.75} avec SO-MBJ



3.1.8. Variation de l'énergie total en fonction du volume de l'alliage GaAs_{0.125}Bi_{0.875} sans SO-MBJ

A partir de ces résultats nous pouvons déduire les paramètres d'équilibre (paramètre de réseau, coefficient de compressibilité, dérivé de coefficient de compressibilité et l'énergie totale de cet alliage) ces résultats sont reportés dans le tableau suivant :

Tableau III.1.1 : les paramètres d'équilibre (paramètre de maille, Volume, coefficient de compressibilité, Energie d'équilibre) pour le GaAs_{1-x}Bi_x dans la phase Zinc Blende

ZB GaAs _{1-x} Bi _x		Notre travail				Autre valeurs(MBJSO)		exp
		Sans SO		Avec SO		GGA	LDA	
		GGA	LDA	GGA	LDA			
X=0.125	a(Å) V (Bohr ³) B(GPa) B E(Ryd)	5.82571 333,567488 59.0941 4.6139 -13240.43228	5.710902 314.23565 60.0129 4.9308 -13226.69568					5.73784
X=0.25	a(Å) V (Bohr ³) B(GPa) B E(Ryd)	5.92021 350.064818 54.2943 4.8199 -18070.42303	5.80508 330.03644 62.8607 4.695 -18054.80836	5.95399 356.092525 51.1709 4.3145 -18070.69077	5.80671 330.3141 63.7612 3.7269 -18054.80924	5.97 ^a 6.2 ^b 51.28 ^b	5.82 ^a 5.813 ^c 62.23	5,82244
X=0.375	a(Å) V (Bohr ³) B(GPa) B E(Ryd)	6.00059 364.51801 46.7249 4.7577 -22900.44556						5,90703
X=0.5	a(Å) V (Bohr ³) B(GPa) B E(Ryd)	6.09549 382.08765 48.1274 4.7409 -27730.41259	5.97533 359.93494 56.3509 4.2855 -27710.3145	6.14577 391.6203 44.4704 4.6131 -27730.90937	5.98368 361.445 56.182 3.7958 -27710.7844	6.16 ^a 43.78 ^a 4.47 ^a	5.991 ^b 53.91 ^a 4.6 ^a	5,99163
X=0.625	a(Å) V (Bohr ³) B(GPa) B E(Ryd)	6.20554 403.158543 39.186 4.758 -32590.44451	6.05071 373.729975 51.8496 4.8807 -32530.79415					6,07622
X=0.75	a(Å) V (Bohr ³) B(GPa) B E(Ryd)	6.27005 415.86287 39.0342 4.8878 -37390.44454	6.12517 387.69669 49.1102 4.75 -37366.07165	6.311354 424.1355 39.5347 4.7677 -37391.13289	6.13607 399.7691 49.1130 4.6144 -37366.76492	6.32 ^a 6.44 ^b 39.12 ^a 4.7677	6.19 ^a 6.156 ^c 47.02 ^a 4.6144	6,16081
X=0.875	a(Å) V (Bohr ³) B(GPa) B E(Ryd)	6.35788 433.58786 37.0599 4.7005 -42220.44746	6.1959 401.28265 47.1334 4.7122 -42193.95296					6,24541

a(1), b(2), c(3)

Tableau III.1.2 : les paramètres d'équilibre (paramètre de maille, Volume, coefficient de compressibilité, Energie d'équilibre) pour l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x dans la phase Wurzite

WZ GaAsBi		Notre travail			
		Sans SO		Avec SO	
		GGA	LDA	GGA	LDA
X=0.125	a(Å)	4,14053	4,04569		
	C(Å)	6,72745	6,56534		
	u(Å)	59.0941	60.0129		
	V (Bohr ³)	678,1832	627,99522		
	B(GPa)				
	B	-13240,59216	-13226.69568		
	E(Ryd)				
X=0.25	a(Å)	4,2161	4,11527	4.20114	4.10671
	C(Å)	6,84062	6,67703	6.91974	6.69899
	u(Å)	54.2943	62.8607		
	V (Bohr ³)	714,486	660,83742	713.7606	660.2745
	B(GPa)			51.0389	63.2642
	B	4.4678	4.62		
	E(Ryd)	-18070,69939	-18054.80836	-18070.6817	-18054.8007
X=0.375	a(Å)	4,28395	4,17734		
	C(Å)	6,94762	6,78317		
	u(Å)	46.7249			
	V (Bohr ³)	749,2889	691,74812		
	B(GPa)				
	B	-22900,79537			
	E(Ryd)				
X=0.5	a(Å)	4,34938	4,23626	4.37178	4.23929
	C(Å)	7,06405	6,88011	7.01571	6.86337
	u(Å)	48.1274	56.3509	0.3744	0.3761
	V (Bohr ³)	783,23565	721,56655	783.6409	720.85887
	B(GPa)			44.8005	52.9875
	B	4.3611	4.6927		
	E(Ryd)	-27730,90464	-27710.3145	-27730.7825	-27710.7825
X=0.625	a(Å)	4,28728	4,29088		
	C(Å)	6,96554	6,97139		
	u(Å)	39.186	51.8496		
	V (Bohr ³)	750,11438	750,11438		
	B(GPa)				
	B	-32538,77024	-32530.79415		
	E(Ryd)				
X=0.75	a(Å)	4,46737	4,34557	4.36596	4.35687
	C(Å)	7,25881	7,0609	7.09863	7.032947
	u(Å)	39.0342	49.1102	0.3773	0.3785
	V (Bohr ³)	848,04057	779,23528	847.96732	780.2168
	B(GPa)			39.4413	49.7796
	B	4.7726	4.7638		
	E(Ryd)	-37366,74344	-37366.07165	-37391.13087	-37366.7631
X=0.875	a(Å)	4,523	4,39752		
	C(Å)	7,35304	7,14905		
	u(Å)	37.0599	47.1334		
	V (Bohr ³)	879,90662	807,94		
	B(GPa)				
	B				
	E(Ryd)	-42194,75709	-42193.95296		

Tableau III.1.3 : paramètre d'équilibre de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x dans la phase Rocksalt avec correction spin-Orbite (SO) dans phase Rocksalt

Matériaux (RS)	Paramètre	Notre travail	
		GGA	LDA
GaAs _{0.75} Bi _{0.25}	a(Å)	5.99948	5.4564
	vol(Bohr ³)	296.19625	274.0785
	B(GPa)	60.235	73.0671
	B'	4.4004	4.0182
	E(Ryd)	-18070.65568	-18054.780404
GaAs _{0.5} Bi _{0.5}	a(Å)	5.75897	5.60941
	vol(Bohr ³)	322.2344	297.7752
	B(GPa)	55.4479	69.3643
	B'	4.2624	3.6555
	E(Ryd)	-27730.8798	-27710.76359
GaAs _{0.25} Bi _{0.75}	a(Å)	5.90694	5.74016
	vol(Bohr ³)	347.716775	319.086425
	B(GPa)	51.3079	61.0585
	B'	4.3126	4.7876
	E(Ryd)	-37391.10854	-37366.752537

Nous montrons dans la figure suivante la variation du volume de la maille de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du bismuth, les deux figure contiens des calcul sans correction so et l'autre figure avec correction SO , les deux variations sont très proches les uns aux autres avec presque les mêmes variations. En effet, les deux sont presque linéaire avec une très petite courbure de coefficient négative (non linéaire)t. Ce comportement indique prises en compte dans notre modèle FP-LAPW-TB-MBJ

La variation du volume est donné par les deux équations suivantes :

$$V_0^{\text{LDA}}(x) = 298.434 + 131.062 X - 11.456 X^2 \quad [\text{Bohr}^3] \quad (3a)$$

$$V_0^{\text{GGA}}(x) = 320.462 + 152.479 X - 15.708 X^2 \quad [\text{Bohr}^3] \quad (3b)$$

Ce décalage du volume de l'alliage de GaAsBi de phase Zinc Blende en fonction du composition du Bismuth (Bi) est cohérent avec le fait de remplacer l'atome de Bismuth par

la substitution dans les sites anion de sous-réseau comme (Z = 33) par la plus lourde Bi (Z= 83). L'expansion par rapport au volume entre les composés binaires GaAs et GaBi se trouve $\frac{\Delta V_0}{V_0} \approx 40.1\%$ pour LDA et $\frac{\Delta V_0}{V_0} \approx 42.7\%$ pour GGA. Ces valeurs sont très proches pour les deux approximations, et ils sont tout à fait cohérents avec un effet dû à l'augmentation de la taille atomique d'atomes Bi (Rayon atomique R_{Bi} = 1.545 Å) par rapport à As atomes (R_{As} = 1.245 Å) qu'ils remplacent sur le site d'anion

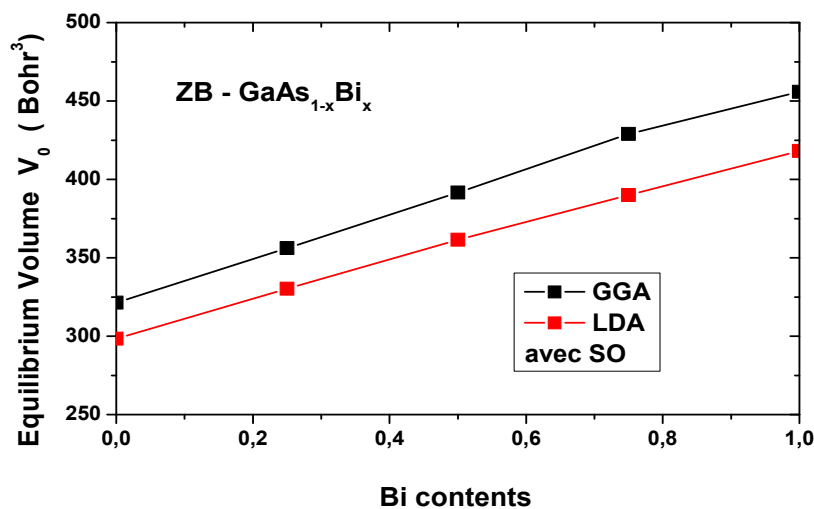


Figure 3.1.9 : Variation du Volume de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du bismuth

Nous représentons dans la figure 3.1.11 la variation de l'énergie d'équilibre total E_0 de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du composition du Bismuth (Bi), nous remarquons que l'énergie augmente avec la composition du bismuth Bi dans les deux approximations LDA et GGA, la variation de l'énergie total de l'alliage est décrite par l'équation suivante :

$$E_0^{ZB}(x) = -8400.000 - 38640.100x - 0.061x^2 \text{ [eV]}$$

A partir de ce graphe les deux courbes LDA et GGA sont presque identiques, ce changement total de l'énergie en fonction de l'augmentation du bismuth c'est $\Delta E_0/E_0 = 459\%$,

3-paramètre du maille a

Nous représentons la variation du paramètre du maille de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du composition du Bismuth (Bi) avec les deux approximation LDA et GGA , cette variation de paramètre du maille est d'écrit par une équation suivant :

$$a_0^{\text{LDA}} = 5.1614 + 0.8030 X - 0.1370 X^2 \text{ [Å]}$$

$$a_0^{\text{GGA}} = 5.7532 + 0.8470 X - 0.1354 X^2 \text{ [Å]}$$

les variations de ces courbes pour les deux approximation LDA et GGA ne sont pas linéaires , elles ont un comportement similaire avec coefficient du bowing négative $B_{a_0}^{\text{LDA}} = -0.1370$ et $B_{a_0}^{\text{GGA}} = -0.1354$, les résultats de LDA qui nous avons trouvée se sont sous-estimes et plus proche aux valeurs expérimentales par rapport aux résultats de GGA qui sont surestimes

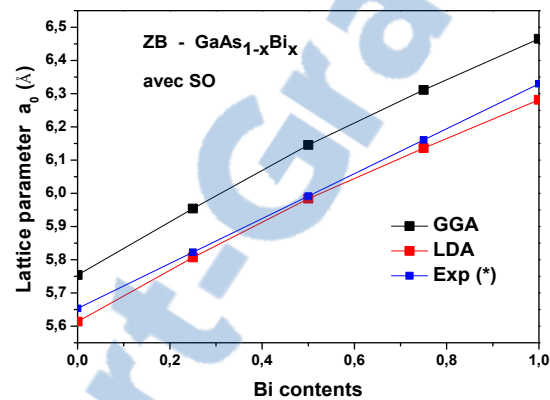
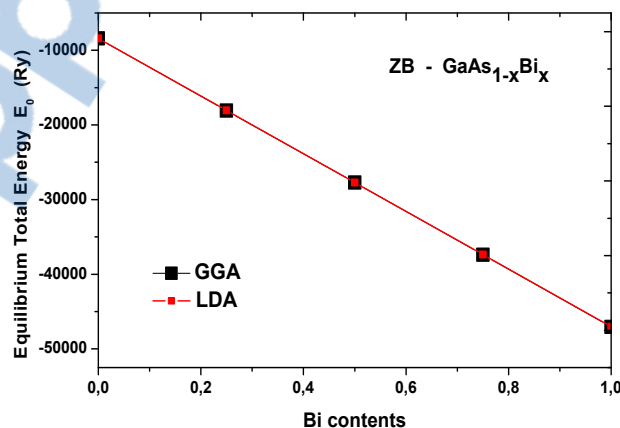


Figure 3.1.10. Variation du paramètre de la maille de l'alliage GaAsBi en fonction du bismuth



3.1.11. Variation de l'énergie de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du bismuth

3.1.2. propriétés élastiques :

3.1.2.1. Bulk modulus :

A la température zéro , le modul bulk modulus B_0 d'un matériau est défini comme l'inverse de compressibilité et donne par l'équation suivant :

$$B_0 = -V \frac{dP}{dV} = -V \frac{d^2E}{dV^2}$$

Ou le V c'est le volume , P c'est la pression , E c'est l'énergie respectivement

Le bulk modulus c'est un paramètre important dans les propriétés de matériaux GaAs_{1-x}Bi_x , pas seulement pour les propriétés élastiques et mécaniques , mais également pour les propriétés électroniques (5) , et donne un aperçu direct sur la nature et la force de plus proche voisin , et pour le paramètre du réseau (6) .les calculs purement théoriques par l'ab-initio le bulk modulus et leur dérivée sont très importants , ils sont réalisés a partir de point du vue de l'énergie totale , sans simplifications des approximations , sauf ceux qui sont prévues dans la méthode DFT-FP-LAPW , donc il est important pour compare nos calculé par d'autre calcul théorique avec qui considérons comme pseudo –empirique (5.6.7)

Nous calculs leur bulk modulus et leur dérivée de bulk modulus pour l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x dans la phase cristallin Zinc Blende par résolution de l'équation d'état de Murnaghan (équation 1) pour les deux méthodes LDA et GGA , les résultats de nos calculs donnée dans le tableau et a la figure

Dans la figure 6 nous remarquons que le coefficient bulk modulus diminue fortement et non linéaire avec Bismuth (Bi) pour les deux approximation LDA et GGA les valeur de l'approximation LDA sont toujours plus élevés par rapport à GGA , les courbes de variation de bulk modulus (B) sont donnés par les deux équations :

$$B_0^{LDA} = 73.737 - 44.078X + 16.13 X^2 \quad (\text{GPa})$$

$$B_0^{GGA} = 60.472 - 39.787 X + 15.37 X^2 \quad (\text{GPa})$$

Nous montrons dans la figure 3.1.12 la variation de dérivée de bulk modulus de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction de Bismuth (Bi) dans les deux approximation LDA et GGA , nous

remarquons que la dérivée de bulk modulus diminue jusqu'à 30-40% , après elle augmente jusqu'à atteindre la valeur du composé binaire GaBi

dans le chapitre II Les résultats de bulk modulus (B) et leur dérivée de bulk modulus qui nous avons trouvés sont en bon accord avec d'autres résultats théoriques , pour le composé GaAs bien connue , nous trouvons par l'approximation LDA $B(\text{GaAs-LDA})= 73.644 \text{ GPa}$, et a valeur expérimentale $B(\text{GaAs-Exp})=74.8 \text{ GPa}$ (8.31.32) , avec une erreur de calcul est 1.55% et les résultats de Bulk modulus sont également en bon accord avec d'autres résultats théoriques (7.8.9) et notamment avec theorie FP-LAPW LDA (9)

Les valeurs de la dérivée de bulk modulus sont reportées dans le chapitreII. Ces résultats sont en bon accord d'autre résultats théoriques et expérimentaux , donc la valeur de $B'(\text{GaAs-GGA})$ est 4.563 il est plus proche de la valeur expérimentale $B'(\text{GaAs-EXP})=4.49$ avec une erreur de calcul est 1.63% par rapport a l'approximation LDA qui nous avons trouves $B'(\text{GaAs-LDA})=4.63$ avec l'erreur de calcul est 2.90 % par rapport a l'expérimental , les résultats de LDA sont sous-estimes par rapport a GGA , il est encore plus proche a l'expérimentales par rapport a d'autre calcul théoriques LDA (8.9) sauf que la 4.487 a référence (7)

Pour le composes binaires GaBi , les résultats qui nous avons trouvées de bulk modulus (B) et leur dérivée de bulk modulus (B') sont bien accord avec d'autre calcul théoriques par les deux approximation LDA et GGA comme on peut voir dans le tableau 2 , la valeur de Bulk ($B\text{-GaBi-LDA}$) = 40.033 GPa est toujours plus elvée par rapport a GGA ($B\text{-GaBi-GGA}$) =35.93 GPa , cohérent que nous avons trouvée dans le composes GaAs et d'autre calcul théorique FP-LAPW , notre valeur de B-LDA est très proche a d'autre calcul théorique $B\text{-LDA}= 46.100 \text{ GPa}$ par PP-PW (8) et $B\text{-LDA}=46.26$ par LMTO (16) $B\text{-LDA}=45.100 \text{ GPa}$ par FP-LAPW (8) , notre valeur est plus élevée par rapport $B\text{-LDA}=43.65$ par FP-LAPW sans correction SO-TB-MBJ(14)

La valeur de derivée de bulk modulus $B'(\text{GaBi-LDA})=4.978$ est plus proche que la valeur $B'=4.9$ et $B' = 4.847$ trouvée dans les référence (12.13)

Les résultats de variation de bulk modulus pour l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth (Bi) est relativement plus proche que de ceux reporté dans les référence (9.11) et différent que

ce reporté dans la référence (10).le paramètre du bowing de bulk modulus pour LDA est b (B-LDA) = 16.13 et b (B-GGA) = 15.379 qui sont assez forte mais cas particulier a ce nous avons trouvé dans la référence (15) qui nous avons trouvé que B-GGA-sans SO=60.46 GPa et B-GGA –avec SO = 54.72 GPa

La variation de B de l'alliage en fonction du bismuth presque doit être lisse parce que c'est pas induit par la variation du volume qui est induit par la variation du paramètre du maille et la pression (5) , qui ne peut changement radical tant aucun transition de phase . Comme décrit par Cohen fond [5] et par Lam et al. [14], l'origine microscopique de cette relation B par rapport V_0 c'est la nature de force obligatoire les plus proches des voisins ou les deux effet sont dominants, le degré de covalence donnée par écart homopolaire de Phillip Eh et, ii) - le volume de la charge de la liaison qui est directement liée à la distance du plus proche voisin. Comme cela est représenté par Wang et al. [7] l'étude par la théorie PW-PP, ce peut être décrite par une formule linéaire empirique simple qui est pour matériaux III –V de phase ZB est ainsi rédigé: $B_0 = - 0.32202+0.19314/V_0$ (7a)

Dans la figure 3.1.12 nous présentons la variation de Bulk modulus B en fonction du $1/V_0$ ou le V_0 c'est la volume qui nous avons calculé par l'ab-initio dans les deux approximation LDA et GGA , la courbe de LDA est plus élevée par rapport a GGA , les résultats de LDA sont très proche a courbe de variation de méthode empirique donné par l'équation (7a) (7), Ce résultat est assez surprenant pour cette formule simple empirique qui était en fait dérivé pour les composés binaires III-V [5.7.14] , n'est pas bien pour alliage complexe et incompatible qui est le cas ici pour GaAsBi , Ce résultat suggère que les mêmes effets microscopiques sont sous-jacentes du comportement du module de compression dans le cas d'alliage GaAsBi comme dans les composés binaires simples. Le meilleur ajustement linéaire de notre calcul B_0 - LDA à être donné par l'équation suivante :

$$B_0(\text{LDA})= - 0.21068 +0.16695/V_0 \quad (7b)$$

l'équation (7b) qui nous avons trouvé est comparable avec l'équation (7a) , mais les valeur de paramètre linéaire est plus petit qui a été montré dans la référence (7) que les métaux alcalin a phase ZB a des paramètres plus petit que les composés binaires III-V , ils sont caractérisés par la relation suivant : $B_0=-0.00367+0.00488/V_0$ et d'autre part les matériaux de type diamant on beaucoup plus grand paramètre linéaire et leur variation est donnée : $B_0 = -$

$0.451 + 0.22137 / V_0$, ces résultats montrent que les paramètres que nous avons trouvés pour l'alliage GaAsBi diminuent mais ils sont plus proches des paramètres des métaux alcalins, et reflète ainsi un caractère métallique plus prononcé que dans les composés binaires III-V, GaAs qui a montré dans la réf(7) se comporte comme les composés binaires III-V, l'alliage GaAsBi se comporte comme un métal due à l'influence de l'atome lourd Bi en cas de remplacement beaucoup plus léger que des atomes sur les sites d'anions.

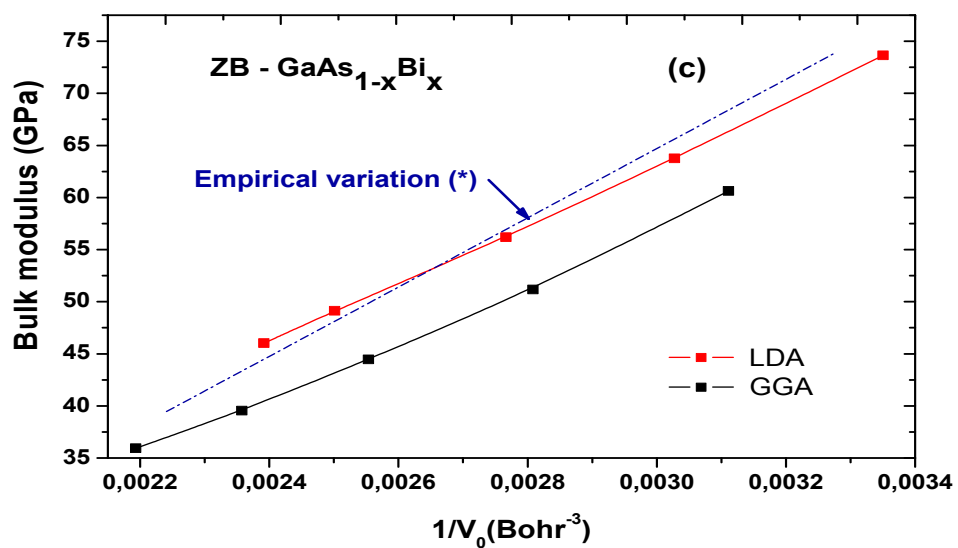
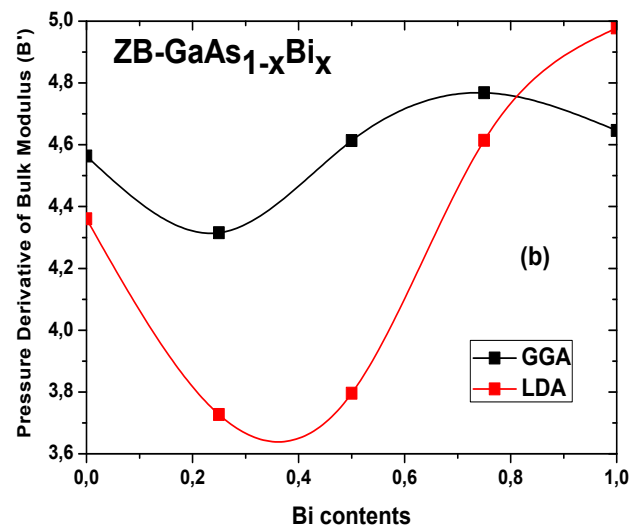
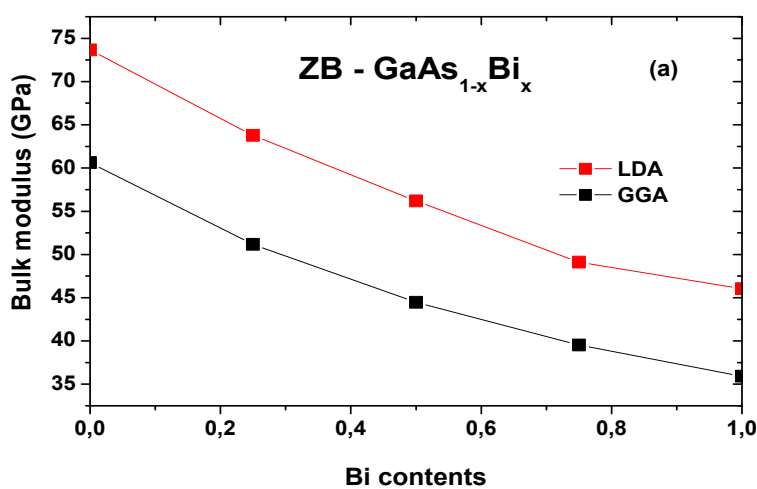


Figure 3.1.12. : Variations bulk modulus B₀ (Fig. 6(a)) et leur dérivée de bulk modulus B'₀ en fonction de la composition du Bismuth (Bi) et (Fig. 6(b)) et (Fig. 6(c)) Variations bulk modulus B₀ en fonction de volume V₀ à l'équilibre pour l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x dans la phase Zinc Blende

3.1.2.2. Coefficient élastiques et leur comportement dans l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x

Les coefficients élastiques C₁₁, C₁₂, C₄₄ et de l'alliage GaAsBi dans la phase Zinc Blende ont été calculées en résolvant l'équation Birch Murnaghan [34].

$$P = \frac{3}{2} B_0 \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{7/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} \right] \left\{ 1 - \xi \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right] \right\}$$

Où $\xi = 3 - (3/4)B'_0$ où V, B, B₀ sont respectivement le volume, le bulk modulus, et sa dérivée à pression nulle. Dans ce travail nous avons calculé les coefficients élastiques dans les deux approximations avec et sans correction spin-orbite, nous représentons sur la figure 7 et le tableau 3, nous comparons les résultats qui nous avons trouvés entre eux, nous remarquons les résultats de LDA toujours plus élevés par rapport à GGA dans les deux cas avec et sans correction, cette différence entre les résultats LDA et GGA les erreurs de calcul restent <10%, et dans la plupart des cas, il est <5% réalisés dans nos calculs par la procédure de résolution de l'équation BircheMurnaghan [15], et qui sont également estimés dans l'intervalle de 5% - 10% [16]. La différence entre les résultats GGA et LDA provient de la différence entre les approximations faites dans les méthodes ab-initio et les conséquences habituellement trouvées dans les calculs. D'après les calculs l'approximation GGA surestime le volume de la maille et l'autre l'approximation est sous-estime le volume de la maille, donc le volume est lié à propriétés élastiques d'un solide, lorsque le volume est faible donne des constantes élastiques plus élevées et lorsque le volume de la maille est grand donne des constantes élastiques faibles, Malgré ces différences, il y a des tendances claires qui sont similaires pour des données GGA et LDA, avec ou sans corrections de spin Orbit

Les valeurs théoriques de coefficients élastiques C₁₁ sont toujours supérieures à ceux C₄₄, qui sont plus élevés que ceux correspondant à des coefficients C₁₂. Ce résultat est d'accord avec les tendances globales observées dans tous les matériaux semi-conducteurs III-V [16.17].

Tout les coefficients élastiques C11 , C12 , C44 diminuent l'orsque la composition du bismuth dans l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x augmente avec l'augmentation du volume et le paramètre du maille(16.18)

Tableau III.1.4: paramètre de coefficient Cij de l'alliage GaAsBi

	C ₁₁ (GPa)		C ₁₂ (GPa)		C ₄₄ (GPa)		B ₀ ^{CJ-EBM}		B ₀ ^{ESM}	
	GGA	LDA	GGA	LDA	GGA	LDA	GGA	LDA	GGA	LDA
GaAs										
Avec SO	105.748	115.931	39.518	53.84	71.23	81.41	61.617	74.513	60.622	73.644
Sans SO	115.436	113.992	40.86	53.476	76.684	78.608	66.044	73.582	64.589	75.317
Autre résultat	124.200 ²¹	123.00 ²³	51.4 ²¹	53 ²³	63.4 ²¹	62 ²¹				
Exp	118.100 ¹⁹	122.3 ²⁰	53.2 ¹⁹	57.1 ¹⁹	59.2 ¹⁹	60 ¹⁹	74.833 ^{19,20}	76.57 ^{19,20}		
GaAs _{0.75} Bi _{0.25}										
Avec SO	91.49	97.457	31.783	45.766	64.748	74.075	51.687	62.966	51.171	63.761
Sans SO	93.218	103.242	38.091	43.375	62.701	76.319	56.871	63.325	54.294	62.861
GaAs _{0.5} Bi _{0.5}										
Avec SO	78.152	93.74	27.821	37.01	57.89	70.85	44.597	55.92	44.47	56.182
Sans SO	72.978	92.454	36.291	39.4	56.917	66.708	48.52	57.151	48.127	56.351
GaAs _{0.25} Bi _{0.75}										
Avec SO	69.993	85.775	26.2	35.636	54.0765	65.958	40.807	52.349	39.535	49.113
Sans SO	64.645	87.805	32.903	35.641	54.096	63.443	43.484	53.029	39.034	49.11
GaBi										
Avec SO	64.124	70.937	22.6	32.3	45.634	52.378	36.435	45.117	35.93	46.033
Sans SO	63.153	63.227	27.9	36.014	40.742	45.418	39.653	45.016	38.825	46.299
Autre résultat		81.6 ²²		28.1 ²²		59.7 ²²				
Exp		73 ²¹		32.7 ²¹		36.3 ²¹				

Comme on peut le voir dans le tableau III.1.4, les résultats sont en accord avec des résultats expérimentaux et théoriques disponibles dans la littérature. Dans le cas du composé binaire GaAs bien connu, nos valeurs théoriques sont en bon accord avec les autres conclusions. En effet, notre valeur pour les C11 par LDA avec calculs SO, $C_{11} = 115,931$ GPa est très proche de la valeur expérimentale $C_{11} = 118.1$ GPa rapporté dans Réf. [38], avec une erreur de mieux que de 1,85%. Notre valeur LDA-SO C11 est également très proche de la valeur la plus ancienne de $C_{11} = 122,3$ GPa donné Réf. [20], avec une erreur supérieure à 5% dans ce cas. L'accord entre nos valeurs théoriques LDA- SO C12 et les résultats expérimentaux est encore mieux pour notre $C_{12} = 53,84$ GPa avec une erreur de 1,2% par rapport à C12 expérimentale $C_{12} = 53.20$ GPa [19]. Quant à nos valeurs théoriques C44, ils sont tous un peu surestimés par rapport aux valeurs expérimentales correspondantes. L'erreur dans ce cas est de 38% pour notre plus grande valeur (LDA-SO) et de 20% pour notre plus petite valeur (GGA avec SO).

Dans le cas du composé binaire GaBi moins connu, il n'y a pas des données expérimentales disponibles. Cependant, nos valeurs théoriques sont cohérentes avec d'autres résultats théoriques. Nos valeurs LDA-SO Cij sont assez proches des résultats publiés dans les références. [21,22]. Comme concernant alliage GaAs_{1-x}Bi_x a phase Zinc Blende, il n'y a pas de données expérimentales et théoriques disponibles dans la littérature à comparer avec nos calculs Cependant, nos résultats sont cohérents avec ceux obtenus pour le binaire

Composés GaAs et GaBi. comme représenté sur la Fig. 3.1.13, tous les coefficients Cij diminuent lentement avec augmentation composition du bismuth (Bi) dans l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x, cela est en accord avec l'attente que le principal effet est dû à une augmentation du volume de la cellule de l'unité ainsi que la constante de réseau [16.18], Dans la Fig. 8, nous démontrons la propagation de l'anisotropie élastique des ondes et de son évolution par rapport à la composition de l'alliage GaAsBi Pour 3 orientation cristallin différent nous donnons donner ici les variations de longitudinale (L) et transversale (T) des ondes des coefficient élastiques du composants calculé pour 3 orientations différentes de la propagation des ondes présentée comme vecteur d'onde $k // (H, K, L)$: En Fig. 8 (a), nous considérons le $k // (100)$ pour les composantes du l'onde élastique longitudinale L100 est donné par C11 et les deux ondes transversales sont dégenéré $T=T_1=T_2$ est donné par C44, dans la fig 8 (b)

nous considérons le $k \parallel (111)$ cas pour lequel la composante des ondes élastiques longitudinale L111 est donnée par $(C_{11} + C_{12} + 2C_{44}) / 2$ et les deux composantes des ondes transversales sont représentés par T1 qui est donné par C_{44} , et T2 correspondant à $(C_{11} - C_{12}) / 2$. Dans la Fig. 8 (c), nous considérons le $k \parallel (110)$ cas pour lequel la composante longitudinale des ondes élastiques L110 est donnée par $(C_{11} + 2C_{12} + C_{44}) / 3$; et les deux composants sont transversales T dégénéré $T_1 = T_2$ et à la fois donné par $(C_{11} - C_{12} + C_{44}) / 3$. Comme illustré dans la figure Fig. 8, les composantes longitudinales élastique se trouvent toujours plus grandes que celles transversales pour tous les 3 cas qui nous avons présentes dans la figure 8. Ce comportement se retrouve pour les deux méthodes GGA et LDA. Les résultats LDA sont plus élevés que ceux GGA. Bien que les résultats GGA et LDA sont légèrement différents, il ya des tendances générales similaires dans les deux cas. En effet, nous pouvons clairement constater que les variations signalées dans la figure. 8 sont plutôt lisse, avec une légère baisse avec l'augmentation de Bi en alliage xBiGaAs1?, Et cette diminution est plus prononcée pour les composantes longitudinales que pour ceux transversales dans les 3 cas illustrés ici. Encore une fois ce résultat est assez similaire aux observations habituelles de semi-conducteurs III-V et les alliages métalliques [16.18]

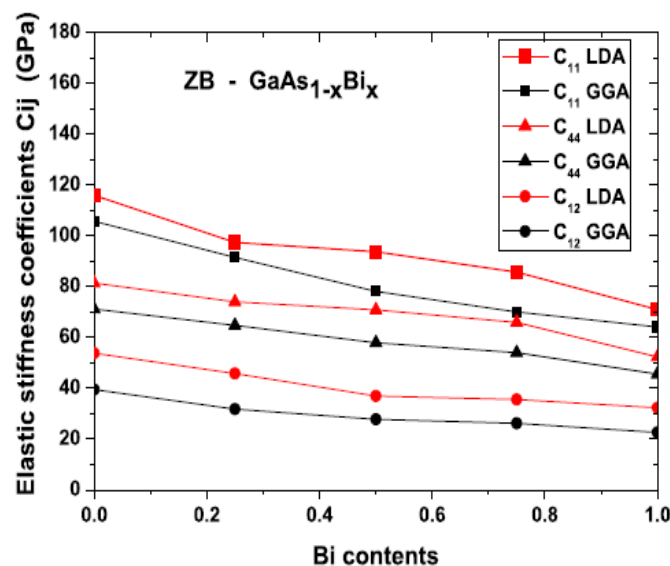


Fig 3.1.13 : variation de coefficient Cij de l'alliage GaAsBi en fonction du Bismuth (Bu)

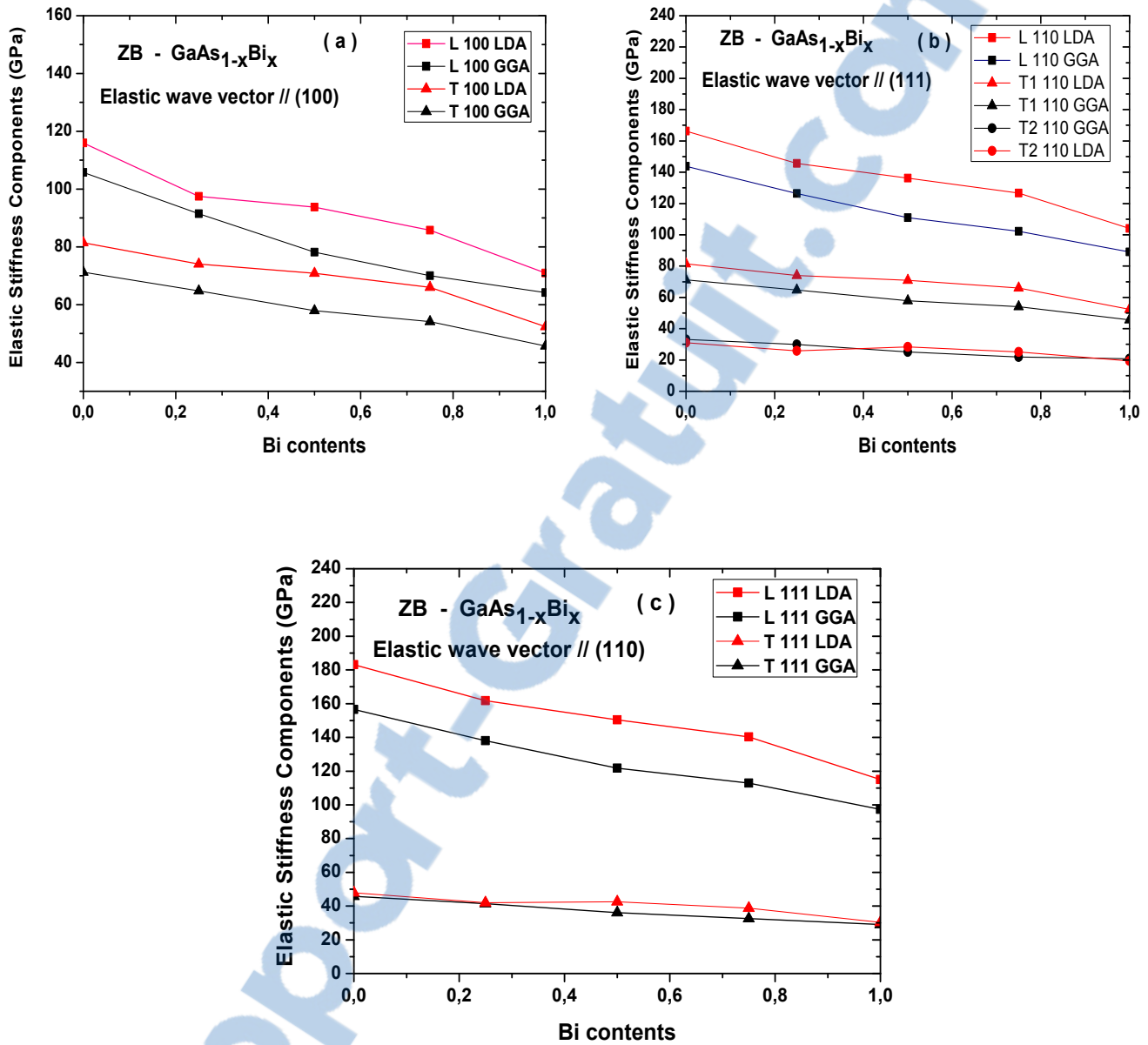


Figure 3.1.14 : variation de coefficient elastiques des ondes longitudinal et transversal pour 3 orientation de vecteur d'onde (a) K // 100, (b) // 111 , (c) //110

3.1.3. Propriétés électroniques :

Nous avons calculé les propriétés électroniques telle que la structure du bande et densité d'état de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x, donc nous représentons les structure de bande et densité d'état de chaque composition du l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x pour les deux calcul (sans correction MBJ et avec correction MBJ-SO) pour different phase cristallin et chaque phase dans deux approximation. Pour le calcul avec correction nous avons calculé l'alliage de composition x=

0.25

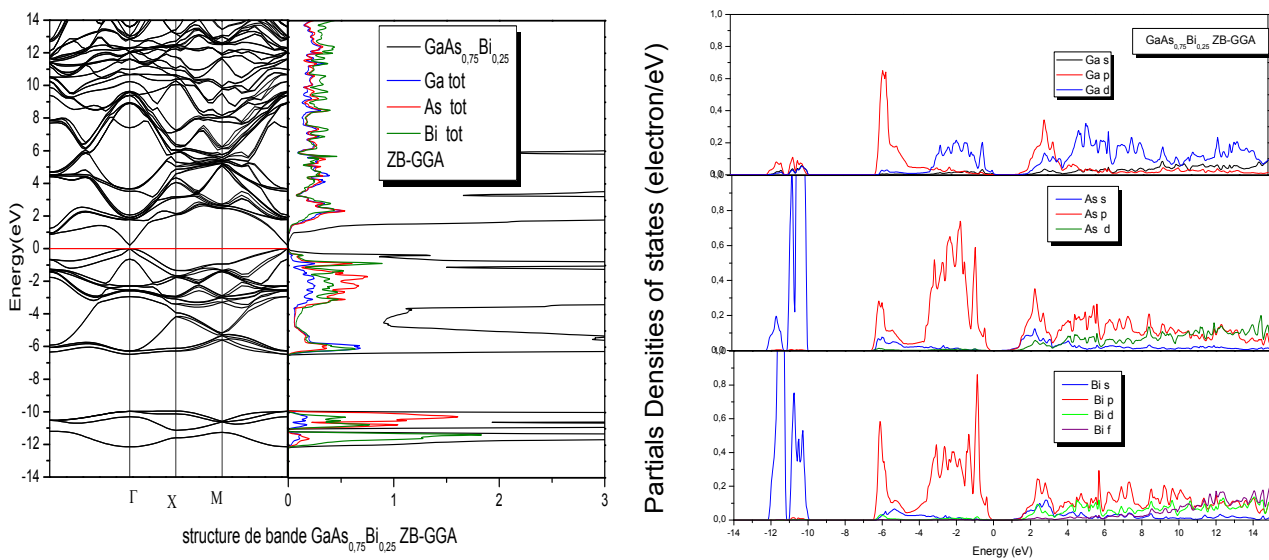


Figure 3.1.15 : structure de bande GaAs_{0.75}Bi_{0.25} ZB –GGA-(avec MBJ-SO)

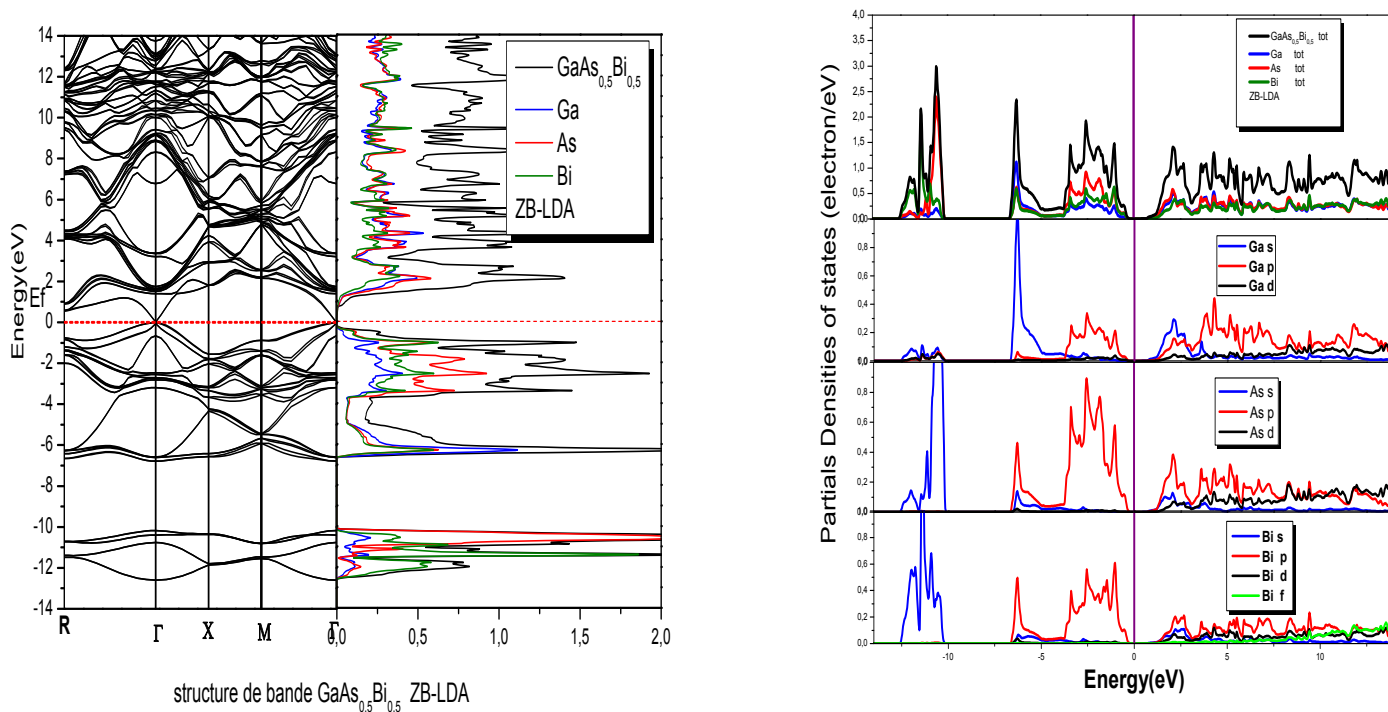


Figure 3.1.16 : structure de bande GaAs_{0.5}Bi_{0.5} ZB –GGA-(avec MBJ-SO)

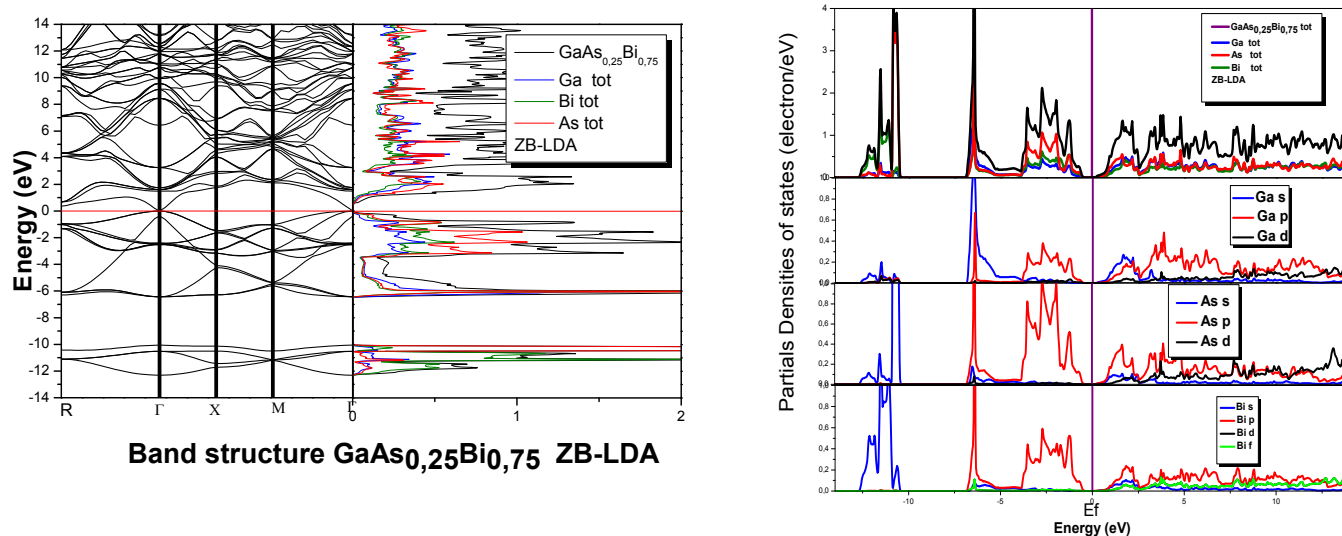
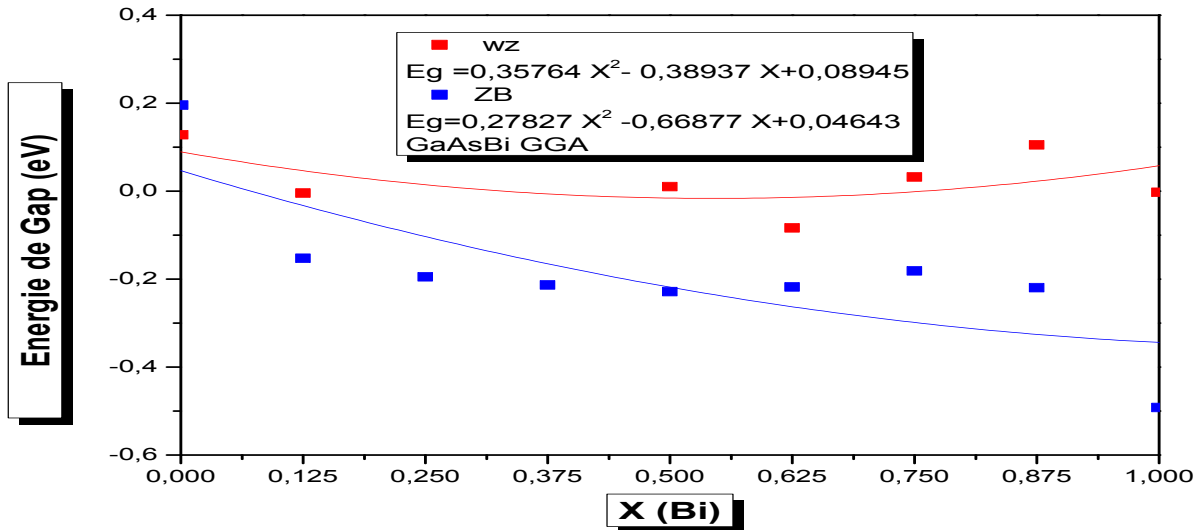
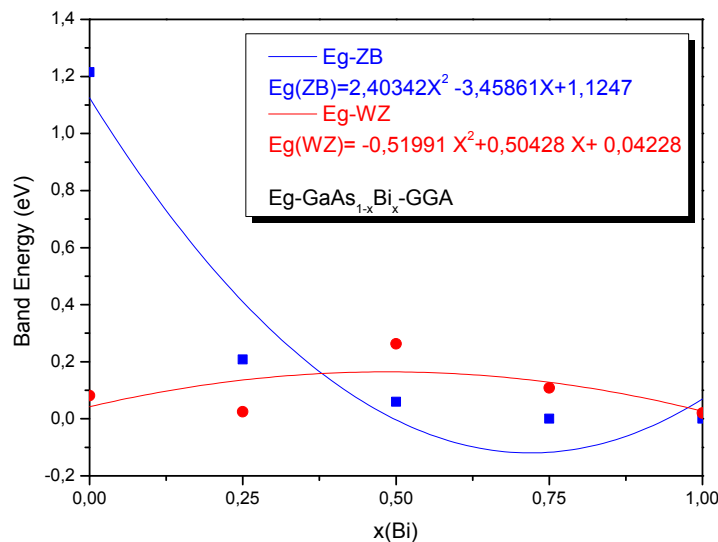


Figure 3.1.17 : structure de bande GaAs_{0.25}Bi_{0.75} ZB –LDA-(avec MBJ-SO)

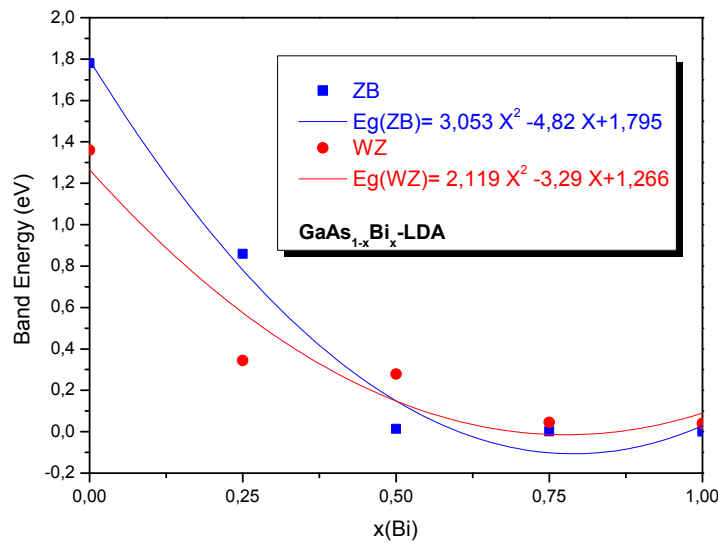
la variations de l'énergie du gap pour l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x de tout la gamme de composition sont représentés dans les figures suivant :



3.1.18. Variation de l'énergie de bande interdit de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth (Bi) sans mbj



3.1.19. Variation de l'énergie de bande interdit de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth (Bi) avec mbj-gga



3.1.20. Variation de l'énergie de bande interdit de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth (Bi) avec mbj-lda

Nous avons trouvés que pour les trois compositions de l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x la structure de bande est de nature de gap direct au le maximum de bande de valence est situé au point Γ et le minimum de bande de conduction est situe au point Γ et cette nature est très intéressant pour les application optoélectroniques tell que les diode laser et les lasers , l'énergie du gap de l'alliage , il diminue avec l'augmentation du composition du Bismuth a cause de de matériaux Binaire GaBi qui gap semi métal ($E_g=0$ eV) , avec correction MBJ –spin orbite qui v'a augmenté la valeurs de l'énergie du gap donc les énergies pour les deux bandes valence et conduction autour de valeurs de l'énergie du gap (expérimentales ou théorique) par rapport au calcul sans correction qui donne des valeurs tres faible comparaison avec les valeurs expérimentaux

Densité d'état (DOS) :

Nous avons calculé la densité d'état de l'alliage de GaAs_{1-x}Bi_x pour toute la gamme de composition d'alliage. Parmi ces compositions qui nous avons étudié on propose la composition de l'alliage GaAs_{0,5}Bi_{0,5} pour la phase Zinc Blende, où l'alliage est stable dans cette phase, on représente schéma de la densité d'état dans la figure

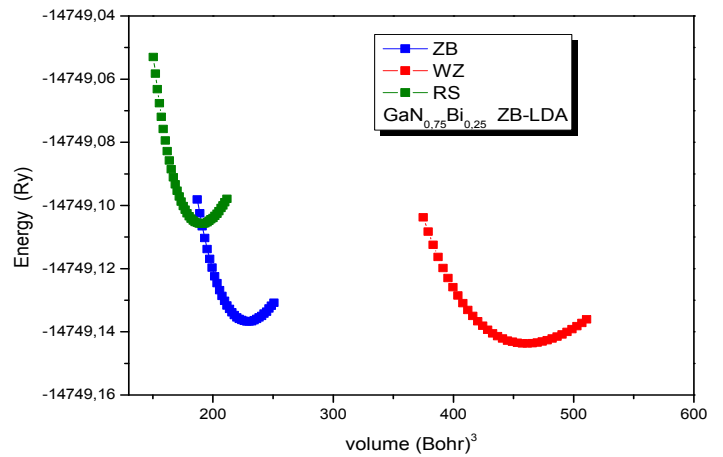
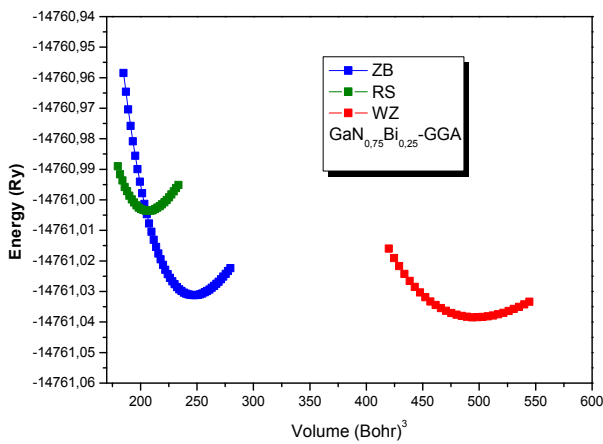
Pour l'alliage de composition $GaAs_{0.5}Bi_{0.5}$ du phase Zinc Blende, on remarque que la densité est divisée en 3 région (-10 eV, -9 eV), (-5 eV, -4 eV), (-1 eV, 1 eV) (2eV, 14 eV)

La première région représente la région des électrons de cœur qui est dominé par l'orbital S des deux atomes arsenic (As) et Bismuth (Bi) et pour la deuxième région c'est la région du des électron de cœur de l'alliage est dominé par l'orbital S du l'atome du galium (Ga) et pour la troisième région juste avant et après au niveau de fermé c'est l'orbital P de l'atome d'Arсениc (As) et pour la quatrième région après le niveau de fermé cette région est dominé par l'orbital P par l'atome de galium (Ga) dans tout la région du bande de conduction donc l'orbital p de l'atome d'Azote c'est Par augmentation de concentration de l'azote dans le binaires $GaAs$ on remarque que la l'orbital p de l'atome d'azote qui domine dans l'alliage $GaAs_{1-x}Bi_x$

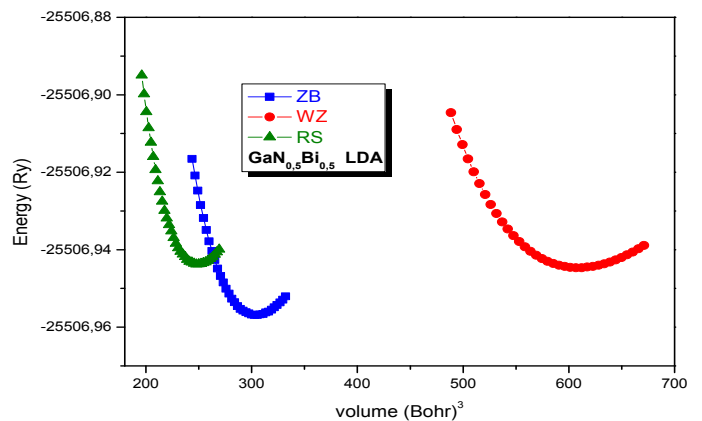
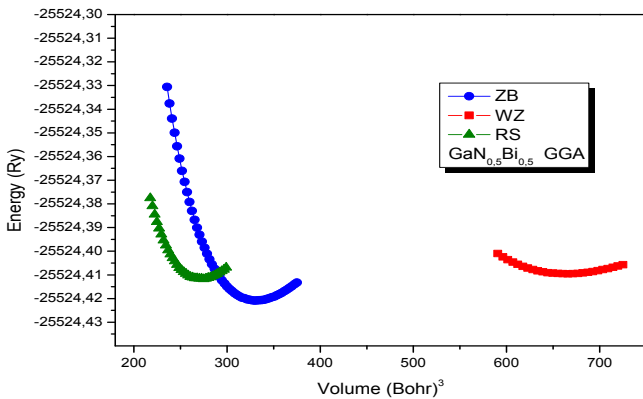
4 Etude des propriétés structurales et électroniques de l'alliage ternaires GaN_{1-x}Bi_x

4.1. Propriétés structurales

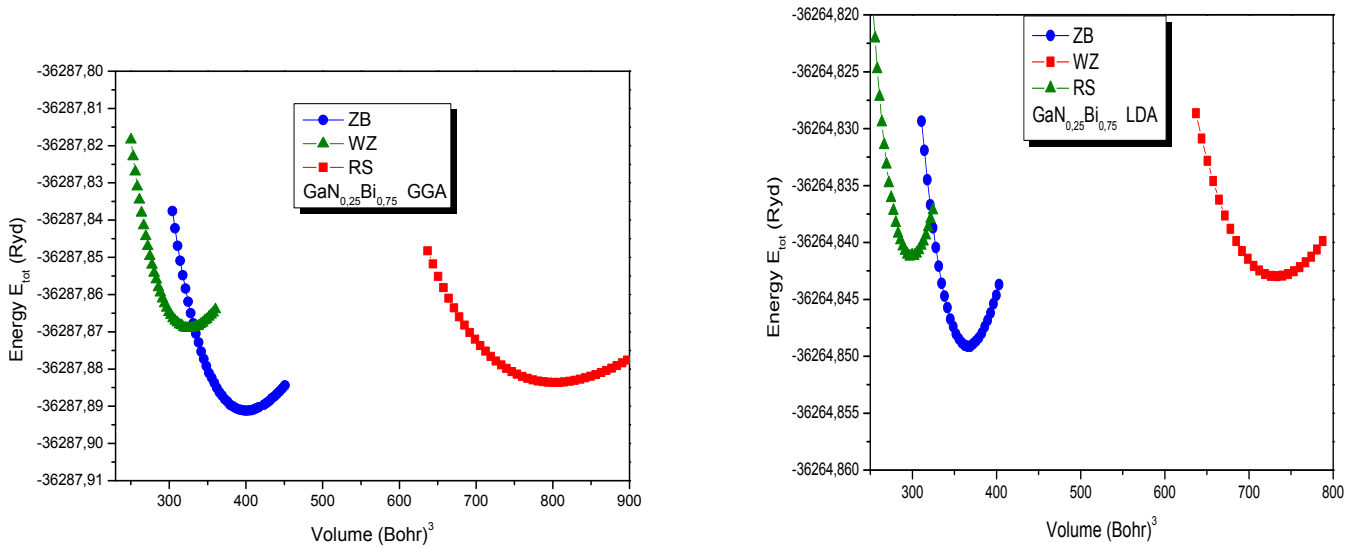
Nous avons étudié les propriétés structurales de l'alliage ternaire GaN_xBi_{1-x} pour toute la gamme de composition de l'alliage par la méthode abinito basé sur la théorie FP-LAPW dans les trois phases Zinc Blende et la wurzite, Rocksalt on a fait choisie pour le potentiel d'échange et de corrélation les deux approximations LDA et GGA avec correction Spin-Orbite avec TB-MBJ



3.2.1. Figure variation de l'énergie total de l'alliage GaN_{0.75}Bi_{0.25} avec SO-MBJ



3.2.2. Figure variation de l'énergie total de l'alliage GaN_{0.5}Bi_{0.5} avec SO-MBJ



3.2.3. Figure variation de l'énergie total de l'alliage GaN_{0.25}Bi_{0.75} avec SO-MBJ

A partir de ces trois figures de variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x, nous remarquons qu'il y a un changement de phase cristalline, pour la composition de $x=0$ c'est le binaire GaN vers la composition de l'alliage $x=0.25$ la phase wurzite c'est la phase la plus stable, et pour la composition de $x=0.25$ jusqu'à $x=1$ c'est le binaire GaBi la phase Zinc Blende c'est la phase la plus stable.

On peut déduire les paramètres d'équilibre de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x pour les deux phases Zinc Blende et wurzite.

Tableau III.2.1 : paramètre d'équilibre de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x pour la phase zinc blende

GaN _{1-x} Bi _x (ZB)		Nos valeurs		Autre valeurs	exp	erreurs	
		LDA	GGA	LDA		LDA	GGA
GaN _{0.75} Bi _{0.25}	a(Å)	5.13916	5.27283	5.21 ^c	4.9575	a-Eexp=3.664%	a-Eexp= 6,361%
	V(Bohr) ³	228.98827	247.32635			a-Thé=1.21%	
	B(GPa)	99.726	78.3232	99.593 ^c		B-thé=0.13%	
	B'	4.6101	4.4127	4.27 ^c			
	E(Ry)	-14749.13673	-14761.03127				
GaN _{0.5} Bi _{0.5}	a(Å)	5,66741	5,80456	5.615 ^c	5.415	a-Eexp=4.661%	a-Eexp= 7,194%
	V(Bohr) ³	309,2036	330,5896			a-Thé=0.93%	
	B(GPa)	63,412	47,879	92.95 ^c		B-thé=31.77%	
	B'	4.77029	4.59741	4.58 ^c			
	E(Ry)	-25506,95841	-25524,42325				
GaN _{0.25} Bi _{0.75}	a(Å)	6.0114	6.19387	5.836 ^c	5.8725	a-Eexp=2.365%	a-Eexp= 5,472%
	V(Bohr) ³	366.49225	400.889325			a-Thé=3%	
	B(GPa)	51.0212	39.8028	105.842 ^c		B-thé=51.79%	
	B'	4.3773	4.4366	3.22 ^c			
	E(Ry)	-36264.8491	-36287.89119				

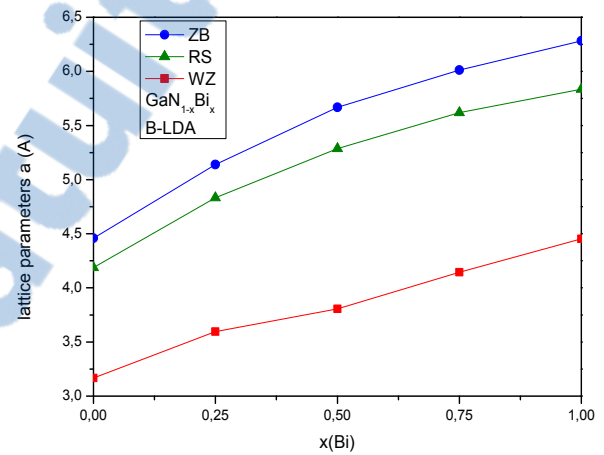
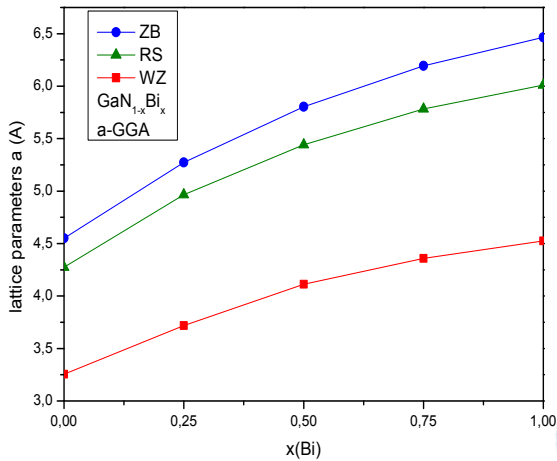
c(4)

Tableau III.2.2 : paramètre d'équilibre de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x pour la phase wurzite

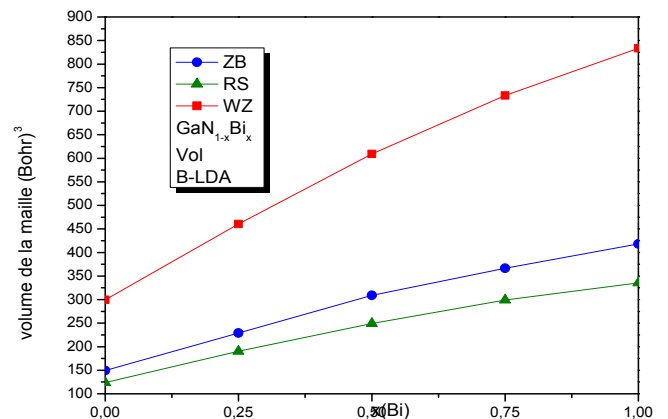
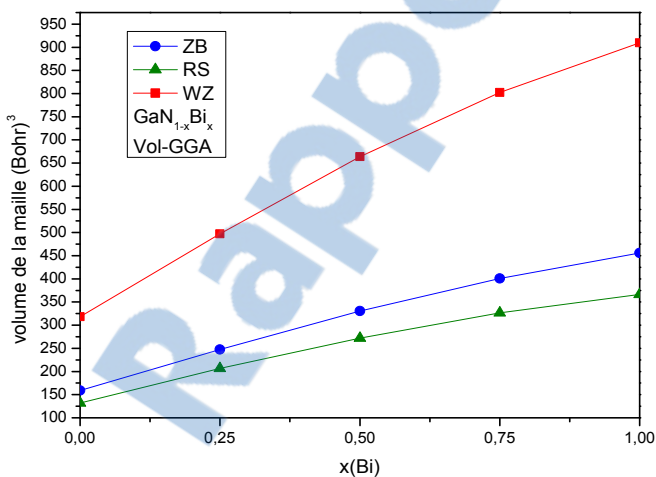
GaN _{1-x} Bi _x (WZ)		Nos valeurs		Autre valeurs	exp	erreurs	
		LDA	GGA	LDA		LDA	GGA
GaN _{0.75} Bi _{0.25}	a(Å)	3.59587	3.71889	3.48 ^e	3.513215 5.7121425	Exp(a)=0.67%	Exp(a)=2.09%
	c(Å)	6.09582	6.15168	5.55 ^e		Exp(c)=1.49%	Exp(c)=1%
	u(Å)	0.3639	0.3730			Th(a)=0.40%	Th(a)=1.24%
	V(Bohr) ³	460.646175	497.22085			Th(c)=0.73%	Th(c)=2.02%
	B(GPa)	98.8330	79.1056	101.3 ^e		exp(B)=1.01%	Exp(B)=11.03%
	B'	4.5638	4.6413	4.48 ^e		th(B)=7.52%	Th(B)=0.86%
	E(Ry)	-14749,1477	-14761,03847				
GaN _{0.5} Bi _{0.5}	a(Å)	3.80697	4.11214	3.82 ^e	3.83743 6.239285	Exp(a)=2.35%	Exp(a)=5.85%
	c(Å)	6.19177	6.71973	6.15 ^e		Exp(c)=6.72%	Exp(c)=7.69%
	u(Å)	0.3773	0.3819			Th(a)=3.33%	
	V(Bohr) ³	609.13477	664.073325			Th(c)=9.83%	
	B(GPa)	64.0758	48.4899	68.1 ^e		th(B)=2.43%	
	B'	4.6107	4.9808	4.66 ^e			
	E(Ry)	-25506.9446	-25524.40953				
GaN _{0.25} Bi _{0.75}	a(Å)	4.14391	4.35828	4.17 ^e	4.161645 6.76643	Exp(a)=0.79%	Exp(a)=7.15%
	c(Å)	6.68112	7.22846	6.63 ^e		Exp(c)=0.76%	Exp(c)=7.70%
	u(Å)	0.3765	0.3819			Th(a)=0.34%	
	V(Bohr) ³	733.07475	802.4252			Th(c)=0.68%	
	B(GPa)	51.1530	38.8452	50.1 ^e		th(B)=5.91%	
	B'	4.6165	4.5772	3.63 ^e			
	E(Ry)	-36264.843	-36287.88257				

e(4)

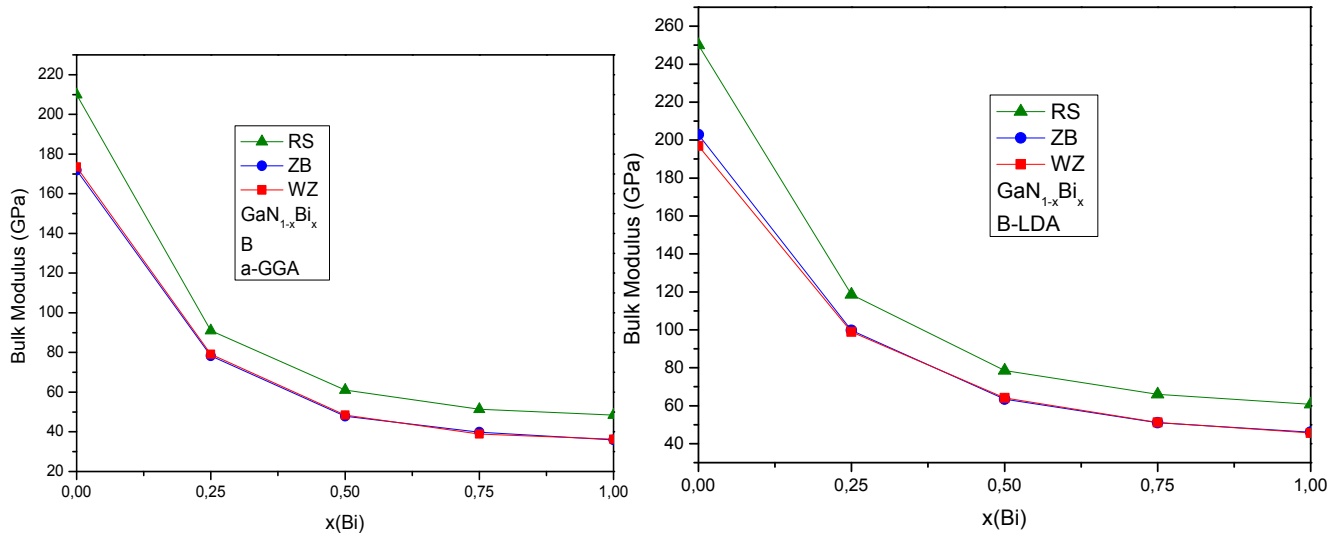
Nous reportons les variations de paramètre de maille et le volume de la maille et l'énergie et leur bulk modulus pour l'alliage GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth pour les trois phase dans les figures suivant



3.1.4 Variation du paramètre du maille de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth pour les deux approximation (a-GGA , B-LDA)



3.1.5. Variation du volume de la maille de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth pour les deux approximation (a-GGA , B-LDA)



3.1.6. Variation du bulk modulus de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth pour les deux approximations (a-GGA, B-LDA)

dans figure 3.1. Nous représentons la variation du paramètre du maille de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x en fonction du composition du Bismuth (Bi) avec les deux approximation LDA et GGA , cette variation de paramètre du maille est d'écrit par une équation suivant :

$$a_{(ZB)}^{GGA} = 4.55818 + 3.09362 X - 1.19357 X^2 \quad [\text{Å}]$$

$$a_{(WZ)}^{GGA} = 3.25258 + 2.11697 X - 0.84543 X^2 \quad [\text{Å}]$$

$$a_{(ZB)}^{LDA} = 4.46541 + 2.95262 X - 1.1464 X^2 \quad [\text{Å}]$$

$$a_{(WZ)}^{LDA} = 3.19375 + 1.37539 X - 0.12773 X^2 \quad [\text{Å}]$$

les variations de ces courbes pour les deux approximation LDA et GGA ne sont pas linéaires , elles ont un comportement similaire avec coefficient du bowing négative pour les deux approximation LDA et GGA , les résultats de LDA qui nous avons trouvée se sont sous-

estimes et plus proche aux valeurs expérimentales par rapport aux résultats de GGA qui sont surestimes

dans la figure 3.2. la variation du volume de l'alliage GaN_{1-x}Bi_x en fonction du Bismuth ,La variation du volume est donné par les équations suivantes :

$$V_{0}^{LDA}(ZB) = 148.406 + 359.318 X - 89.532 X^2 \quad [\text{Bohr}^3]$$

$$V_{0}^{LDA}(WZ) = 298.232 + 703.085 X - 166.97 X^2 \quad [\text{Bohr}^3]$$

$$V_{0}^{GGA}(ZB) = 157.8799 + 389.9729 X - 91.0117 X^2 \quad [\text{Bohr}^3]$$

$$V_{0}^{GGA}(WZ) = 315.9455 + 792.6132 X - 197.318 X^2 \quad [\text{Bohr}^3]$$

les variations de ces courbes pour les deux approximation LDA et GGA ne sont pas linéaires, elles ont un comportement similaire avec coefficient du bowing négative pour les deux approximation LDA et GGA mais pour la phase wurzite est le double de zinc blende a cause de comportement du fait que wurzite est comporte 4 atome par rapport a zinc blende qui comporte deux atome

cette augmentation du volume donne un aperçu sur les force qui est appliqué aux alliage donc le bulk modulus qui est liée au ces forces , deduire que le bulk modulus diminue qu'on le volume augmente en fonction du composition du bismuth Bi qui représenté dans la figure 3.3

5. conclusion :

a partir de cette etude nous avons trouvés que l'alliage GaAs_{1-x}Bi_x est cristallise dans la phase Zinc Blende pour tout la gamme de compositions du Bismuth (Bi),le paramètre de volume et le paramètre de maille augmente en fonction du la composition du Bismuth induit l'inverse de volume c'est le coefficient de compressibilité qui diminue qu'on la compositions du bismuth augmente , pour les propriétés électroniques le gap est direct pour tout la gamme de composition du Bismuth avec une variation non lineaire de l'energie du gap diminue avec augmentation du Bi

pour l'alliage GaN_{1-x}Bi_x nous avons trouvés est cristallise dans la phase Wurzite pour les composition qui est inferieur a $x \leq 0.25\%$ et pour le reste du composition jusqu'a 100% ou

c'est le matériaux Binaire GaBi la phase plus stable c'est la phase zinc blende, les resultat qui nous avons trouvés sont en bon accord avec d'autre resultat et experimentales pour les deux alliages ternaires , ces resultat sont très interessant pour etudies les hetersotstructure GaAsBi/GaAs et GaNBi/GaN

Référence :

- 1- A. Abdiche, H. Abid, R. Riane, A. Bouazza, Phys. B 405 (2010) 2311
- 2- A.H. Reshak, H. Kamarudin, S. Auluck, I.V. Kityk, J. Solid State Chem. 186 (2012) 47
- 3- H. Achour, S. Louhibi, B. Amrani, A. Tebboune, N. Sekkal, Superlattices Microstructure. 44 (2008) 223.
- 4-M. Mbarki and A. Rebey, J. Alloys. Comp. 530, 36 (2012)
- 5-Marvin L. Cohen, Phys. Rev. B32 (1985) 7988.
- 6- H.J. McSkimin, A. Jayaraman, P. Andreatch, J. Appl. Phys. 38 (1967) 2362.
- 7- S.Q. Wang, H.Q. Ye, Phys. Rev. B 66 (2002) 235111.
- 8- A. Janotti, S.H. Wei, S.B. Zhang, Phys. Rev. B 65 (2002) 115203.
- 9- A. Abdiche, H. Abid, R. Riane, A. Bouazza, Phys. B 405 (2010) 2311.
- 10-A.H. Reshak, H. Kamarudin, S. Auluck, I.V. Kityk, J. Solid State Chem. 186 (2012) 47.
- 11- H. Achour, S. Louhibi, B. Amrani, A. Tebboune, N. Sekkal, Superlattices Microstruct. 44 (2008) 223.
- 12 D. Koller, P. Blaha, Phys. Rev. B83 (2011) 195134.
- 13- S. Tixier, M. Adamcyk, T. Tiedje, S. Francoeur, A. Mascarenhas, P. Wei, F. Schiettekatte, Appl. Phys. Lett. 82 (2003) 2245.
- 14- Pul K. Lam, Marvin L. Cohen, G. Martinez, Phys. Rev. B 35 (17) (1987) 9190.
- 15F. Birch, J. Geophys. Res. 57 (1952) 227.
- 16- H.M. Ledbetter, R.P. Reed, J. Phys. Chem 2 (3) (1973) 531.
- 17-T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, J. Phys. Condens. Matter 8 (18) (1996) 3111.
- 18- Per Soderlind, Olle Eriksson, J.M. Wills, A.M. Boring, Phys. Rev. B 48 (9) (1993) 5844.
- 19-R. Weil, W.O. Groves, J. Appl. Phys. 39 (1968) 4049.
- 20-C.W. Garland, K.C. Park, J. Appl. Phys. 33 (1962) 759.
- 21- S.Q. Wang, H.Q. Ye, Phys. Status Solidi B 240 (1) (2003) 45.
- 22-M. Ferhat, A. Zaoui, Phys. Rev. B 73 (2006) 115107.
- 23-O.H. Nielsen, R.M. Martin, Phys. Rev. B 32 (1985) 3792.

Chapitre 4

Etude des nanostructures Lasers de Puits Quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaAs

1. Introduction

2. Etude ***k.P*** des nanostructures GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaAs

3. Etude d'optimisation des nanostructures Lasers à puits quantiques
 - 3.1. Etude d'optimisation des Lasers à puits quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs
 - 3.2. Etude d'optimisation des Lasers à puits quantiques de GaN_{1-x}Bi_x/GaAs

4. Conclusion

1. Introduction :

Dans ce chapitre IV, nous procédons à une étude d'optimisation détaillée des nanostructures Laser à Puits Quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN.

Dans une 1^{ère} partie de ce chapitre, nous commençons d'abord par procéder à une étude *k.P* des nanostructures à Puits Quantiques proprement dites. Il s'agit ici de déterminer les différents états liés dans les 2 types de Puits Quantiques, en bande conduction et en bande de valence, ainsi que leurs principales propriétés qui auront une importance capitale pour l'étude du fonctionnement et l'optimisation du Laser. Nous étudions le confinement et la dispersion des différents états des puits quantiques en bande de conduction et en bande de valence et ce, pour différentes compositions d'alliages de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN et pour différentes géométries: largeur de puits, hauteurs de barrière,...

Il est important de noter que le désaccord de maille et de structure (cubique Zinc-Blende versus hexagonale-Würtzite) entre ces différents matériaux, joue également ici un rôle primordial dans ce genre de structures, car il se traduit par une contrainte bi-axiale dans le plan des différentes couches dont on doit tenir compte dans notre formalisme *k.P*.

Au-delà d'une valeur critique, le désaccord de maille et de structure se traduit par une limite de la possibilité de concevoir et de fabriquer des nanostructures de qualité suffisante à cause de la présence de défauts qui jouent le rôle de centres de recombinaisons non radiatives qui annihilent les photons et détériorent sévèrement le gain Laser.

En-dessous de cette valeur critique, ce désaccord engendre une contrainte anisotrope avec une composante hydrostatique et une composante de cisaillement, qui auront un effet important sur les états électroniques confinés dans ces puits quantiques et leur comportement dans le fonctionnement du Laser.

Cette étude *k.P* nous a permis ainsi de déterminer exactement les gammes de compositions d'alliages permises dans les deux cas pour les 2 types de puits quantiques qui nous

intéressent : GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN. Ce faisant, nous avons pu déterminer les gammes de longueurs d'ondes accessibles pour les Lasers dans les deux cas.

Ensuite, dans une 2^{ème} partie de ce chapitre, forts des résultats détaillés de notre étude *k.P* précédente, nous avons pu procéder aux études d'optimisation proprement dite des deux types de Lasers à nanostructures semiconductrices de puits quantiques : GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN. Il s'agit ici de déterminer les principaux paramètres de fonctionnement du Laser et de les optimiser, i.e. trouver les meilleurs compromis sur les nanostructures Lasers. Les principaux paramètres que nous avons étudié, sont la longueur d'onde d'émission du Laser, le gain Laser et la densité de courant de seuil Laser.

2. Etude *k.P* des hétérostructures GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN

Afin de procéder à notre étude d'optimisation détaillée des nanostructures Laser à Puits Quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN, nous devons d'abord procéder à une étude *k.P* de ces nanostructures. Les nanostructures Lasers à puits quantiques que nous avons choisi pour notre étude, sont de type I telles que représentées sur la figure IV.1.

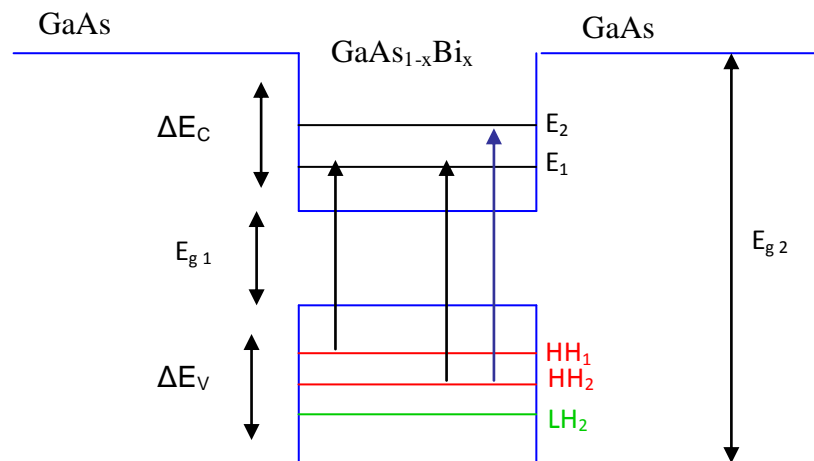


Figure IV.1 : hétérostructure à puits quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs montrant les transitions possibles.

Pour les étudier, nous devons d'abord étudier les éléments qui les composent, à savoir, les matériaux tridimensionnels binaires GaAs, GaN, GaBi et les ternaires GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x. Ensuite, nous passerons aux structures 2D proprement dites : les puits quantiques GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN

2.1. Etude $k.P$ des composés binaires GaAs, GaBi, GaN et alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x

Dans le chapitre II, notre calcul ab-initio nous a permis de déterminer les structures de bandes de GaBi, GaAs et GaN et d'en déduire que ces matériaux sont caractérisés par un gap direct. Dans ce modèle, dit de Luttinger-Kohn, les états de bandes de conduction et de valence autour du gap d'un semiconducteur sont les mieux représentés par une Matrice 8x8 qui tient compte du spin (dégénérescence 2) et des interactions entre les 4 bandes suivantes :

- La bande de conduction la plus basse notée BC et
- Les 3 bandes de valences supérieures qui sont :
 - La bande de trous légers LH
 - La bande de trous lourds HH
 - La bande du couplage spin-orbite SO

Les états de ces bandes sont représentés dans la base ci-dessous et les interactions sont décrites par un Hamiltonien de Kohn-Luttinger de dimension 8x8 comme suit :

$$|is \uparrow\rangle |is \downarrow\rangle |3/2, 3/2\rangle |3/2, 1/2\rangle |3/2, -1/2\rangle |3/2, -3/2\rangle |1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle$$

$$H^{(hkl)} = \begin{bmatrix} A' & 0 & S & T & \frac{R}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{T}{2} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} R \\ 0 & A' & 0 & \frac{S}{\sqrt{3}} & T & R & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} S & -\frac{T}{\sqrt{2}} \\ S^* & 0 & P+Q & D & C & 0 & \frac{D}{\sqrt{2}} & C\sqrt{2} \\ T^* & \frac{S}{\sqrt{3}} & D^* & P-G & 0 & C & -Q\sqrt{2} & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} D \\ \frac{R^*}{\sqrt{3}} & T^* & C^* & 0 & P-Q & -D & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} D^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & 0 & C^* & -D^* & P+Q & -Q\sqrt{2} & \frac{D}{\sqrt{2}} \\ \frac{T^*}{\sqrt{2}} & -S^* \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{D^*}{\sqrt{2}} & -Q\sqrt{2} & -\frac{D\sqrt{3}}{\sqrt{2}} & -C\sqrt{2} & P-\Delta & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} R^* & -\frac{T^*}{\sqrt{2}} & C^* \sqrt{2} & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} D^* & Q\sqrt{2} & \frac{D}{\sqrt{2}} & 0 & P-\Delta \end{bmatrix}$$

où les éléments du tenseur sont donnés par les grandeurs suivantes :

$$A' = E_C + \frac{n^2 K^2}{2m_c}$$

$$S = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle is | H | X' + iY' \rangle$$

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle is | H | X' - iY' \rangle$$

$$T = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \langle is | H | Z' \rangle$$

$$C = \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle X' + iY' | H | X' - iY' \rangle$$

$$D = -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle X' + iY' | H | Z' \rangle$$

$$P = \frac{1}{3} \langle X' + iY' | H | X' + iY' \rangle + \frac{1}{3} \langle Z' | H | Z' \rangle$$

$$Q = \frac{1}{6} \langle X' + iY' | H | X' + iY' \rangle - \frac{1}{3} \langle Z' | H | Z' \rangle$$

Bande de conduction

La matrice 2x2 s'écrit :

$$H = \begin{bmatrix} A_C & \Omega_C \\ \Omega_C^* & B_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{A_C + B_C}{2} & 0 \\ 0 & \frac{A_C + B_C}{2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{A_C + B_C}{2} & \Omega_C \\ \Omega_C^* & \frac{A_C - B_C}{2} \end{bmatrix}$$

$$A_C = A' + \left[SS + TT^* + \frac{RR^*}{3} \right] \left(\frac{1}{E_g} \right) + \left(\frac{TT^*}{2} + 2 \frac{RR^*}{3} \right) \left(\frac{1}{E_g + \Delta} \right)$$

$$B_C = A' + (RR^* + TT^* + \frac{SS^*}{3}) \left(\frac{1}{E_g} \right) + \left(\frac{TT^*}{2} + \frac{2SS^*}{3} \right) \left(\frac{1}{E_g + \Delta} \right)$$

$$\Omega_C = \frac{1}{\sqrt{3}} (S^*T + TRT^*) \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta} \right)$$

Bande de valence

La matrice 4x4 s'écrit :

$$\begin{bmatrix} (P+Q) - \frac{SS^*}{E_g} & D - \frac{S^*T}{E_g} & C - \frac{RS^*}{E_g\sqrt{3}} & 0 \\ D^* - \frac{ST^*}{E_g} & (P-Q) - \frac{TT^*}{E_g} - \frac{SS^*}{3E_g} & -(RT^* + S^*T) \left(\frac{1}{E_g\sqrt{3}} \right) & C - \frac{RS^*}{E_g\sqrt{3}} \\ C^* - \frac{R^*S}{E_g\sqrt{3}} & -(R^*T + ST^*) \left(\frac{1}{E_g\sqrt{3}} \right) & (P-Q) - \frac{TT^*}{E_g} - \frac{RR^*}{3E_g} & -D - \frac{RT^*}{E_g} \\ 0 & C^* - \frac{R^*S}{E_g\sqrt{3}} & -D^* - \frac{R^*T}{E_g} & (P+Q) - \frac{RR^*}{E_g} \end{bmatrix}$$

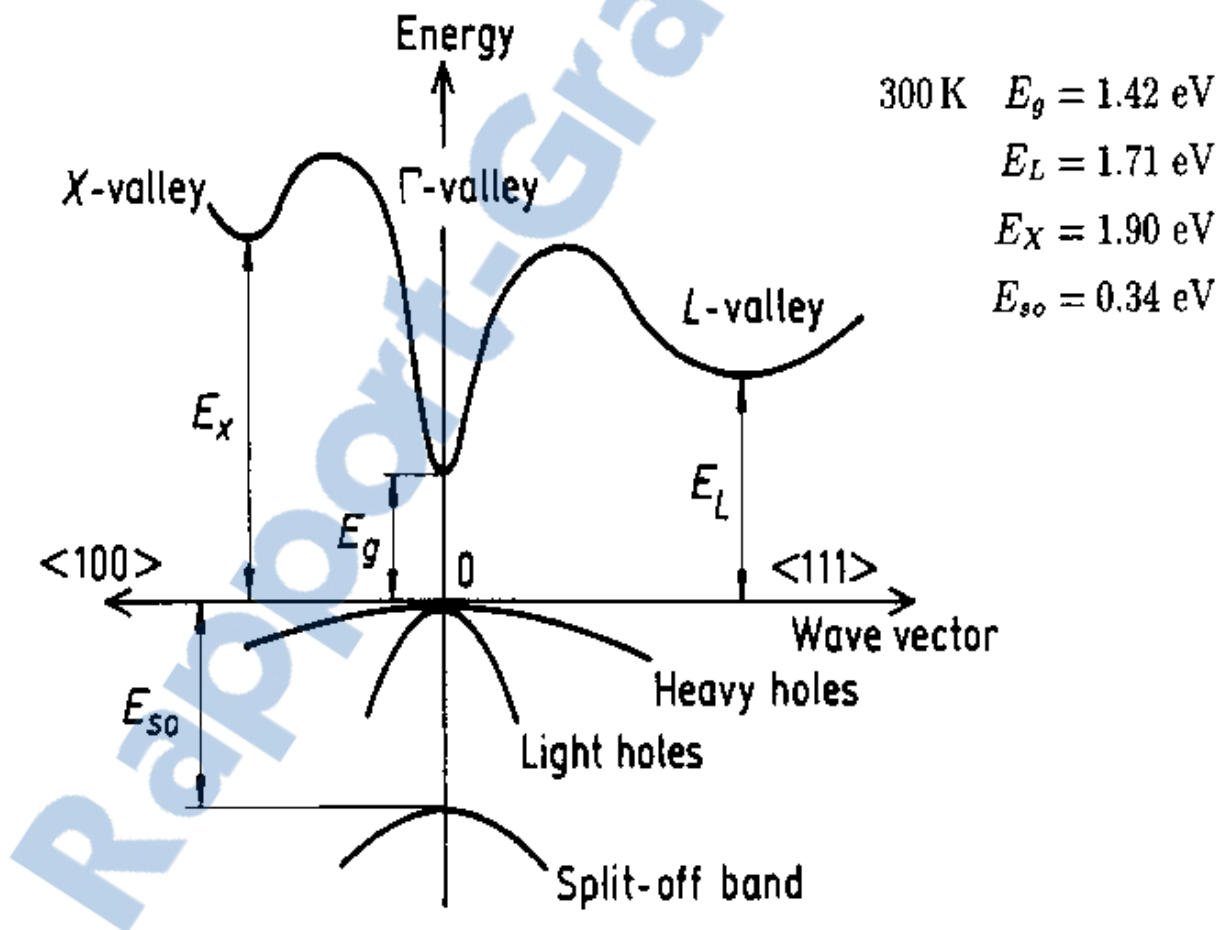


Figure IV.2 : structure de bande de GaAs

Dans cette figure nous remarquons que le binaire GaAs est un Gap direct au point Γ

Pour GaN

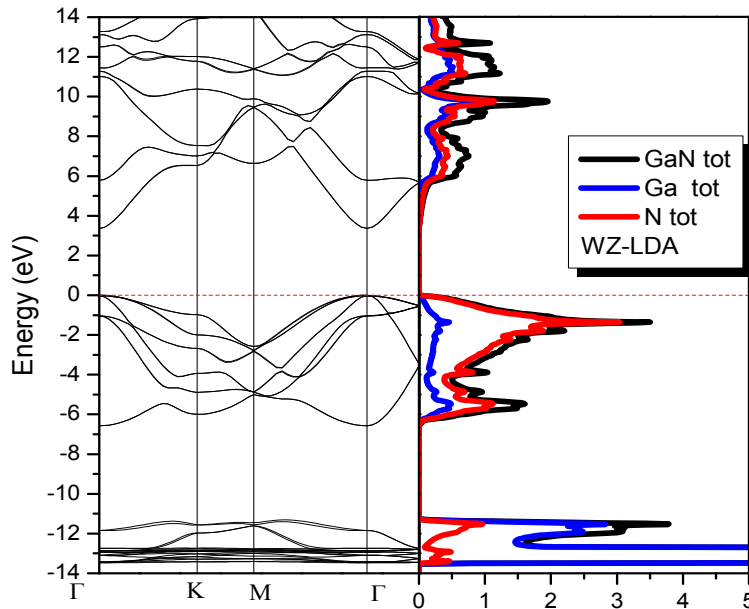


Figure IV.3 : Structure de bande GaN

Le même modèle est appliqué aux ternaires GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_{1-x}Bi_x.

2.2. Etude $k.P$ des nanostructures à puits quantiques 2D de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et de GaN_{1-x}Bi_x/GaN

2.2.1. Etude $k.P$ des nanostructures à puits quantiques GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs

Sur la figure IV.4 suivante, nous reportons l'énergie de la bande interdite GaAs_{1-x}Bi_x en fonction de Bi calculée dans le chapitre 3 et que nous allons utiliser dans la théorie kP pour calculer les sous bandes de conduction et de valence.

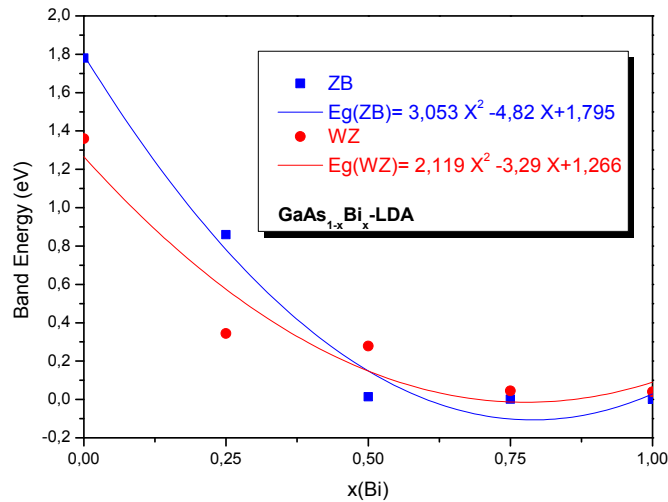


Figure IV.4: Variation de l'énergie de la bande interdite calculée dans le chapitre 3 en fonction de la composition en Bismuth

Sur la figure IV.5 suivante, nous reportons les énergies des band offset des bandes de conduction et de valence pour l'hétérostructure GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs.

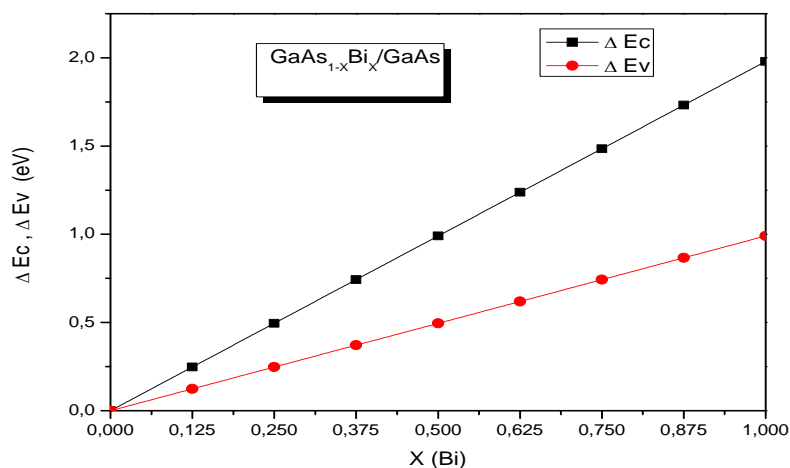


Figure IV.5 : Variation des bandes offsets de valence et de conduction de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs en fonction de la composition en Bismuth



En utilisant la théorie $k.P$, décrite en annexe 2, nous avons déterminé les premières sous bandes de valence et de conduction pour 2 compositions d'alliage de GaAs_{1-x}Bi_x à savoir x=0.05 et x=0.15.

Nous avons également tenu compte de la contrainte bi-axiale engendrée par la différence des constantes de réseau du puits et de la barrière et qui est représentée sur la figure suivante. Comme on peut le constater, le puits est toujours sous compression et cette contrainte devient très importante pour les fortes concentrations de Bismuth.

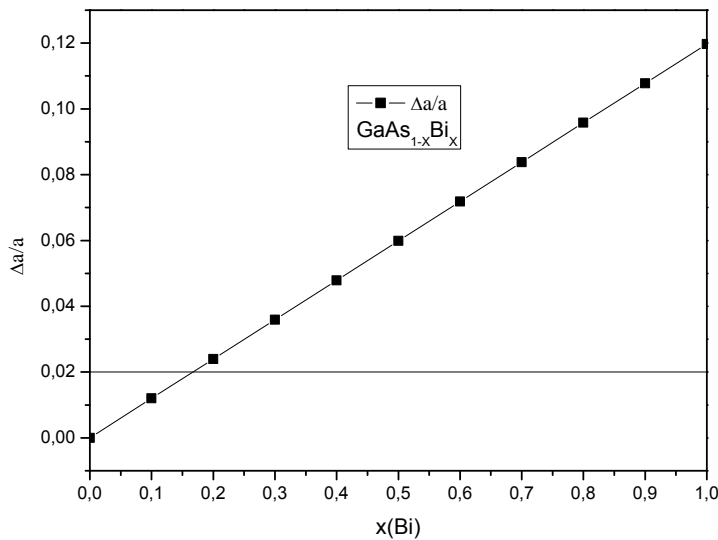


Figure IV.6: Variation de la contrainte bi-axiale de l'hétérostructure GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs en fonction de la composition en Bismuth

En utilisant la théorie $k.P$, nous avons déterminé les énergies des premières sous bande de conduction et de valence en fonction de la largeur du puits calculée pour deux compositions de Bismuth. Lors de ces calculs, nous avons tenu compte du couplage intra-sous-bande de valence et de la contrainte bi-axiale sur le puits.

En utilisant les énergies E_{c1} et E_{v1} déterminées précédemment nous calculons les longueurs d'ondes correspondantes qui sont données par l'expression suivante :

$$\lambda = \frac{1}{E_g + E_{c1} + E_{v1}}$$

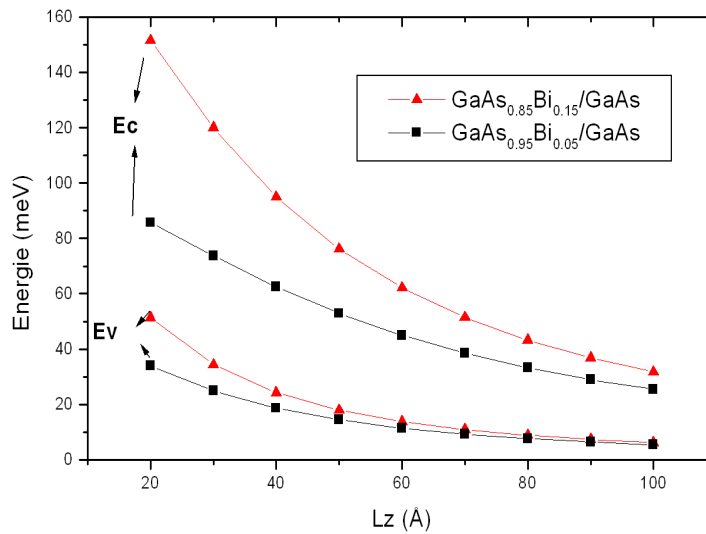


Figure IV.7 : Variation des premières énergies de sous bande de conduction et de valence en fonction de la largeur du puits calculée pour deux compositions de Bismuth

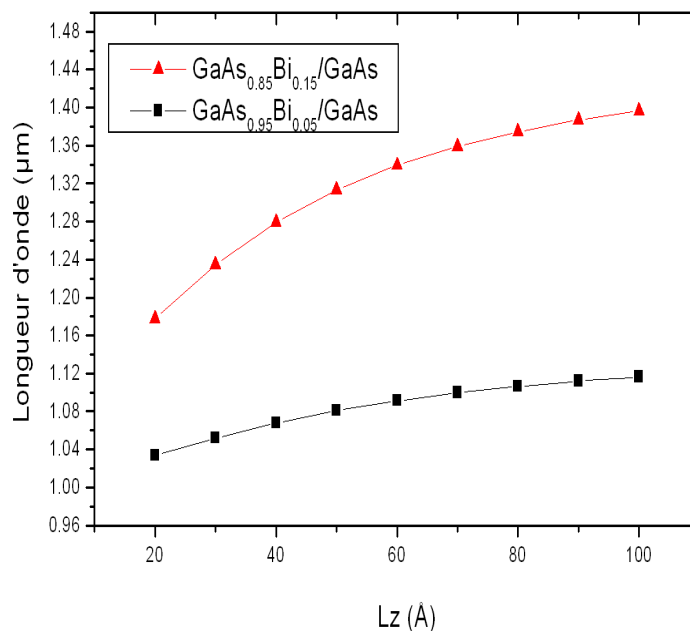


Figure IV.8: Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits calculée pour deux compositions de Bismuth pour l'hétérostructure GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs

Les résultats obtenus sont reportés sur la figure IV.8 suivante. Nous remarquons que la longueur d'onde est située dans l'infrarouge pour les deux hétérostructures et pour toutes les largeurs de puits.

Sur la figure IV.9 suivante, nous reportons les énergies des transitions excitoniques pour différentes valeurs de Bi en fonction de la largeur du puits. Sur cette figure, nous reportons également les valeurs expérimentales reportées par Y.I. Mazur et al.

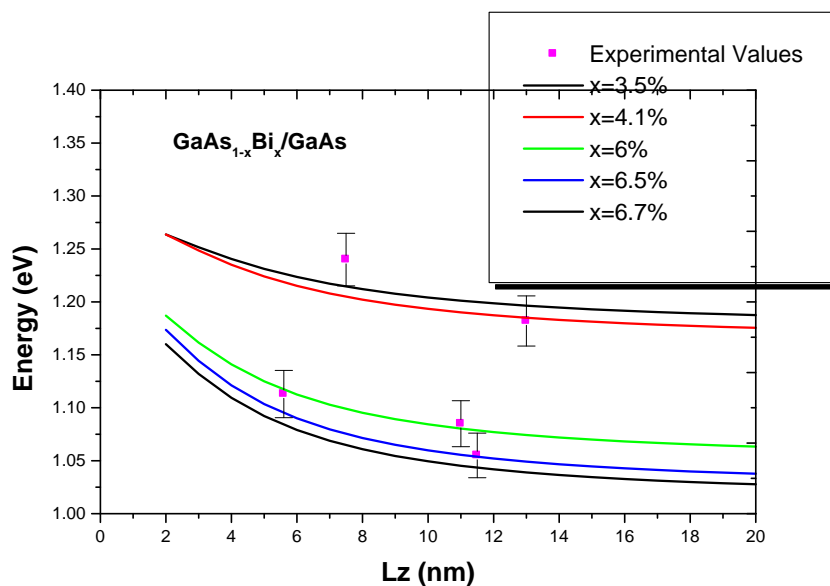


Figure IV.9: Variation des énergies excitoniques en fonction de la largeur du puits calculée pour deux compositions de Bismuth pour l'hétérostructure GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs

Les points expérimentaux avec leurs barres d'erreur sont également reportés sur cette figure.

2.2.2 Etude $k.P$ des nanostructures à puits quantiques 2D de GaN_{1-x}Bi_x/GaN

Sur la figure IV.10, nous reportons l'énergie de la bande interdite GaN_{1-x}Bi_x en fonction de Bi calculée dans le chapitre 3 et que nous allons utiliser dans la théorie kP pour calculer les sous bandes de conduction et de valence.

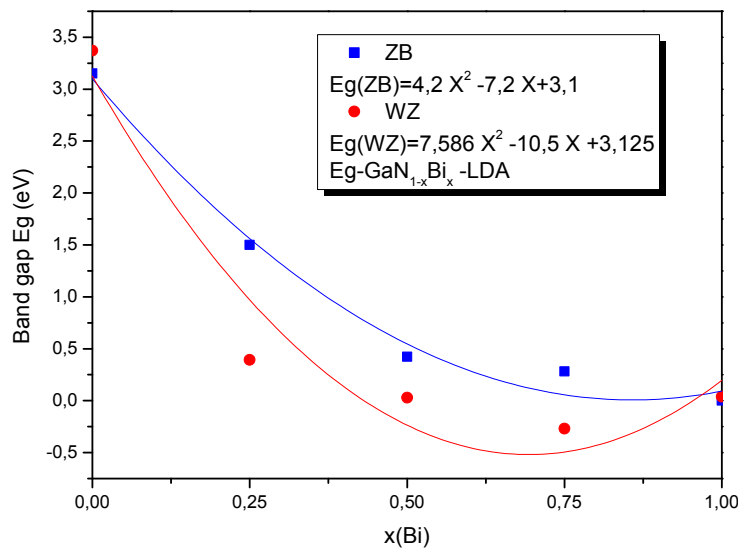


Figure IV.10: Variation de l'énergie de la bande interdite de GaN_{1-x}Bi_x calculée dans le chapitre 3 en fonction de la composition en Bismuth

Sur la figure IV.11, nous reportons les énergies des bandes offset des bandes de conduction et de valence pour l'hétérostructure GaN_{1-x}Bi_x/GaN. Ces énergies sont beaucoup plus importante que pour l'hétérostructure GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs, ce qui montre que le confinement est plus important dans GaN_{1-x}Bi_x/GaN

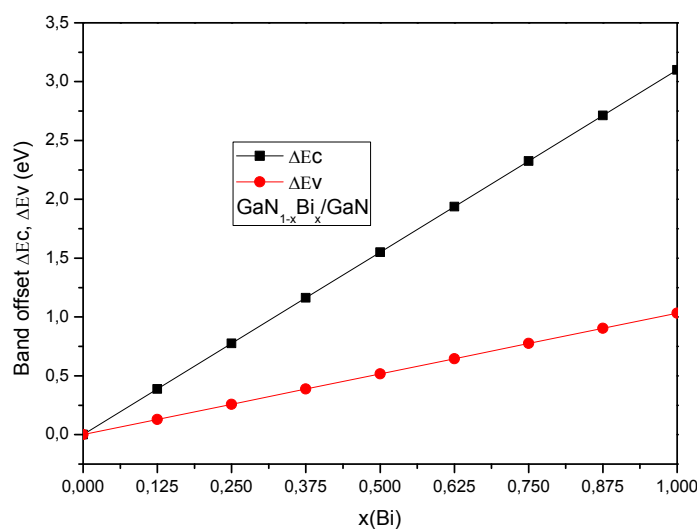


Figure IV.11 : Variation des bandes offsets de valence et de conduction GaN_{1-x}Bi_x/GaN en fonction de la composition en Bismuth

Sur la figure IV.12, nous représentons la contrainte bi-axiale engendrée par la différence des constantes de réseau du puits et de la barrière. Comme on peut le constater, le puits est toujours sous compression et cette contrainte devient très importante pour les fortes concentrations de Bismuth.

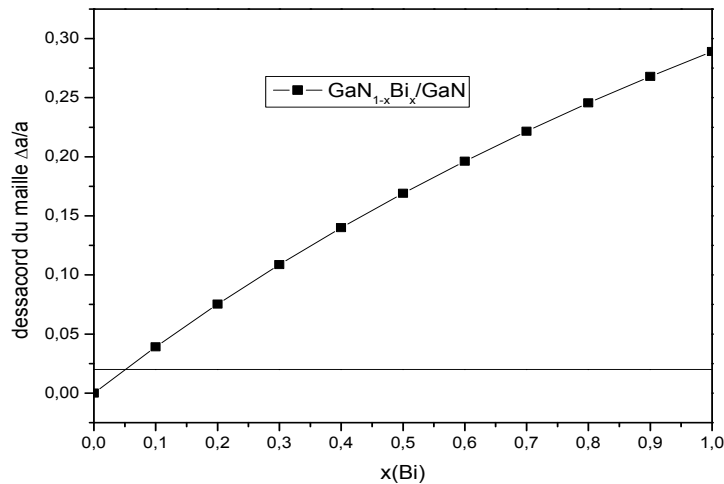


Figure IV.12: Variation de la contrainte biaxiale de l'hétérostructure GaN_{1-x}Bi_x/GaN en fonction de la composition en Bismuth

En utilisant la théorie $k.P$, nous avons déterminé les énergies des premières sous bande de conduction et de valence en fonction de la largeur du puits calculée pour deux compositions de Bismuth. Lors de ces calculs, nous avons tenu compte du couplage intra-sous-bande de valence et de la contrainte bi-axiale sur le puits. Les résultats sont reportés sur la figure IV.13 ci dessous

En utilisant le même raisonnement que pour les puits quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs traités précédemment, nous pouvons là aussi déterminer les variations de la longueur d'émission Lasers pour les puits de GaN_{1-x}Bi_x/GaN et que nous reportons sur la figure IV.14 ci-dessous. Nous remarquons que la longueur d'onde est située entre l'ultra violet et le visible pour les deux hétérostructures et pour toutes les largeurs de puits.

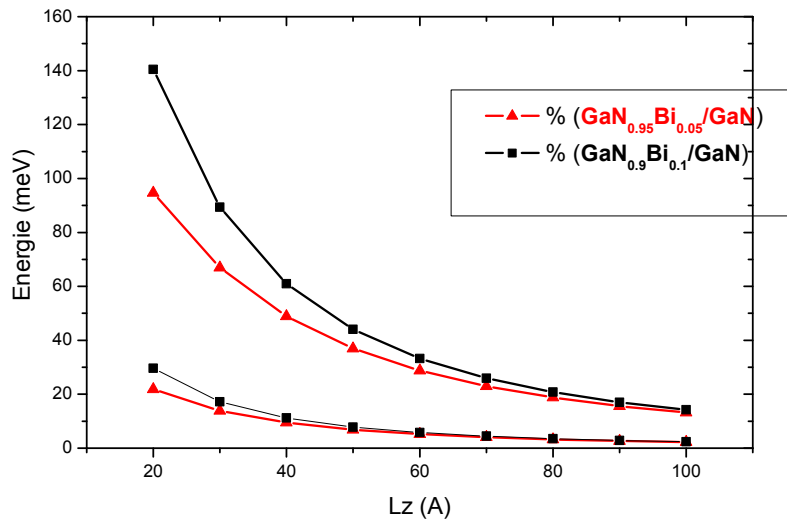


Figure IV.13: Variation des premières énergies de sous bande de conduction et de valence en fonction de la largeur du puits calculée pour deux compositions de Bismuth pour l'hétérostructure GaN_{1-x}Bi_x/GaN

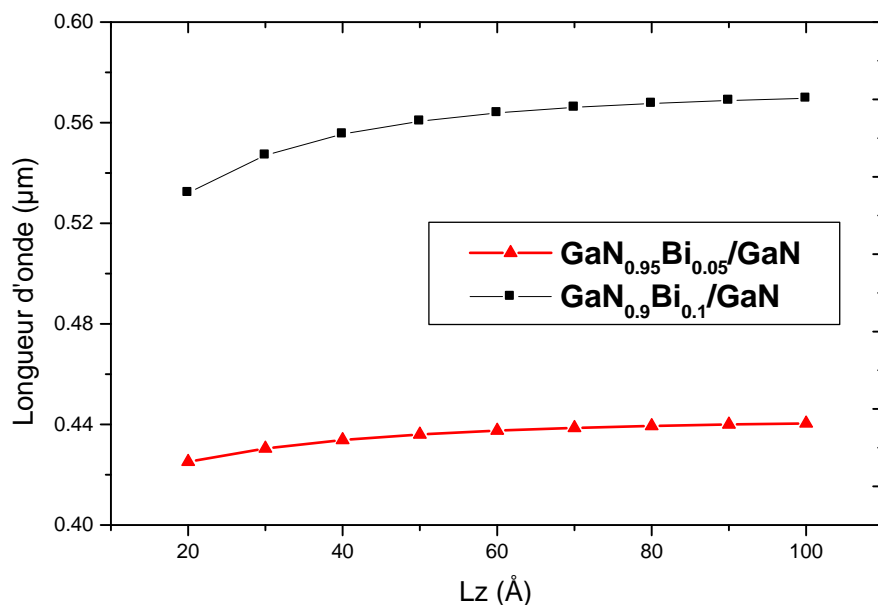


Figure IV.14: Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits calculée pour deux compositions de Bismuth pour l'hétérostructure GaN_{1-x}Bi_x/GaN

3. Etude d'optimisation des nanostructures Lasers à puits quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et de GaN_{1-x}Bi_x/GaN

3.1. Choix de la structure Laser et rappels

Cette structure représente le puits qui est l'alliage ternaire à base de bismuth GaAs_{1-x}Bi_x et la barrière est composée par le binaire GaAs. Le but est de choisir cette nanostructure GaAs_{1-x}Bi_x /GaAs afin d'élargir la gamme de longueur d'onde dans la gamme Infrarouge a une émission au-delà.

Sur la figure IV.14 nous représentons le schéma de notre dispositif laser basée sur matériaux GaAsBi et GaAs

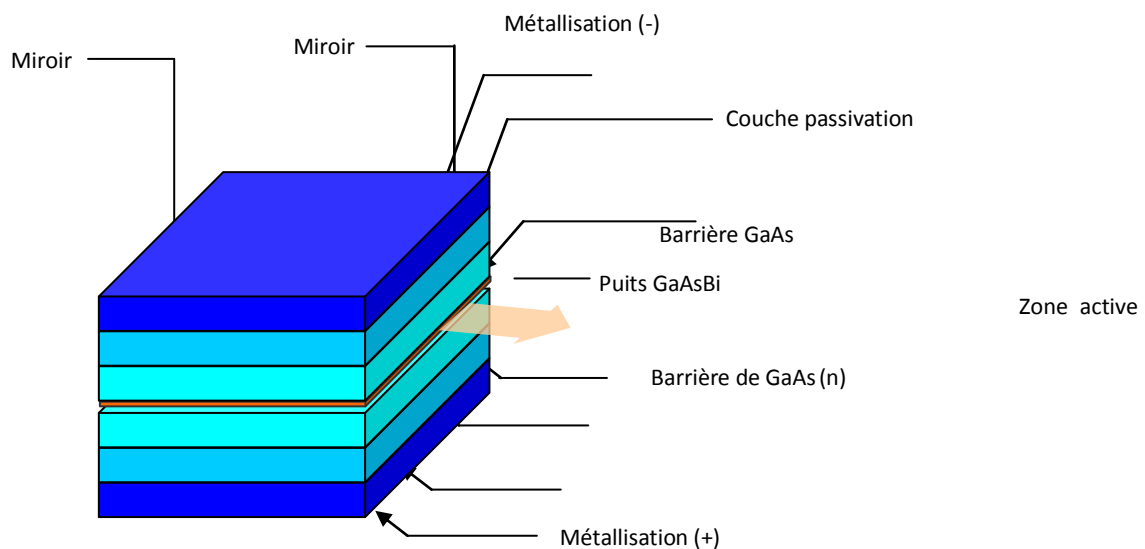


Figure IV.15 Schéma de dispositif laser de type GaAsBi-GaAs

Ce dispositif laser est composé de :

- Matériaux GaAs qui joue le rôle de la barrière de puits quantique GaAsBi-GaAs
- L'alliage GaAsBi joue le rôle de puits quantique pour contrôler longueur d'onde de laser
- Deux miroirs de fabry-pérot
- Une couche de métallisation pour faire l'injection électrique dans notre dispositif en injectant le courant dans notre dispositif laser a partir de la couche de métallisation nous aurons une émission de photons dans la zone active qui vont être piéger dans la

cavité Fabry-Pérot et en faisant ensuite un pompage optique nous aurons l'émission laser voulu.

Dans ce travail nous avons choisi de réaliser un système laser avec une zone active formée d'une hétérostructure qui contient un composé GaAs qu'on va le traiter comme Barrière et l'alliage GaAsBi traiter comme puit parce qu'il permet de bien contrôler l'énergie du gap bien contrôler le confinement

Le choix de ce système permet d'avoir :

- Une très haute sensibilité dans le Moyen et Lointain -InfraRouge..

3.1.1. Rappels sur le fonctionnement du Laser :

Absorption et émission des photons :

Dans un semi-conducteur les atomes peuvent absorber ou émettre des photons au niveau microscopique et quantique grâce au changement d'état d'énergie électronique.

On distingue trois processus de base de conversion d'énergie entre les atomes et le rayonnement :

Absorption dans les semi-conducteurs :

L'atome se trouve initialement dans l'état d'énergie électronique E_1 lorsqu'il est soumis à une onde lumineuse il va être excité à l'état d'énergie supérieur E_2 par l'absorption d'un photon d'énergie $h\nu$ avec h : la constante de Planck et ν : fréquence de la radiation émise.

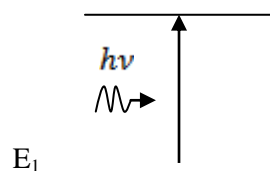


Figure IV.16 : Absorption

Emission spontanée :

L'émission spontanée se produit lorsqu'un atome qui est dans un état excité E_2 peut se désexciter vers l'état d'énergie la plus basse E_1 pour retrouver l'équilibre, et ce même en absence de rayonnement, en émettant un photon d'énergie égale à l'énergie de transition $h\nu = E_2 - E_1$.

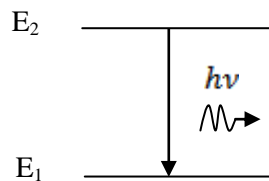


Figure IV.17 : Emission spontanée

Emission stimulée :

L'atome se trouve dans un état excité E_2 , il est ensuite désexcité grâce à un photon d'énergie $h\nu = E_2 - E_1$ qui correspond à l'énergie de transition, l'atome de l'état E_2 à l'état d'énergie E_1 en émettent un photon identique au photon incident il a la même fréquence, la même direction de polarisation c'est-à-dire que les deux photons sont en phase donc la lumière produite est cohérente.

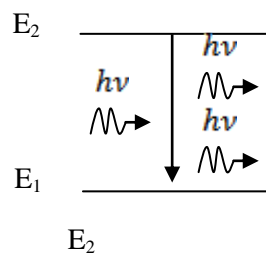


Figure IV.18 : Emission stimulée

Principe de fonctionnement d'un laser

Un laser est composé de deux miroirs (un réfléchissant et l'autre semi réfléchit, milieu active qui peut être (semi conducteur, liquide, gaz) et une cavité optique.

Donc il faut exciter les électron du milieu active, lorsque les électrons de désexcitent, il émet un photon, ce photon est réfléchi par un des miroirs et il fait le retour ver le milieu .ce processus se multiple et répète plusieurs fois pour obtenir N photon, certain photon peut sortir a cavité optique par le miroir semi réfléchit et crée un faisceau ce l'on appelle faisceau laser , ces photon sont identique au premier photon donc la lumière qui résulte de laser est cohérent

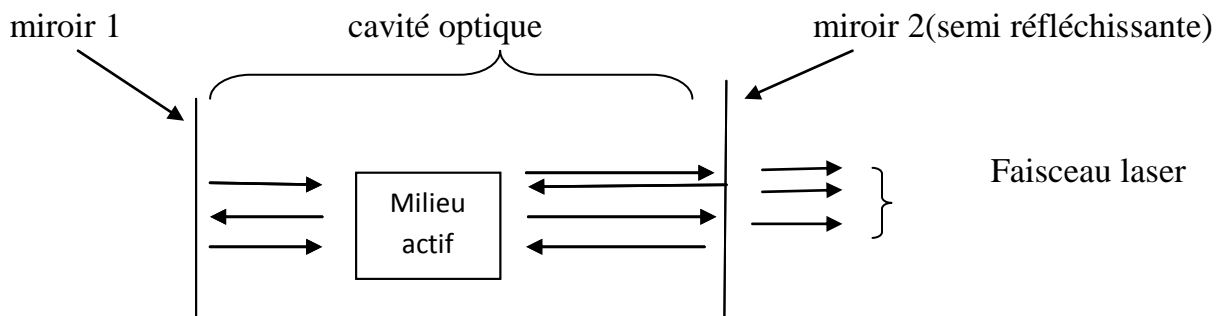


Figure IV.19 : principe de fonctionnement de laser

Gain

C'est le rapport du signal entré et sortie, lorsque le milieu actif qui amplifie le nombre du photon par pompage, cette processus crée des pertes a cause de ces photon qui fait des allers-retours dans la cavité (absorption, diffusion) donc le gain du laser est écrit

$$\bar{G} = g - \alpha$$

Ou : \bar{G} c'est le gain net

g : gain idéal

α les perte

l'intensité du lumière qui travers milieu actif a depaisseur dz est écrit par la loi de Beer-Lambert

$$dI = \bar{G} Idz$$



L'intensité de sortie $I(z)$ qui produit par l'intensité qui travers milieu actif a d'épaisseur dz

$$I(Z) = I_0 \exp \bar{G} Z$$

On suppose $I = I_0$ à $Z=0$, le gain et la longueur d'onde de la lumière incident n'est pas toujours même a cause du milieu qui amplifie

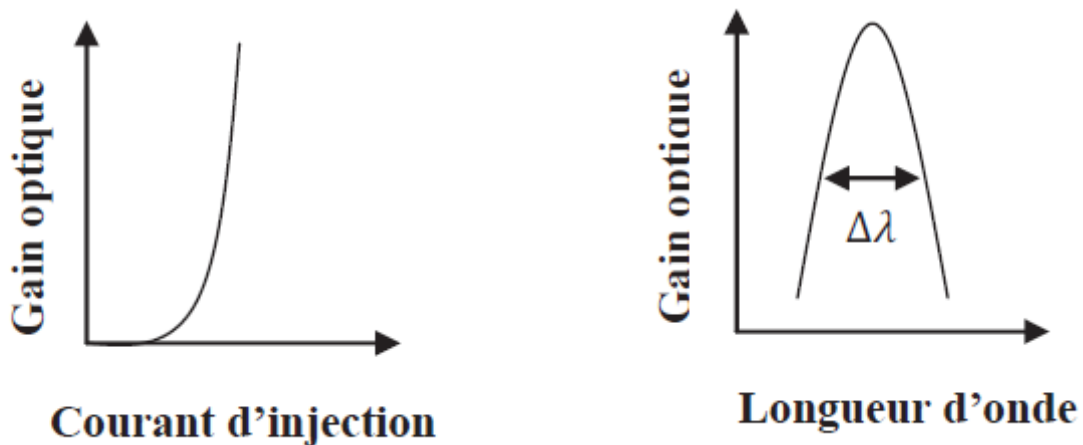
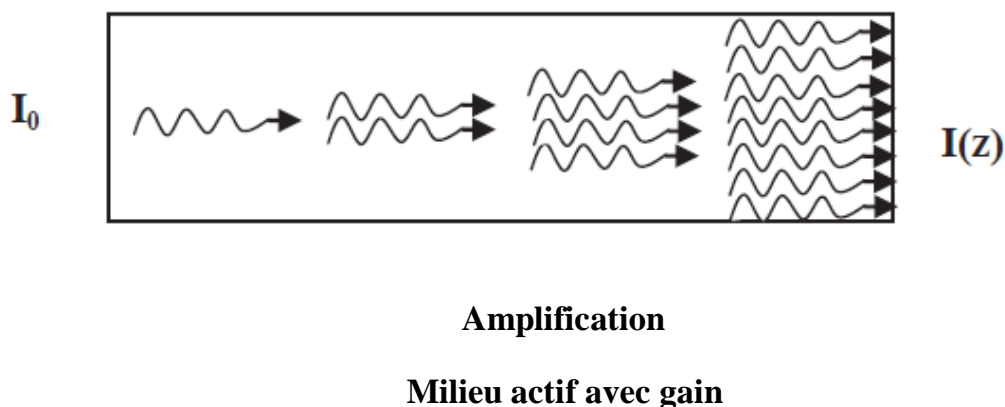


Figure IV.20 : Gain optique en fonction du courant d'injection et de la longueur d'onde



Densité de courant de seuil

Pour obtenir un gain positif il faut dépasser le courant minimal, ce courant est le courant seuil

Pour un effet laser il faut le pompage est au dessus du courant du seuil pour obtenir de l'intensité de départ et le retour sont égale pour que la lumière pouvant faire aller-retour ni crée du gain et ni perte

$$I_0 = R_1 R_2 I_0 \exp(2\bar{G}L) \quad (3)$$

Ou L : longueur de cavité, R1 réflectivité du premier miroir, R2 réflectivité du deuxième miroir

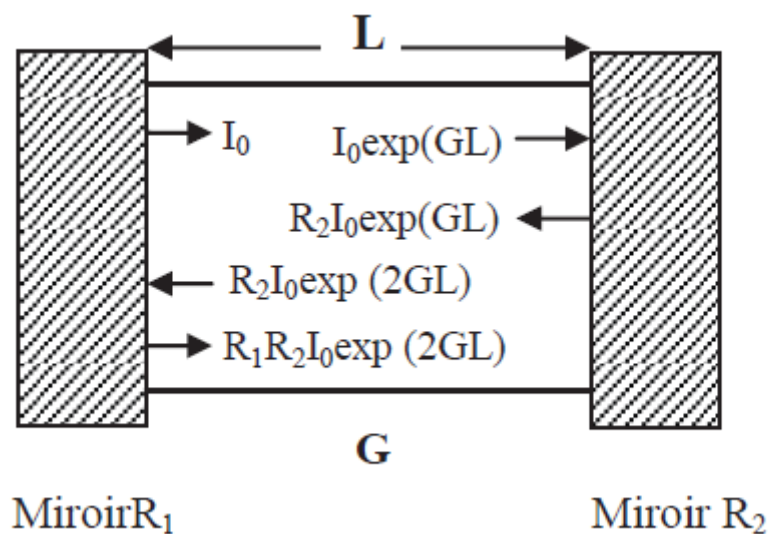


Figure IV.21 : Dessin schématique d'une cavité laser

D'après l'équation (3) le gain du laser au seuil

$$\bar{G} = \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_1 R_2}$$

Donc le gain idéal au seuil

$$g = \alpha + \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_1 R_2}$$

Lasers à semi-conducteur

Dans un laser à semi-conducteur on obtient le gain optique lorsque la condition de Bernard-Duraffourg [2] est vérifiée :

$$E_{F_c} - E_{F_v} \geq h\nu \geq E_g$$

E_{F_c} et E_{F_v} : sont les quasi-niveaux de Fermi.

$h\nu$: L'énergie du photon émis.

L'expression du gain optique est donnée par l'expression suivante [2] :

$$g(h\nu) = \alpha_{2d} \sum_{n,m=1}^{\infty} I_{n,m} [f_c^n(h\nu) - f_v^m(h\nu)] H(h\nu - E_g - E_n - HH_m)$$

f_c^n et f_v^m Sont les distributions de Fermi des sous bandes n et m données par [3] :

$$f_c^n(h\nu) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_c^n(h\nu) - E_{f,c}}{kT}\right)} \quad E_c^n(h\nu) = E_g + E_n + \frac{m_r}{m_c} (h\nu - E_g - E_n)$$

$$f_v^m(h\nu) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_v^m(h\nu) - E_{f,v}}{kT}\right)} \quad E_v^m(h\nu) = -\frac{m_r}{m_v} (h\nu - E_g - HH_n)$$

Avec α_{2d} est le coefficient d'absorption (en cm⁻¹) d'un puits quantique à courant nul, donné par [3] :

$$\alpha_{2d} = \frac{2\pi q^2 x_{VC}^2 m_r}{\lambda_0 n_{SC} \varepsilon_0 \hbar^2 d}$$

Où :

$I_{n,m}$: L'intégrale de recouvrement ;

d : largeur du puits ;

λ_0 : Longueur d'onde d'émission dans le vide ;

m_r : Masse réduite des électrons et des trous.

x_{VC} : Élément de matrice dipolaire pour un matériau massif ;

n_{SC} : Indice moyen dans la zone active ;

ϵ_0 : Constante diélectrique effective du matériau ;

Densité de courant de seuil :

La densité de courant de seuil d'un oscillateur laser est donnée par l'équation suivante :

$$J_{seuil} = \frac{qd}{\tau_{seuil}} n_{seuil}$$

Où :

n_{seuil} : Est la densité de porteurs seuil ; τ_{seuil} : Est la durée de vie seuil.

La densité de courant seuil d'oscillation laser est proportionnelle à l'épaisseur de la zone active d de la diode laser, donc à la largeur du puits de potentiel de l'hétérostructure. [3]

3.1. Etude d'optimisation des Lasers à puits quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs

La réalisation de lasers à hétérostructures a pour but de réduire encore plus le courant de seuil d'oscillation et d'augmenter le gain. Nous étudions le gain optique de la structure à puits quantique contraint GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs en tenant compte de l'effet de mélange des états de la bande de valence. Sur la figure suivante nous reportons la variation du gain maximum en fonction de la densité de porteurs injectés.

Nous remarquons que le gain est plus important pour la structure à plus forte concentration de Bismuth. A partir de ces figures, nous pouvons déduire que la densité de porteurs seuil de GaAs_{0,85}Bi_{0,15}/GaAs est plus faible que celle de GaAs_{0,95}Bi_{0,05}/GaAs et qui vont nous permettre de calculer la densité de courant de seuil laser.

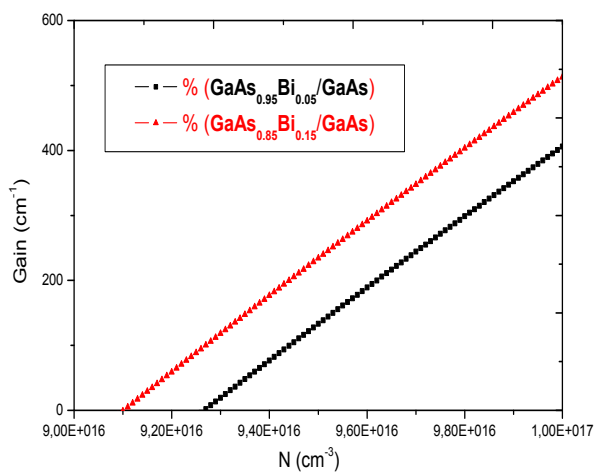


Figure IV.22 : variation du gain maximal de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs en fonction de l'injection en Porteurs

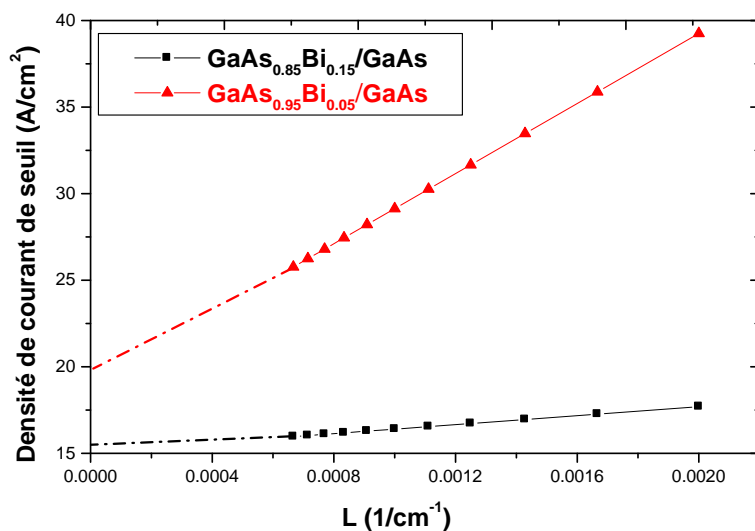


Figure IV.23 : variation de la densité de courant de seuil de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs en fonction de la largeur de la cavité à une température T=10K pour une largeur de puits de Lz=40Å

Sur la figure IV.23, nous reportons la variation de la densité de courant de seuil de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs en fonction de la largeur de la cavité à une température T=10K pour une largeur de puits de Lz=40Å pour 2 compositions de Bismuth. Nous constatons que la densité de courant de seuil de la structure GaAs_{0.85}Bi_{0.10}/GaAs est 15.5A/cm² est plus faible comparée celle obtenue pour la structure à GaAs_{0.95}Bi_{0.05}/GaAs qui est de 20A/cm²

3.1. Etude d'optimisation des Lasers à puits quantiques de GaN_{1-x}Bi_x/GaN

Nous étudions le gain optique de la structure à puits quantique contraint GaN_{1-x}Bi_x/GaN en tenant compte de l'effet de mélange des états de la bande de valence. Sur la figure IV.24 nous reportons la variation du gain maximum en fonction de la densité de porteurs injectés. Nous remarquons que le gain est plus important pour la structure à plus forte concentration de Bismuth. A partir de ces figures, nous pouvons déduire que la densité de porteurs seuil de GaN_{0.9}Bi_{0.1}/GaN N_{th}, est plus faible que celle de GaN_{0.95}Bi_{0.05}/GaN. En utilisant ces valeurs de N_{th}, nous déterminons la densité de courant de seuil laser.

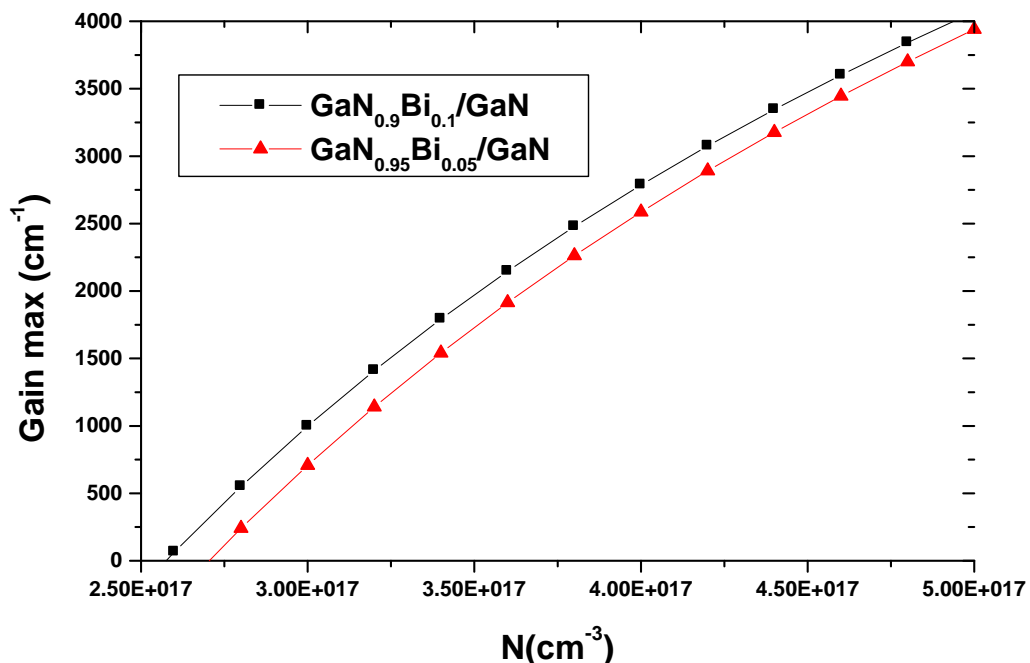


Figure IV.24: variation du gain maximal de GaN_{1-x}Bi_x/GaN en fonction de la densité de porteurs injectés.

Sur la figure IV.24, nous reportons la variation du gain maximum GaN_{1-x}Bi_x/GaN en fonction de la densité de porteurs injectés.

Nous remarquons que le gain est plus important pour la structure à plus forte concentration de Bismuth. A partir de ces figures, nous pouvons déduire que la densité de porteurs seuil de GaN_{0.90}Bi_{0.1}/GaN est plus faible que celle de GaN_{0.95}Bi_{0.05}/GaN et qui vont nous permettre de calculer la densité de courant de seuil laser.

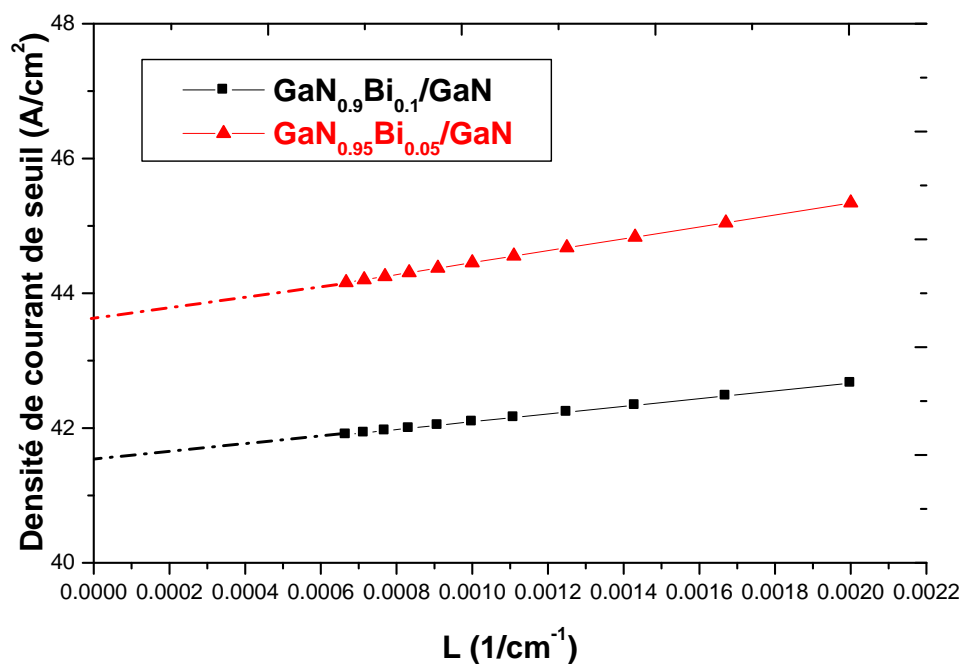


Figure IV. 25 : variation de la densité de courant de seuil de GaN_{1-x}Bi_x/GaN en fonction de la largeur de la cavité à une température T=10K pour une largeur de puits de Lz=40Å

Sur la figure IV.25, nous reportons la variation de la densité de courant de seuil de GaN_{1-x}Bi_x/GaN en fonction de la largeur de la cavité à une température T=10K pour une largeur de puits de Lz=40Å pour 2 compositions de Bismuth. Nous constatons que la densité de courant de seuil de la structure GaN_{0.90}Bi_{0.10}/GaN est 41A/cm² est plus faible comparée celle obtenue pour la structure à GaN_{0.95}Bi_{0.05}/GaN qui est de 44A/cm².

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons procédé à une étude d'optimisation des nanostructures lasers à puits quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN. En utilisant la théorie $k.P$, nous avons déterminé les sous bandes de valence et de conduction en tenant compte du mixing intra-bande de valence et de la contrainte bi-axiale du puits. Nous avons déterminé les principaux paramètres qui jouent un rôle important dans l'optimisation des propriétés des structures laser à base de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaN, notamment le gain max et la densité de courant laser.

L'une des particularités des structures lasers à base de ZnO/Mg_xZn_{1-x}O, qui peut constituer un atout fondamental est la contrainte (tension), dont l'effet direct est l'augmentation du gain optique et donc la diminution de la densité de courant seuil. En effet, cette tension va impliquer la participation de la sous-bande des trous légers (LH) aux transitions optiques, dont la masse est plus faible comparée à celle des trous lourds

Références

- [1] Optoélectronique. E.Rosencher et B.Vinter (2^{ème} édition). Dunod, Paris (2002).
- [2] K. Zitouni et al. Superlattices and Microstructures, p.54 (2006), K. Zitouni, et al. Phys. Stat. Sol. (c) **4**, N°1, 208-211 (2007).
- [3] Yu I. Mazur, V. G. Dorogan, M. Benamara, M.E. Ware, M. Schmidbauer, G. G. Tarasov, S. R. Johnson, X. Lu, S-Q Yu, T. Tiedje and G. J. Salamo J. Phys. D Appl. Phys. **46** 065306 (2013)

Conclusion

Dans ce travail nous avons étudié et optimisé un laser émettant dans l'infrarouge et le visible à base de deux hétéro-structure GaAs_{1-x}Bi_x / GaAs et GaN_{1-x}Bi_x /GaAs basée sur une nouvelle famille III-V a base de Bismuth tel que les matériaux Binaires : GaAs, GaBi , GaN et leurs alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x , GaN_{1-x}Bi_x , GaAs_{1-x}N_x

Nous avons étudié ces matériaux par la méthode l'ab-initio où nous avons déterminé les propriétés structurales et électroniques des matériaux binaires et leurs alliages ternaires GaAs , GaBi , GaN , GaAs_{1-x}Bi_x , GaAs_{1-x}N_x , GaN_{1-x}Bi_x

Nous avons montré que les matériaux binaires GaAs , GaBi cristallisent dans la phase Zinc Blende et le composé GaN cristallise dans la phase Wurtzite. Pour les alliages ternaires , l'alliage GaAsBi les résultats confirment que cet alliage cristallise dans la phase Zinc Blende pour tout la gamme de composition. Pour les matériaux ternaires GaAs_{1-x}N_x GaN_{1-x}Bi_x, les résultat montrent qu'il y a un changement de phase cristallin a partir de composition 37.5% , Nous avons trouvé que la phase zinc blende est la plus stable pour GaAs et GaBi et pour la phase wurzite pour GaN.

Les résultats théoriques obtenus ont été comparés aux valeurs expérimentales, la comparaison montre qu'il y a une très bonne concordance entre les valeurs théoriques et les valeurs expérimentales.

Dans une dernière partie, nous avons optimisé les structures lasers fabriquées à partir de nanostructures GaAs_{1-x}Bi_x /GaAs et GaN_xBi_{1-x} /GaAs . Nous avons optimisé ces structures en étudiant le gain optique, la densité de courant de seuil et ceux en fonction de la largeur du puits quantique et pour différentes composition d'alliage de Bismuth.

Annexe I

Méthodes de calculs ab-initio : DFT, méthode FP-LAPW

1. Introduction
2. Méthode ab-initio DFT-FP-LAPW
 - 2.1 Modèle de calcul ab-initio
 - 2.2 La méthode DFT (Density Functional Theory), FP-LAPW du potentiel total (Full Potential) et ondes planes augmentées et linéarisées (Linearized Augmented Plane Waves)
3. Code Wien2k
4. Corrections TB-mBJ et SO
5. Conclusion

1. Introduction

La méthode des Ondes plane augmenté avec linéairement FP-LAPW (full potentiel Plane Waves augmented Linéairement) est l'une des méthodes qui permet de résoudre l'équation de Kohn et Shan pour déterminer la densité d'état fondamentale, l'énergie totale. Elle permet également de déterminer les propriétés structurales , électroniques , optiques , constantes élastiques , coefficient mécaniques.

2. Modèle de calcul ab-initio :

Connaissance des propriétés électroniques d'un système nécessite la détermination de son énergie interne , pour cela il faut résoudre l'équation du Schrödinger indépendante du temps a plusieurs corps a plusieurs électrons

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

H : c'est l'hamiltonien de système qui contient l'énergie cinétique et potentiel donc

$$H=T_n+T_e+V_{n-n}+V_{e-e}+V_{e-n} \quad (2)$$

T_e l'énergie cinétique du l'électron ,

T_n = l'énergie cinétique du l'électron ,

V_{n-n} =potentiel interaction entre noyau noyau ,

V_{e-e} = potentiel repulsion entre electron –electron

V_{e-n} =potentiel attraction entre electron-noyau

Mais malheureusement en raison de la complexité de cette équation eq.1 est difficile de la résoudre , même dans le cas la plus simple donc nous avons on recours à plusieurs approximations.

2.1.1 Approximation du Born –Oppenheimer

Comme le noyau est plus lourd que les électrons donc le mouvement est beaucoup plus lent, donc on peut négliger le mouvement du noyau et nous fixons le potentiel d'interaction noyau-noyau V_{n-n} , l'hamiltonien total est donc

$$H = T_e + V_{e-e} + V_{n-e} \quad (3)$$

La résolution de cette équation est très facile mais difficile à résoudre dans le système à plusieurs électrons du fait du potentiel d'interaction électronique, on a besoin d'une autre approximation pour résoudre cette équation

2.1.2. Approximation du Hartree

Cette approximation consiste à déterminer les fonctions propres de l'hamiltonien sous la forme approchée Ψ_{appro} est basée sur celle :

$$\Psi_{\text{appro}} = \Psi_1(r_1) * \Psi_2(r_2) * \dots * \Psi_n(r_n) \quad (4)$$

Cette approximation est basée sur les électrons libres ce qui revient à ne pas tenir compte des interactions entre les électrons et les états du spin, ceci a deux conséquences :

1. La répulsion coulombienne totale V_{e-e} du système électronique est surestimée
2. Le principe d'exclusion de Pauli n'est pas pris en compte
- 3.

2.1.3. DFT (Théorie de la Densité de la Fonctionnelle)

La résolution de l'équation de Schrödinger peut déterminer deux résultats : la valeur propre et l'énergie propre et la fonction d'onde $H\Psi = E\Psi$ ou H : hamiltonien de système (qui contient l'énergie cinétique et potentiel de l'électron) E : énergie du système. Pour résoudre cette équation complexe, ils ont fait beaucoup d'approximations pour faciliter la solution de l'équation de Schrödinger. Parmi des approximations Born –Oppenheimer, Hartree, Hartree Fock, DFT

La théorie de la DFT est donnée pour but de déterminer la densité électronique pour déterminer plusieurs propriétés d'un système, cette théorie est reposée de deux théorèmes fondamentaux de Kohn et Hohenberg

Théorie 1 : repose sur le fait que l'énergie totale d'un système d'électrons en interaction est une fonctionnelle unique de la densité .

Théorie 2 : pour un potentiel extérieur V_{ext} donne le minimum de l'énergie totale d'un système correspond à la densité exacte de l'état fondamental

Donc on n'a pas besoin de connaître des fonctions d'ondes mais la densité électronique. Kohn et Hohenberg ont écrit l'énergie totale d'un système électronique en interaction dans un potentiel V^{ext} externe est écrite sous la forme :

$$E(\rho) = T(\rho) + \int V^{ext}(r) \rho(r) dr \quad (5)$$

$$F(\rho) = T(\rho) + V^{ee}(\rho) \quad (6)$$

Est la fonction de la seule densité d'état fondamental. Le premier terme $T[\rho]$, étant l'énergie cinétique et le second terme, $V^{ee}(\rho)$ la répulsion coulombienne. La fonctionnelle $F[\rho]$ est universelle et indépendante du potentiel externe. Par conséquent, si une bonne approximation peut être trouvée pour $F[\rho]$

En minimisant $E[n]$ avec la contrainte :

$$\int \rho(r) dr = N$$

N étant le nombre total d'électrons, donne l'énergie totale et la densité n de l'état fondamental. Malheureusement la fonctionnelle F n'est pas connue.

Kohn et Sham [2] ont suggéré l'existence d'un système fictif des électrons sans interaction, qui a la même densité d'état fondamental que le système original en interaction.

Pour le système fictif la fonctionnelle $F[n]$ est alors :

$$F(\rho) = T(\rho)$$

et sa fonctionnelle énergie est :

$$E(\rho) = F(\rho) + \int V^{eff}(r) \rho(r) dr \quad (7)$$

Pour le système original en interaction (7) la fonctionnelle $F[\rho]$ est écrite comme somme de l'énergie cinétique du système sans interaction et des termes additionnels dû aux interactions électron-électron :

$$F[n] = T_0[n] + \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' + E_{xc}[n] \quad (8)$$

Ceci définit la fonctionnelle échange et corrélation $E_{xc}[n]$ qui contient les interactions entre électrons non incluses dans le premier terme. Le deuxième terme du côté droit est le terme classique de Hartree V^H . La fonctionnelle énergie du système en interaction est maintenant :

$$E[n] = F[n] + \int V^{ext}(r)n(r)dr \quad (1.3)$$

$$= T_0[n] \int n(r)[V^{ext}(r) + V^H(r)]d(r) + E_{xc}[n] \quad (1.4)$$

En comparant les deux dernières équations, nous voyons que les deux systèmes sont identiques si nous avons :

$$V^{eff}(r) = V^{ext}(r) + V^H(r) + V_{xc}(r) \quad (1.5)$$

Où le potentiel d'échange et de corrélation V_{xc} est définit par :

$$V_{xc}(r) = \frac{\partial E_{xc}[n]}{\partial n(r)} \quad (1.6)$$

Il suit alors, par la résolution des équations de Kohn et Sham (KS) à une particule

$$H_{KS}\varphi_i(r) = \left[-\Delta_i + V_i^{eff}(r) \right] \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (1.7)$$

Dans le formalisme de kohn et Sham, l'énergie totale $E[n]$ de l'état fondamental du système électronique est donnée par :

$$E = \sum_i^{occ} \varepsilon_i - \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' - \int n(r)V_{XC}(r)dr + E_{XC}[n] \quad (1.8)$$

Où les trois derniers termes sont des corrections pour le double compte dans la somme des valeurs propres. En traitant les énergies cinétiques et électrostatiques exactement on espère que la partie d'échange et de corrélation est seulement une petite contribution et son traitement approximatif plus tard devrait être un problème mineur. Tandis que c'est le cas dans beaucoup de système, il y a d'autres qui sont corrélés Où il n'est plus possible d'ignorer les erreurs faites par l'approximation de l'échange et de corrélation.

2.1.4. Approximation de la Densité Locale (LDA)

Consiste d'écrire la densité d'énergie d'échange et de corrélation d'un système réel est comme celle d'un gaz d'électron qui aurait une densité uniforme égale a la densité $\rho(r)$

$E_{XC} = \rho(r) \varepsilon_{XC}(\rho(r)) d^3$ ou ε_{XC} énergie d'échange et de corrélation [2].

LDA suppose que la fonctionnelle ε_{XC} est purement Locale, donne une très mauvais estimation du Gap, la distance de liaison a l'équilibre sont surestimés.

2.1.5. Approximation du gradient généralisé (GGA)

Malgré la simplicité de la LDA mais certain cas est contradiction avec l'expérimentales, pour cette raison a été introduit a l'approximation du gradient ou la fonction d'énergie d'échange et de corrélation dépend a la fois densité et de gradient $\varepsilon_{XC}(\rho, d\rho)$

Les paramétrisations utilisées pour la GGA sont différentes. Parmi elles celles de Perdew et al. (1992) [3], et Perdew et al. (1996) [4]. Il existe plusieurs versions de la GGA les plus utilisées sont celles de Perdew et Wang [5] et Perdew [6]

2.2. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

La méthode LAPW (linearized augmented plane wave), développée par Andersen [7], est fondamentalement une amélioration de la méthode dite des ondes planes augmentées (APW) élaborée par Slater [8, 9]

3.2.1. La méthode APW

Slater expose La méthode APW (augmented plane wave) est décrite dans l'article de Slater[8]. Au voisinage d'un noyau atomique, le potentiel et les fonctions d'onde sont de la forme « Muffin-Tin » (MT) ces fonctions ont une symétrie sphérique à l'intérieur de la sphère MT de rayon R_α . Les fonctions d'onde du cristal sont développées dans des bases différentes selon la région considérée : Solutions radiales de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la sphère MT et ondes planes dans la région interstitielle (Figure 1).

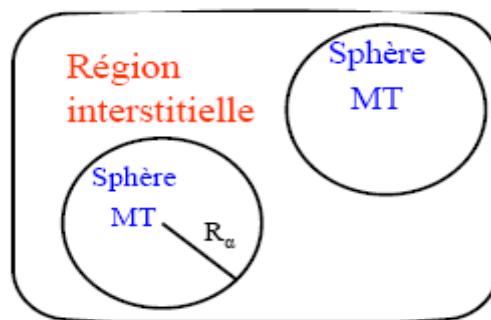


Figure III.1 Potentiel «Muffin-Tin»

Alors la fonction d'onde $R(r)$ est de la forme :

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(\mathbf{r}) & r < R_\alpha \end{cases}$$

(2.1)

où R_α représente le rayon de la sphère MT, Ω le volume de la cellule, CG et A_{lm} les coefficients du développement en harmoniques sphériques Y_{lm} .

2.2.2. Principe de la méthode FP-LAPW

Dans la méthode FP-LAPW, les fonctions de base dans les sphères MT sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $U_l(R_\alpha) Y_{lm}(\mathbf{r})$ et de leurs dérivées $\dot{U} Y_{lm}(\mathbf{r})$ par

rapport à l'énergie. Les fonctions U_l sont définies comme dans la méthode APW (II.2) et la fonction $\dot{U}(r)Y_{lm}(r)$ doit satisfaire la condition suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r$$

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (2.2)$$

Dans le cas non relativiste, ces fonctions radiales U_l et \dot{U}_l assurent, à la surface de la sphère MT, la continuité avec les ondes planes de l'extérieur. Alors, les fonctions d'onde ainsi augmentées deviennent les fonctions de base (LAPWs) de la méthode FP-LAPW :

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} & r > R_{\alpha} \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(r) & r < R_{\alpha} \end{cases}$$

3. Code Wien2k

Dans ce travail, nous avons utilisé le code Wien2k pour étudier les propriétés des matériaux III-V, ce code est programmé par le programme Fortran 90, a été crée a l'Institut de chimie des Matériaux a l'Université de technologie de Wienne par Peter Blaha et Schwarz Karlheinz. Le code Wien2K est une application directe de la méthode (linéaire) des ondes planes augmentées et a potentiel total plus les orbitales locales LAPW+lo [2]. Permet de calculer la structure de bande électronique, la densité d'état, la densité de charge électronique et l'énergie totale d'un cristal périodique en utilisant le réseau de bravais ainsi que le groupe de symétrie spatial. L'algorithme est basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), avec le traitement de la fonctionnelle d'échange et de corrélation en utilisant l'approximation de la densité locale (LDA)

Les principes programmes pour effectue les calculs auto-cohérent :

NN : C'est un programme qui donne les distances entre plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.

LSTART : Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme des états du coeur avec ou sans orbitales locales.

SYMMETRY : Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.

KGEN : Il génère une maille k dans la zone de Brillouin.

DSTART : Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

Alors un cycle self consistant est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0 : Génère le potentiel pour la densité.

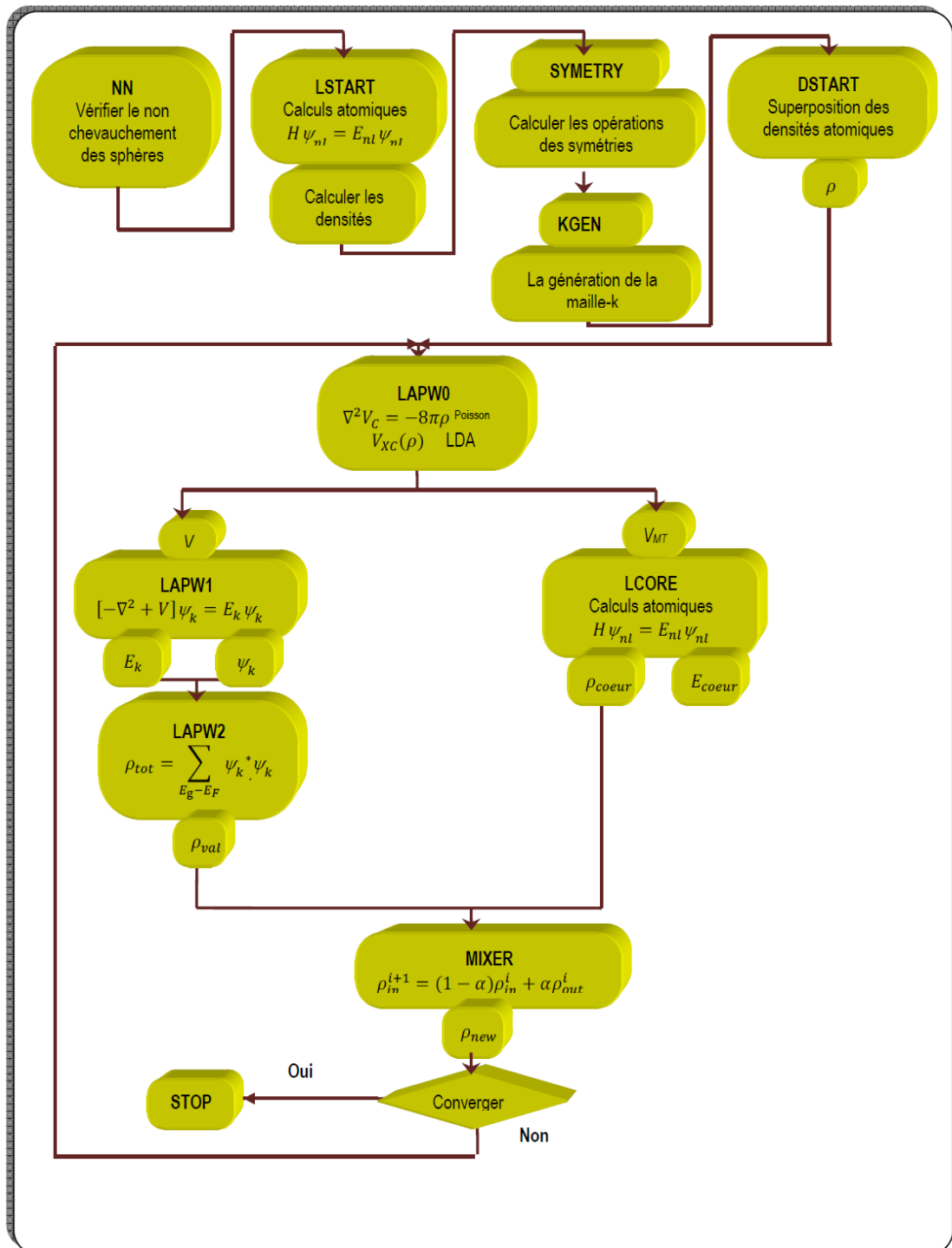
LAPW1 : Calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2 : Calcul les densités de valence pour les vecteurs propres.

LCORE : Calcul les états du coeur et les densités.

MIXER : Mélange les densités d'entrée et de sortie.

Donc on représente la boucle SCF



Structure du programme Wien2k

4. Correction Tran Blaha –modification becke –Johnson et Spin Orbite

Le calcul de la structure électronique des solides est basée sur la résolution des équations de Kohn-Sham, pour deux approximations différentes de potentiel d'échange et de corrélation : l'approximation de gradient généralisé et l'approximation de densité local. Récemment Becke et Johnson proposée un nouveau potentiel d'échange [Becke (2006)], potentiel mBJ « modified Becke Johnson Potentiel », publiée par Tran et Blaha [Tran(2009)].

Ils ont introduit une simple modification du potentiel BJ sous la forme (10) :

$$v_{x,\sigma}^{mbj} = c v_{x,\sigma}^{BR} (r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad (4.1)$$

Ou : $\rho_{\sigma} = \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\psi_{i,\sigma}|^2$ c'est densité électronique

*

$t_{\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} \nabla \psi_{i,\sigma} \nabla \psi_{i,\sigma}$ c'est la densité d'energie cinetique

$$v_{x,\sigma}^{BR} (r) = -\frac{1}{b_{\sigma}(r)} (1 - e^{-x_{\sigma}(r)}) - \frac{1}{2} x_{\sigma}(r) e^{-x_{\sigma}(r)}$$

c'est le potentiel de Beck-Rossel (BR) [11] pour modeliser le potentiel coulombien crée par le trou d'échange. Le terme x_{σ} dans l'équation (BR) a été déterminé a partir de

$\rho_{\sigma}, \Delta\rho_{\sigma}, \Delta^2\rho_{\sigma}, t_{\sigma}$, et le terme b_{σ} a été calculé en utilisant la relation suivante :

$$b_{\sigma}(r) = \left[\frac{x_{\sigma}^3(r) e^{-x_{\sigma}(r)}}{8\pi\rho_{\sigma}(r)} \right]^{\frac{1}{3}}$$

σ C'est la notation du spin

Le principale paramètre dans l'équation (4.1) c'est le paramètre c qui est calculé de façon dépend

linéairement au rapport de densité $\frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)}$

$$c = \alpha + \beta \left(\frac{1}{V_{cell}} \int_{cell} \frac{|\Delta\rho(r')|}{\rho(r)} d3r' \right)^{\frac{1}{2}}$$

Rapport-gratuit.com 

Les coefficients α, β sont des paramètres libres sont donné ($\alpha = -0.012$ sans dimension et $\beta = 1.023$ Bohr et v_{cell} est le volume de la maille unitaire

Ce paramètre est très important pour calculer les propriétés électroniques tell que la structure de bande qu'on varié le paramètre C l'énergie du gap augmente avec l'augmentation du C pour les solide et les semi conducteur

Références

- (1). P.Honenberg and W.Kohn, Phys. Rev. 136, (B), P864,(1964).
- (2) W.Kohn and L.J.Sham, Phys. Rev. 140, (A), P1133,(1965).
- (3) J. P. Perdew , J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pedreson, D. J. Singh and C. Fiolhais, Phys. Rev. B 46, 6671 (1992).
- [4] P.Perdew, and M. Ernzerhof ,Phys. Rev. Lett.77, P 3865 (1996).
- [5] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 33, 8800 (1986).
- [6] J. P. Perdew in 'Electronic Structure of Solids', Academie Verlag, Berlin, 11(1991).
- (7) O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975).
- (8).J.C. Slater, *Phys. Rev.* **51**, 846 (1937).
- (9) .J.C. Slater, *Advences in Quantum Chemistry* 1, 35 (1964).

Annexe II

Méthode de calculs $k.P$

1. Introduction
2. Principe de la théorie
3. Application au semi conducteur cubique
4. Application au semi conducteur Würtzite
5. Conclusion

Introduction :

La théorie $k.P$ est une théorie qui permet de déterminer les énergies de structure de bande au voisinage de centre de zone de Brioullon pour déterminer propriétés électroniques, optiques. Cette théorie est née dans les années 1950, la théorie $k.P$ et une méthode de perturbation de Van Vleck, qui permet de décrire la bande de valence au voisinage du centre de zone de Brillouin, en 1954 Elliot a fait les calculs en tenant compte du couplage de spin-Orbite, 1955 Luttinger et Kohn ont explicité les fonction d'onde de la bande de valence avec le spin, 1956 Luttinger a montré par des operateurs et l'effet de Zeeman la bande de valence est anisotrope, 1966 pidgeon et Brown confirme l'article de Luttinger et Kohn et Kane, Cardona et Pollack montre la théorie $k.p$ utilisée pour écrire la structure de bande au centre au zone de brillions

1. Principe de la théorie $k.P$

Pour déterminer et décrire la structure de bande nous allons d'abord résoudre l'équation de Schrödinger de l'électron dans réseau périodique

$$H\varphi = E\varphi \quad (1)$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \text{ et } P^2 = \hbar^2 k^2$$

H : c'est l'hamiltonien qui contient des énergies cinétiques et potentiels, donc la solution de l'équation du Schrödinger dans le cristal la fonction d'onde s'écrit comme :

$$\varphi(r) = e^{iKr} U_{n,k}$$

D'onc (1) est : $H.e^{iKr} U_{n,k} = E_{n,k} e^{iKr} U_{n,k}$

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V\right)(e^{iKr} U_{n,k}(r)) = e^{iKr} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} k.P + \frac{P^2}{2m}\right) U_{n,k}(r) \quad (2)$$

On remplace le terme l'impulsion de l'énergie cinétique P dans l'équation (2) par le terme $P =$

$\hbar\Delta$ on trouve une nouvelle équation

$$\left(H_U + \frac{\hbar}{m} k.P + \frac{P^2}{2m}\right) U_{n,k} = E_{n,k} U_{n,k} \quad (3)$$

on pose le terme $U_{n,k}$ [1] $U_{n,k} = U_{n,k} = \sum_{n'} C_{nn'} (K - K') U_{n',k}(r)$

En va résoudre l'équation de Schrödinger est connue pour un état donné K_0

$$\sum_n \left[\left\{ E_n(K_0) + \frac{\hbar}{2m} (K - K_0) \right\} \delta_{n,n} + \frac{\hbar}{m} (K - K_0) P_{nn} \right] C_{nn} = E_n(K) C_{nn} \quad (4)$$

Avec le terme d'impulsion est écrite comme suivant [1] :

$$P_{nn} = \int u_{n,k_0}^*(r) P u_{n,k}(r) d\tau$$

on considère le terme d'impulsion P_{nn} comme une terme de perturbation, Alor on peut calculer par la 2^{ème} approximation par la théorie de perturbation , l'équation (3) est écrit [1] :

$$E_n(K) = E_n(K_0) + \frac{\hbar}{m} (K - K_0) P_{nn} + \frac{\hbar^2}{2m} (K^2 - K_0^2) + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{|(K - K_0) P_{nn}|^2}{E_n(K_0) - E_n(K_0)} \quad (5)$$

Cette équation représente le développement au seconde ordre autour de point $K=0$, conduisant la définition des masses effectives , donc le développement de série de Taylor autour de $K=0$

$$E_n(\vec{K}) = E_n(\vec{K}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_n \frac{(\vec{i} \cdot \vec{p}_{nn})}{E_n(\vec{K}_0) - E_n(\vec{K}_0)} \right] (K - K_0)^2$$

$$\text{Avec } \frac{1}{m_i^*} = \left[\frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_n \frac{(\vec{i} \cdot \vec{p}_{nn})}{E_n(\vec{K}_0) - E_n(\vec{K}_0)} \right] \quad (6)$$

m : c'est la masse effective

Donc l'équation sera d'écrit [1] :

$$E_n(\vec{K}) = E_n(\vec{K}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(\vec{K}_i - \vec{K}_{i0})^2}{m_i} \right] \quad (7)$$

2. Théorie K.P appliquée au système cubique

Matrice de 8*8 qui tient compte des interactions des spin-orbite en utilisant les états des bases suivant $|is \uparrow\rangle |is \downarrow\rangle |3/2, 3/2\rangle |3/2, 1/2\rangle |3/2, -1/2\rangle |3/2, -3/2\rangle |1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle$ [2]

$$H^{(hkl)} = \begin{bmatrix} A' & 0 & S & T & \frac{R}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{T}{2} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} R \\ 0 & A' & 0 & \frac{S}{\sqrt{3}} & T & R & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} S & -\frac{T}{\sqrt{2}} \\ S^* & 0 & P+Q & D & C & 0 & \frac{D}{\sqrt{2}} & C\sqrt{2} \\ T^* & \frac{S}{\sqrt{3}} & D^* & P-G & 0 & C & -Q\sqrt{2} & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} D \\ \frac{R^*}{\sqrt{3}} & T^* & C^* & 0 & P-Q & -D & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} D^* & \sqrt{2} Q \\ 0 & R^* & 0 & C^* & -D^* & P+Q & -Q\sqrt{2} & \frac{D}{\sqrt{2}} \\ \frac{T^*}{\sqrt{2}} & -S^* \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{D^*}{\sqrt{2}} & -Q\sqrt{2} & -\frac{D\sqrt{3}}{\sqrt{2}} & -C\sqrt{2} & P-\Delta & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} R^* & -\frac{T^*}{\sqrt{2}} & C^* \sqrt{2} & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} D^* & Q\sqrt{2} & \frac{D}{\sqrt{2}} & 0 & P-\Delta \end{bmatrix} \quad (8)$$

où les éléments de matrice (II.1) sont donnés par [2] :

$$A' = E_c + \frac{n^2 K^2}{2m_c}$$

$$S = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle is | H | X' + iY' \rangle$$

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle is | H | X' - iY' \rangle$$

$$T = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \langle is | H | Z' \rangle$$

$$C = \frac{1}{2\sqrt{3}} \langle X' + iY' | H | X' - iY' \rangle$$

$$D = -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle X' + iY' | H | Z' \rangle$$

$$P = \frac{1}{3} \langle X' + iY' | H | X' + iY' \rangle + \frac{1}{3} \langle Z' | H | Z' \rangle$$

$$Q = \frac{1}{6} \langle X' + iY' | H | X' + iY' \rangle - \frac{1}{3} \langle Z' | H | Z' \rangle$$

Par cette hamiltonien en peut diviser en deux parties de bande

la première bande c'est la bande de conduction (2*2) est la deuxièmes bande c'est la Bande de valence (4*4) qui contient les bandes de trou léger et les trou lourd et les bande de spin orbite

Bande de conduction

La matrice sera d'écrit par 2*2 [2]

$$H^c_{2 \times 2} = \begin{bmatrix} A_c & \Omega_c \\ \Omega_c^* & B_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{A_c + B_c}{2} & 0 \\ 0 & \frac{A_c + B_c}{2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{A_c + B_c}{2} & \Omega_c \\ \Omega_c^* & \frac{A_c - B_c}{2} \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$A_c = A' + \left[SS + TT^* + \frac{RR^*}{3} \right] \left(\frac{1}{E_g} \right) + \left(\frac{TT^*}{2} + 2 \frac{RR^*}{3} \right) \left(\frac{1}{E_g + \Delta} \right)$$

$$B_c = A' + (RR^* + TT^* + \frac{SS^*}{3}) \left(\frac{1}{E_g} \right) + \left(\frac{TT^*}{2} + \frac{2SS^*}{3} \right) \left(\frac{1}{E_g + \Delta} \right)$$

$$\Omega_c = \frac{1}{\sqrt{3}} (S^*T + TRT^*) \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta} \right)$$

Bande de valence

La matrice sera d'écrit par 4*4 [2]

$$H_{4 \times 4} = \begin{bmatrix} (P+Q) - \frac{SS^*}{E_g} & D - \frac{S^*T}{E_g} & C - \frac{RS^*}{E_g \sqrt{3}} & 0 \\ D^* - \frac{ST^*}{E_g} & (P-Q) - \frac{TT^*}{E_g} - \frac{SS^*}{3E_g} & -(RT^* + S^*T) \left(\frac{1}{E_g \sqrt{3}} \right) & C - \frac{RS^*}{E_g \sqrt{3}} \\ C^* - \frac{R^*S}{E_g \sqrt{3}} & -(R^*T + ST^*) \left(\frac{1}{E_g \sqrt{3}} \right) & (P-Q) - \frac{TT^*}{E_g} - \frac{RR^*}{3E_g} & -D - \frac{RT^*}{E_g} \\ 0 & C^* - \frac{R^*S}{E_g \sqrt{3}} & -D^* - \frac{R^*T}{E_g} & (P+Q) - \frac{RR^*}{E_g} \end{bmatrix} \quad (10)$$

3. Application pour les semi conducteur Würzite :

Luttinger –Kohn et Kane on introduit une méthode non parabolique par la formalisme K.P avec une diagonalisation de l'hamiltonien 6*6 qui est Rashba –Shecka –Pikus d'un système direction (0001) de la structure wurzite dans l'axe C [3]

$$h^{(0001)} = \begin{bmatrix} F & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 \\ -K & G & H & 0 & 0 & \Delta \\ H & -H^* & \lambda & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & -K & H \\ 0 & 0 & \Delta & -K^* & G & -H^* \\ 0 & \Delta & 0 & H^* & -H & \lambda \end{bmatrix} \begin{cases} |U_1\rangle = -|(X+iY)\uparrow\rangle/\sqrt{2} \\ |U_2\rangle = |(X-iY)\uparrow\rangle/\sqrt{2} \\ |U_3\rangle = |Z\uparrow\rangle \\ |U_4\rangle = |(X-iY)\downarrow\rangle/\sqrt{2} \\ |U_5\rangle = -|(X+iY)\downarrow\rangle/\sqrt{2} \\ |U_6\rangle = |Z\downarrow\rangle \end{cases} \quad (11)$$

Les éléments de matrices sera définit comme suivant :

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta$$

$$G = \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta$$

$$\Delta = \sqrt{2}\Delta_3$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_1 K_z^2 + A_2 (K_x^2 + K_y^2)] + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

$$\theta = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_3 K_z^2 + A_4 (K_x^2 + K_y^2)] + D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

$$K = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (K_x + iK_y)^2 + D_5 \varepsilon^*$$

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 (K_x + iK_y)^2 + D_6 \varepsilon_z^*$$

A_i paramètre de masse effectives pour la bande de valence

D_I =potentiel de déformation pour les cristaux Wurzites

Δ_1 = champ cristallin

$\Delta_{2,3}$ =interaction spin –orbit pour cristaux Wurzites

Les $|U_i\rangle$ sont des base qui forme structure Wurzite

Par les transformation de base , on peut transformé l'hamiltonien (II.3) dans un nouvel hamiltonien et nous obtenons donc [4]:

$$H = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix}$$

(12)

L'hamiltonien H^U c'est Upper hamiltonian est formé par une matrice 3*3 qui est écrit comme suit [4] :

$$H^U = \begin{bmatrix} F & K_t & -iH_t \\ K_t & G & \Delta - iH_t \\ iH_t & \Delta + iH_t & \lambda \end{bmatrix} \begin{matrix} |U1\rangle \\ |U2\rangle \\ |U3\rangle \end{matrix}$$

(13)

L'hamiltonien H^L c'est lower Hamiltonian est formé par une matrice 3*3 qui est écrit comme suit [4] :

$$H^L = \begin{bmatrix} F & K_t & iH_t \\ K_t & G & \Delta + iH_t \\ -iH_t & \Delta - iH_t & \lambda \end{bmatrix} \begin{matrix} |U4\rangle \\ |U5\rangle \\ |U6\rangle \end{matrix}$$

(14)

Ou les bases qui forment les deux matrices sont décrites comme suit :

$$U1 = -\frac{\alpha^*}{\sqrt{2}}|(X + iY) \uparrow\rangle + \frac{\alpha}{\sqrt{2}}|(X - iY) \downarrow\rangle$$

$$U2 = \frac{\beta}{\sqrt{2}}|(X - iY) \uparrow\rangle - \frac{\beta^*}{\sqrt{2}}|(X + iY) \downarrow\rangle$$

$$U3 = \beta^*|Z \uparrow\rangle + \beta|Z \downarrow\rangle$$

$$U4 = -\frac{\alpha^*}{\sqrt{2}}|(X + iY) \uparrow\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}|(X - iY) \downarrow\rangle$$

$$U5 = \frac{\beta}{\sqrt{2}}|(X - iY) \uparrow\rangle + \frac{\beta^*}{\sqrt{2}}|(X + iY) \downarrow\rangle$$

$$U6 = -\beta^*|Z \uparrow\rangle + \beta|Z \downarrow\rangle$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(i\left(\frac{3\pi}{4} + \frac{3\phi}{2}\right)\right)$$

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(i\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2}\right)\right)$$

$$\phi = \tan^{-1}\left(\frac{Kx}{Ky}\right)$$

Conclusion :

Dans cette partie de l'annexe II , nous avons défini les principes de théorie K.P.

Nous avons défini la matrice de hamiltonien K.P dans les cristaux Cubique qui nous permet de déterminer les bandes de valences et les bande de conduction

Ensuite nous avons défini la matrice de l'hamiltonien K.P dans les cristaux Wurzites

Référence :

- (1) Physique des semi-conducteurs par Kireev
- (2) C-N Chen , W-L Su , K-C Chang , S-H Chang , J-C Chiang , I Lo , W-T Wang , H-F Kao , and M-E Lee , J.Appl.Phys, 104 , 024901(2008)
- (3) Y.C.Yeo, T.C .Chong, M.F.Li, and W.J.Fan, J.Appl.PhysVol 84 N 4 (1998)
- (4) S.L.Chang and C.S.Chang, J.Appl .lett, Vol 68, N 12, (16 March 1996)

Résumé:

Dans ce mémoire de Thèse, nous présentons une étude théorique d'optimisation de composants optoélectroniques Lasers à puits quantiques émettant dans l'Infrarouge et le Visible. Ces Lasers sont conçus à base de nanostructures à Puits Quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et de GaN_{1-x}Bi_x/GaAs, combinant une nouvelle famille très intéressante de matériaux semiconducteurs III-V à faible largeur de bande d'énergie interdite: les composés du Bismuth GaBi et leurs alliages ternaires GaAs_{1-x}Bi_x, et GaN_{1-x}Bi_x. Ces matériaux composés du Bismuth sont très intéressants pour les applications optoélectroniques, car ils couvrent un large domaine de longueurs d'ondes allant de l'Infrarouge Lointain dans GaBi (Eg=-1,45eV) et jusqu'au proche Ultraviolet dans GaN (Eg=3,4 eV), en passant par le Visible.

Au chapitre I, nous étudions les propriétés des composés du Bismuth et leurs nanostructures. Nous montrons leur intérêt dans diverses applications, en particulier, en optoélectronique.

Au chapitre II, nous présentons les résultats de notre étude théorique ab-initio réalisée sur les matériaux binaires III-V: GaBi, GaAs, GaN. Ces résultats sont obtenus par la méthode **DFT** (Density Functional Theory) **FP-LAPW** (Full Potential- Linearized Augmented Plane Wave) et ce, dans ses deux approches: **LDA** (Local Density Approximation) et **GGA** (Generalized Gradient Approximation). Nous utilisons la version la plus récente du code de calculs WIEN2k (version octobre 2014) qui inclut des corrections importantes: la correction dite **TB-mBJ** (Tran-Blaha modified Becke-Johnson) qui tient compte d'une manière plus appropriée du potentiel d'échange et corrélations et la correction due à l'interaction Spin-Orbitale (**SO**) qui joue un rôle prépondérant dans ce type de matériau à faible largeur de bande interdite.

Au chapitre III, nous présentons les résultats de notre étude ab-initio basée sur la méthode et réalisée ici sur les alliages ternaires III-V à base de Bismuth GaAs_{1-x}Bi_x et GaN_xBi_{1-x}.

Le chapitre IV est divisé en 2 parties: - la 1^{ère} partie est consacrée à l'étude des propriétés optoélectroniques des hétérostructures à puits quantiques GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaAs et ce, en utilisant la théorie de la fonction enveloppe combinée avec la méthode **k.P**. - La 2^{ème} partie est consacrée à une étude théorique d'optimisation des performances des Lasers conçus à base de nanostructures à Puits quantiques de GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs et GaN_{1-x}Bi_x/GaAs. Nous déterminons ainsi les nanostructures les plus appropriées pour les applications Lasers.

Mots clés: Ab_initio, semiconducteurs III-V du Bismuth, Puits Quantiques, GaAsBi, GaNBi, Lasers, Théorie **k.P**, Gain Laser, Courant de seuil Laser, optimisation.

