



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Modélisation, Simulation et Applications de la Physique

Par :

M^{elle} BENARBIA Soumia

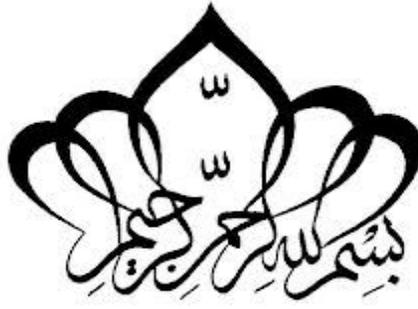
Sur le thème

Etude compréhensive des propriétés optiques des Semi -conducteurs

Soutenue publiquement le 20/06/2017 devant le jury composé de :

Mr CHABANE SARI Nasr-Eddine	Professeur à l'Université de Tlemcen	Président
Mr MERAD Abdelkrim	Professeur à l'Université de Tlemcen	Encadreur
Mr BEKHECHI Smaine	Professeur à l'Université de Tlemcen	Examineur
Mr BENOUAZ Tayeb	Professeur à l'Université de Tlemcen	Examineur
Mr CHIKHAOUI Abdelhak	MCA à l'Université de Tlemcen	Examineur
Mr BRAHMI Nabil	MCB à l'Université de Tlemcen	Examineur

*Laboratoire d'Automatique de Tlemcen (LAT)
Tlemcen - Algérie*



Remerciements

Le travail présenté dans ce projet de fin d'étude a été réalisé au Laboratoire d'Automatique de Tlemcen (LAT), département de physique, Faculté des Sciences, l'université de Tlemcen

*Je veux adresser mes remerciements à mon directeur de mémoire, Monsieur Professeur **MERAD Abdelkrim**, pour sa grande disponibilité et ses encouragements tout au long de la rédaction de ce mémoire.*

*Je remercie à monsieur le professeur **BENOUAZ Tayeb** de m'avoir accueilli dans le laboratoire et m'avoir fait l'honneur de accepté de participer à ce jury*

*Je remercie chaleureusement Monsieur le professeur **CHABANE SARI Nasr-Eddine** d'avoir accepté de présider le jury et de m'honorer de sa présence*

*Je suis très reconnaissante au professeur **BEKHECHI Smaine** et aux Monsieur **CHIKHAOUI Abdelhak** et Monsieur **BRAHMI Nabil** d'avoir accepté d'examiner ce travail et de me faire l'honneur de participer au jury*

Enfin, je remercie infiniment tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin durant la réalisation de ce travail

Dédicaces

Je dédie cette thèse :

À ma chère mère

A Mon père

À mon frère, à tous mes sœurs, ainsi que leurs enfants

À mon fiancé

A tous les membres de ma famille, petits et grands

À tous mes amis et collègues

A tous ceux qui m'ont donné la force de continuer...

SOMMAIRE

Table des figures	8
Liste des tableaux	11
Introduction Générale	13
<i>Chapitre I : les semi-conducteurs et leurs applications</i>	
1. Introduction	16
2. Conducteurs-isolants-semi-conducteurs	16
3. différents types de semi conducteurs	17
3.1. semi conducteur intrinsèque	17
3.2. Les semi-conducteurs extrinsèques	17
3.2.1. Dopage de type n ou donneur	17
3.2.2. Dopage de type p ou accepteur	18
4. Les propriétés optiques	19
4.1. Le processus d'absorption	19
4.1.1. L'absorption dans un semi-conducteur gap direct	20
4.1.2. L'absorption dans un semi-conducteur gap indirect	20
4.2. Le coefficient d'absorption	21
4.2.1. Les semi-conducteurs à gap direct	21
4.2.2. Les semi-conducteurs à gap indirect	21
4.3. Le processus d'émission	22
4.3.1. Conservation de l'énergie	22
4.3.2. Conservation de la quantité de mouvement	23
4.4. L'indice de réfraction	24

5. Applications des semi-conducteurs	24
5.1. Les lasers	24
5.1.1 Définition	24
5.1.2 Caractéristique de la lumière laser	25
5.1.3 Les applications de lasers	26
5.1.4 Structure de la diode bleue à base de GaN	27
5. Les cellules photovoltaïques	28
5.1. Définition phénomène photovoltaïque PV	28
5.2. Le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	28
5.3. Les types de cellules photovoltaïques	29
5.4. Une cellule de CdTe	30
5.5. Les Avantages de la cellule solaire CdTe	31
6. Les Détecteurs infrarouges	32
6.1. Le rayonnement infrarouge	32
6.2. Les types des détecteurs IR	33
7.2.1. Les détecteurs thermiques	33
7.2.2. Les détecteurs quantiques	33
7.3. Les Propriétés fondamentales de HgCdTe	34
8. Conclusion	35
<i>Chapitre II : Méthodes de calcul</i>	
1. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	37
1.1. Approximation de Born-Oppenheimer	39
1.2. Théorème de Hohenberg et Kohn	39
1.3. Equation de Kohn et Sham	41

1.4.	La fonctionnelle d'échange-corrélation	43
1.4.1	L'approximation de la densité locale LDA	43
1.4.2	L'approximation du gradient généralisé GGA	44
1.5	Résolution des équations de Kohn-Sham	45
1.6	La méthode des ondes planes augmentées linéarisée (FP-LAPW)	46
1.6.1	Méthode des ondes planes augmentées APW	46
1.6.2	Méthode des ondes planes augmentées linéarisées LAPW	49
1.7	Les rôles des énergies de linéarisations E_l	50
1.8	Développement en orbitales locales	50
1.8.1	Le concept de la méthode (FP-LAPW)	50
1.9	Le code Wien2k	51
1.10	Conclusion	53
 <i>Chapitre III : Résultats et discussions</i>		
1.	Introduction	55
2.	Présentation des matériaux	55
2.1.	Propriétés cristallographiques	55
2.2.	Propriétés électriques et thermiques	56
3.	Détail de calcul	59
4.	Propriété optique	60
4.1.	La fonction diélectrique	60
4.2.	L'indice de réfraction et le coefficient d'extinction	65

4.3. coefficient d'absorption et la réflectivité	68
5. l'opérateur Scissor	71
6. Description de la correction de Scissor	72
7. Propriété optique	73
7.1. La fonction diélectrique	73
7.2. L'indice de réfraction et le coefficient d'extinction	75
7.3. coefficient d'absorption et la réflectivité	77
8. conclusion	79
Conclusion générale	81
Références bibliographiques	83

Table des Figures :

Figure I.1 : Le processus d'absorption	22
Figure I.2 : (a) gap direct (b) gap indirect	23
Figure I.3 : Le processus d'émission	25
Figure I.4 : schéma d'un système laser	28
Figure I.5 : Structure de la diode bleue à base de GaN	31
Figure I.6 : cellule solaire poly cristalline, Monocristalline	33
Figure I.7 : Schéma des différentes couches composant une cellule CdTe	34
Figure I.8 : Domaines de l'IR dans le spectre électromagnétique	36
Figure II.1 : Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions	49
Figure III.1 : représente la structure cristalline Zinc-blende de CdTe	60
Figure III.2 : représente la structure cristalline Zinc-blende de GaN	62
Figure III.3 : La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\varepsilon'(\omega)$ en fonction de l'énergie du photon du composé CdTe	65
Figure III.4 : La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\varepsilon''(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon	66
Figure III.5 : La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\varepsilon'(\omega)$ en fonction de l'énergie du photon du composé GaN	67
Figure III.6 : La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\varepsilon''(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon	68

Figure III.7 : La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon	69
Figure III.8 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon	70
Figure III.9 : La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon	71
Figure III.10 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon	71
Figure III.11 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon	73
Figure III.12 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon	73
Figure III.13 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon	74
Figure III.14 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon	74
Figure III.15 : La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\varepsilon'(\omega)$ calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon du composé CdTe	77
Figure III.16 : La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\varepsilon''(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	77
Figure III.17 : La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\varepsilon'(\omega)$ calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon du composé GaN	78

Figure III.18: La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\epsilon''(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	78
Figure III.19 : La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	79
Figure III.20 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	79
Figure III.21 : La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	80
Figure III.22 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	80
Figure III.23 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	81
Figure III.24 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	81
Figure III.25 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	82
Figure III.26 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon	82

Liste Des Tableaux :

Tableaux III.1 : les propriétés électriques et thermiques de composé CdTe	61
Tableau III.2 : Les énergies de transitions inter-bande E_0, E_1 et E_2 pour le CdTe	66
Tableau III.3 : les valeurs des $\epsilon_0, \epsilon_\infty$	67
Tableau III.4 : Les valeurs des 3 pics de composé GaN	68
Tableau III.5 : les valeurs des $\epsilon_0, \epsilon_\infty$	68
Tableau III.6 : la valeur statique d'indice de réfraction de deux composés	72
Tableau III.7 : les valeurs des paramètres optiques après la correction « Scissor »	83

Introduction Générale

Introduction générale :

Dans la plupart des domaines de la technologie moderne, les perfectionnements dans le rendement et la rentabilité des systèmes sont souvent limités par les propriétés des matériaux disponibles.

Les matériaux se subdivisent en deux classes : les conducteurs et les isolants (diélectriques).

Cependant, vers 1833, Mr Faraday a remarqué qu'il existait des matériaux ne pouvant être classés dans aucune de ces deux catégories [1].

A l'état pur, ces matériaux étaient à la fois de mauvais conducteurs et de mauvais isolants, or leurs propriétés électriques, notamment la résistivité, variaient très sensiblement sous influence des facteurs extérieurs – de l'environnement (température, pression...), de la présence des impuretés, de la lumière, etc... En occupant une place intermédiaire entre les conducteurs et les isolants, ces matériaux ont été appelés semi-conducteurs.

Le semi-conducteur est défini comme étant un matériau qui possède une résistivité électrique qui s'égalise de 10^{-3} à 10^4 Ωcm (ou plus). Autrement dit, il représente un matériau qui a une énergie de gap comprise entre 0 et ~ 3 eV.

Les matériaux qui ont une énergie de gap nulle ont appelés les métaux ou les semi-métaux, tandis que ceux qui ont une énergie de gap supérieure à 3 eV sont souvent appelés des isolants (Il y a des exceptions à cette définition grossière comme l'exemple du GaN (3.3 eV) que nous avons choisi de l'étudier dans ce mémoire

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont de sources d'intérêt au niveau du plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs. Notre travail est fondé sur l'étude les propriétés optiques (coefficient d'absorption, l'indice de réfraction, constantes diélectriques . . . etc.). Pour cela, nous utilisons une méthode « ab initio » qui est la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) avec l'Approximation de la Densité Local (*LDA*) pour le semi-conducteur CdTe et L'Approximation du Gradient Généralisé (GGA) pour le composé GaN, dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

La présentation de ce travail va donc s'articuler autour des chapitres suivants après avoir présenté l'introduction générale :

Dans le premier chapitre nous présenterons une généralité sur les semi-conducteurs et leurs applications

Le deuxième chapitre, rappelle le principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ainsi que le principe de l'Approximation de la Densité Local (*LDA*) et L'Approximation du Gradient Généralisé (GGA).

Le troisième chapitre, fera l'objet de l'étude des propriétés optiques des semi-conducteurs CdTe et le GaN.

Nous terminerons finalement par une conclusion générale.

Chapitre I:

Les Semi-conducteurs et leurs Applications

1. Introduction :

Les matériaux semi-conducteurs sont depuis longtemps étudiés et leurs propriétés physiques sont en général très bien connues. Une investigation plus profonde de la physique de ces matériaux nécessite des structures de plus en plus sophistiquées.

Dans le domaine des semi-conducteurs, ces dernières années ont été marquées par un effort soutenu dans la croissance et la maîtrise de nouveaux matériaux à fortes potentialités technologiques.

Dans ce chapitre, nous présentons une généralité sur ce type de matériaux « semi-conducteurs » et des exemples d'applications qui peuvent être utilisés.

2. Conducteurs-isolants-semi-conducteurs :

Un conducteur est un matériau qui conduit aisément le courant électrique. Ayant la plus faible résistivité à température ambiante, typiquement inférieure à $10^{-5} \Omega\text{cm}$. Les meilleurs conducteurs sont des matériaux constitués d'un seul élément comme le cuivre, l'argent, l'or et l'aluminium. Ces éléments étant caractérisés par des atomes ayant un seul électron de valence faiblement lié à l'atome. Ces électrons de valence peu retenus peuvent facilement se détacher de leurs atomes respectifs et devenir des électrons libres. Par conséquent, un matériau conducteur possède beaucoup d'électrons libres dont la conduction électrique s'effectue essentiellement par les électrons libres où la concentration diffère peu d'un métal à l'autre (de 10^{22} à 10^{23}cm^{-3}) quelle que soit sa pureté. Une augmentation de la température provoque une légère augmentation de la résistivité pouvant s'expliquer par le fait que les électrons libres sont gênés dans leur déplacement par les vibrations des atomes du métal.

Les matériaux dont la résistivité est typiquement supérieure à $10^8 \Omega\text{cm}$ sont considérés comme isolants : c'est le cas pour le verre, le mica, la silice(SiO_2), ils ne conduisent pas le courant électrique sous des conditions normales. La plupart des bons isolants sont des matériaux composés de plusieurs éléments, contrairement aux conducteurs. Les électrons de valence sont solidement rattachés aux atomes [1].

Si la distance énergétique entre la bande de valence et la bande de conduction n'est pas trop grande, par excitation thermique (apport d'énergie) certains électrons pourront quitter la bande de valence et passer dans la bande de conduction, et donc participer à la conduction du matériau. Ces électrons quittent un état lié pour passer dans un état dit quasi-libre (les électrons restent à l'intérieur du matériau). Le matériau sera appelé **semi-conducteur** si le gap, ou la distance énergétique entre la base de la bande de conduction et le sommet de la bande de valence, n'est pas trop grand, c'est-à-dire inférieur à 3 eV (Voir la définition en page 16). C'est le cas des matériaux Ge, Si, GaAs, InP [2]. Leurs résistivités varient de 10^{-3} à 10^4 Ωcm (ou plus).

3. Différents types de semi conducteurs :

3.1. Semi conducteur intrinsèque :

On dit un semi-conducteur intrinsèque si le nombre d'électrons, n , dans la bande de conduction est égal au nombre de trous, p , dans la bande de valence, $n=p$.

3.2. Semi-conducteurs extrinsèques :

On obtient un semi-conducteur extrinsèque ou dopé lorsqu'on peut modifier de façon considérable la concentration de porteurs de charge d'un semi-conducteur intrinsèque en lui ajoutant des faibles quantités d'atomes astucieusement choisis et que l'on appelle impuretés. Ces dernières ont une valence différente de celle des atomes dans le semi-conducteur à l'état pur.

Selon la nature des atomes introduits, soit le nombre d'électrons devient très supérieur au nombre de trous et le semi-conducteur est appelé de type n, soit le nombre de trous devient très supérieur à celui des électrons et le semi-conducteur est appelé de type

3.2.1. Dopage de type n ou donneur :

Prenons le cas d'un atome de la **colonne V**, par exemple du phosphore. La couche externe de cet atome comporte, *a priori*, 5 électrons. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 9 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, cet électron va quitter son orbite pour circuler dans le cristal. Il rejoint dans ce cas la bande de conduction du cristal. Le noyau de l'atome de phosphore ayant une charge (due à ses protons) qui n'est plus compensée, cet atome va s'ioniser positivement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a **fourni un électron au cristal** (dans sa bande de conduction),

On l'appelle atome **donneur**. Notons que la charge totale du cristal reste nulle, le cristal étant globalement neutre. Pour résumer, un atome dopant de type donneur :

- donne un électron au réseau cristallin,
- s'ionise positivement,
- crée un dopage de type n

3.2.2. Dopage de type p ou accepteur :

Prenons le cas d'un atome de la **colonne III**, par exemple du Bore. La couche externe de cet atome comporte, *a priori*, 3 électrons. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 7 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, un électron de valence voisin va quitter son orbite pour venir créer un octet autour de l'atome de bore. Il crée dans ce cas une lacune dans la bande de valence du cristal, c'est-à-dire qu'il **crée un trou**. Le noyau de l'atome de bore ayant une charge due à ses protons insuffisante, cet atome va s'ioniser négativement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un trou au cristal (dans sa bande de valence), on l'appelle **atome accepteur**, puisqu'il accepte un électron. Notons que la charge totale du cristal reste toujours nulle, le cristal étant globalement neutre. [2]

En général, les principaux facteurs qui déterminent les propriétés fondamentales (par exemple, les propriétés optiques et électriques) des semi-conducteurs sont liés à la composition chimique et à la structure (cristallographique), à la présence de divers défauts et d'impuretés et les dimensions de la structure semi-conductrice ou semi-conductrice (c'est-à-dire liées au régime de confinement quantique).

La composition chimique et la structure (cristallographique) ce qui a une influence majeure sur les propriétés des semi-conducteurs. [3]

4. Les propriétés optiques :

Les semi-conducteurs sont caractérisés par leur bande interdite ou gap, des niveaux interdits pour les électrons séparant deux ensembles de niveaux permis par les électrons, la bande de conduction complètement vide à 0 K et la bande de valence pleine à 0 K. La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique et par suite dans le fonctionnement des composants optoélectroniques. Les semi-conducteurs présentent des propriétés optoélectroniques remarquables qui leur confèrent une place tout à fait importante dans la technologie moderne pour cela il est utile de calculer leurs propriétés optiques.

4.1. Le processus d'absorption :

L'absorption optique dans les semi-conducteurs est expliquée par un échange d'énergie des photons incidents vers les électrons de la bande de valence, provoquant leur excitation vers les niveaux d'énergie de la bande de conduction [4]

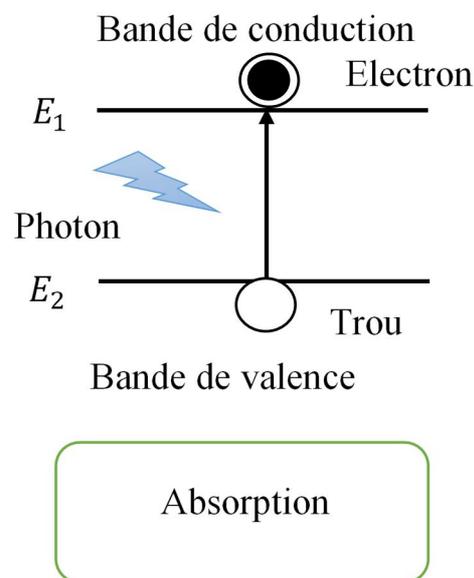


Figure I.1 : Le processus d'absorption

4.1.1. L'absorption dans un semi-conducteur gap direct :

Quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence coïncident dans l'espace des vecteurs d'onde k , il s'agit d'un gap direct les transitions inter-bandes s'effectuent verticalement, et sont donc radiatives (figure I.2(a)).

4.1.2. L'absorption dans un semi-conducteur gap indirect :

Dans le processus d'absorption indirecte la largeur minimale de la bande interdite fait intervenir des électrons et des trous séparés par un vecteur d'onde non négligeable (figure I.2(b)).

Dans ce cas une transition directe correspondant à la largeur minimale de la bande interdite ne peut satisfaire à la condition de conservation du vecteur d'onde, ce processus fait intervenir en plus de l'électron et du photon, un phonon [5].

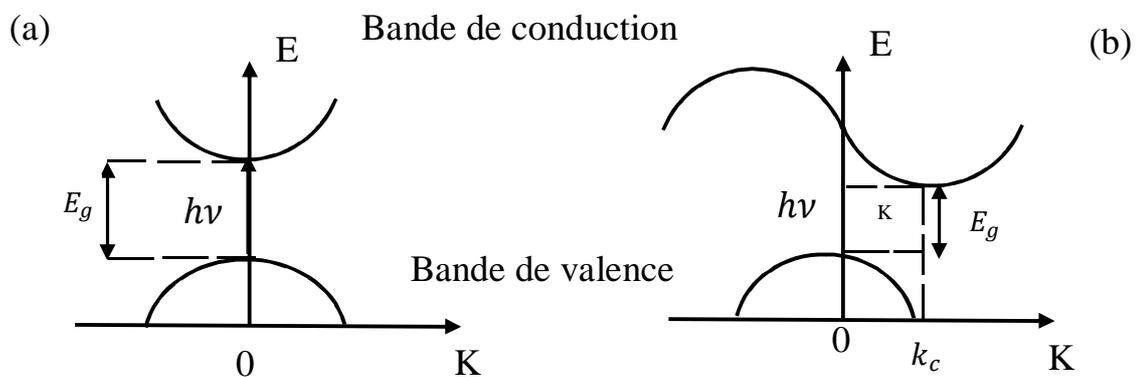


Figure I.2 : (a) gap direct (b) gap indirect

4.2. Le coefficient d'absorption :

L'interaction entre les photons et les électrons se traduit par le coefficient d'absorption il est relié au nombre de photons absorbés par unité d'épaisseur de matériau en fonction de la longueur d'onde l'intensité de l'onde électromagnétique traversant le semi-conducteur est donnée par :

$$I = I_0 \exp(-\alpha z) \quad (1.1)$$

Ou

- α est le coefficient d'absorption du semi-conducteur
- I_0 L'intensité du faisceau incident
- Z la profondeur

4.2.1. Les semi-conducteurs à gap direct :

Dans les semi-conducteurs à gap direct le coefficient d'absorption des photons d'énergie supérieur au gap $h\nu > E_g$, est donné par :

$$\alpha(h\nu) = A^*(h\nu - E_g)^{1/2} \quad (1.2)$$

Ou

- A^* est une constante

4.2.2. Les semi-conducteurs à gap indirect :

Dans les semi-conducteurs à gap indirect, Le coefficient d'absorption relatif à l'absorption d'un phonon d'énergie E_{ph} s'écrit :

$$\alpha_a(h\nu) = \frac{A(h\nu - E_g + E_{ph})^2}{e^{E_{ph}/kT} - 1} \quad (1.3)$$

Le coefficient d'absorption relatif à l'émission d'un phonon d'énergie E_{ph} s'écrit :

$$\alpha_e(h\nu) = \frac{A(h\nu - E_g - E_{ph})^2}{1 - e^{-E_{ph}/kT}} \quad (1.4)$$

4.3. Le processus d'émission :

Dans le processus inverse, l'électron dans la bande de conduction se recombine avec un trou dans la bande de valence pour générer un photon. Ces deux procédés sont d'une importance évidente pour les dispositifs de détection de lumière et d'émission de lumière.

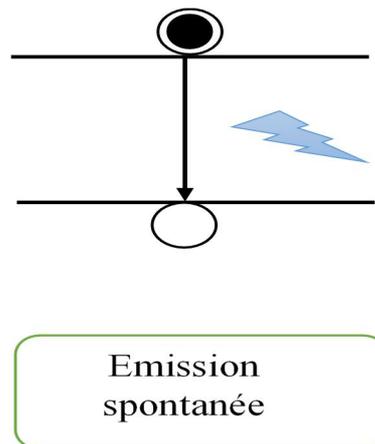


Figure I.3 : Le processus d'émission

Ces processus sont contrôlés par les lois de conservation.

4.3.1. Conservation de l'énergie :

Dans le processus d'absorption et d'émission, l'énergie finale des électrons E_f est exprimée en fonction de leur énergie initiale E_i comme suit :

Pour l'absorption :
$$E_f = E_i + \hbar\omega$$

Pour émission :
$$E_f = E_i - \hbar\omega$$

Avec ω est l'énergie du photon.

Puisque la différence minimale d'énergie entre les états de bande de conduction et de valence est la bande interdite E_g , l'énergie du photon doit être plus grande que la bande interdite.

4.3.2. Conservation de la quantité de mouvement :

En plus de la conservation de l'énergie, on a aussi besoin de conserver le momentum efficace k pour les électrons et le système de photons. La valeur k_{ph} du photon est donnée par équation suivant :

$$k_{ph} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.5)$$

En raison de la conservation k , dans les semi-conducteurs où la bande de valence et les bande de conduction sont à la même valeur $k = 0$ (les semi-conducteurs directs), les transitions optiques sont tout à fait fortes. Dans les matériaux indirects comme Si, Ge, etc., les transitions optiques sont très faibles près des bandes, car elles nécessitent l'aide de vibrations du réseau pour satisfaire la conservation k . Les ondes électromagnétiques traversant un milieu comme un semi-conducteur sont décrites par les équations de Maxwell qui montrent que les ondes ont une forme donnée par la dépendance vectorielle du champ électrique

$$E = E_0 \exp \left\{ i \omega \left(\frac{n_r z}{c} - t \right) \right\} \exp \left(-\frac{\alpha z}{2} \right) \quad (1.6)$$

Avec :

- Z est la direction de propagation
- ω la fréquence
- $n_r L$ l'indice de réfraction
- α le coefficient d'absorption du milieu.

4.4. L'indice de réfraction :

L'indice de réfraction « n » d'une substance est une de ses constantes physiques susceptible de la caractériser au même titre que sa densité ou son point de fusion ou d'ébullition. C'est l'une des notions importantes de l'optique. Cette grandeur caractérise la modification de la propagation des ondes lumineuses par leur interaction avec le milieu matériel dans lequel elles se propagent.

L'indice de réfraction dépend du type de matériau utilisé qu'il soit monocristallin, poly cristallin ou amorphe et du taux d'impuretés dans le matériau. En général, il est lié au gap énergétique du matériau, plus le gap est grand, plus l'indice est petit. En électromagnétisme, l'indice de réfraction se définit à partir de constant diélectrique, substance isolante capable d'emmagasiner de l'énergie électrostatique caractérisée par sa permittivité ou constante diélectrique pouvant prendre des valeurs complexes dans des milieux absorbants. La connaissance de l'indice de réfraction d'un matériau est très importante pour la réalisation des dispositifs électroniques tels que les guides d'ondes, les cellules solaires etc. Plusieurs approches ont été utilisées pour déterminer cet indice de réfraction qui est lié au gap énergétique fondamental du matériau. Donc pour pouvoir choisir un indice pour une application quelconque on doit ajuster le gap électronique c.à.d. affiner la structure électronique du matériau pour qu'il puisse répondre aux exigences de l'application [6].

5. Applications des semi-conducteurs :

5.1. Les lasers :

5.1.1. Définition :

Le mot LASER est un acronyme : **L** (Lumière) **A** (Amplificateur) **S** (Stimulation) **E** (Emission) **R** (Radiation) : c'est à dire Amplification de Lumière par Emission Stimulée de Rayonnement. Le principe consiste à exciter les électrons d'atomes avec une source externe. Ces électrons vont à leur retour en orbite stable émettre un faisceau de lumière cohérente monochrome ce dernier appeler faisceau laser, le laser compose de trois éléments fondamentaux qui sont le milieu actif, le système de pompage et la cavité résonnante.

Un system laser peut être schématisé de la façon suivante :

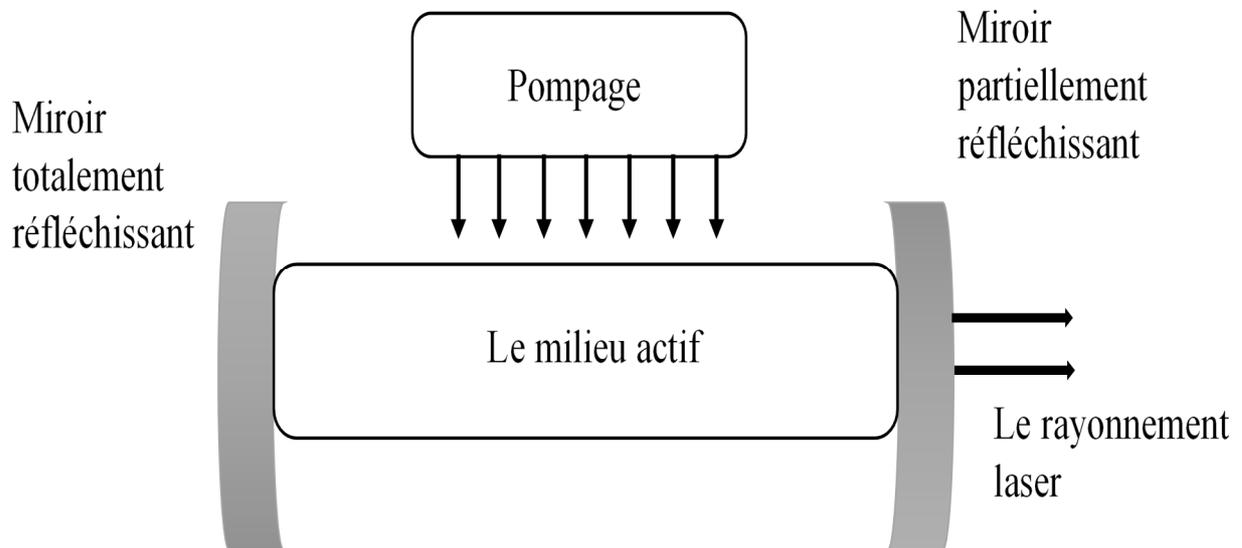


Figure I.4: schéma d'un système laser

5.1.2. Caractéristique de la lumière laser

Les caractéristiques d'un faisceau laser sont :

D'une seule couleur : on dit qu'elle est monochromatique, contrairement à la lumière émise par le soleil ou par une ampoule à incandescence qui est poly chromatique (constituée de plusieurs longueurs d'onde), il existe de nombreux types de lasers de couleurs différentes

Unidirectionnelle : toutes les ondes lumineuses se déplacent dans la même direction et forment un faisceau de lumière étroit, non divergent

Cependant, il peut y avoir une divergence de 1 degré d'arc provoquée par la diffraction lorsque le faisceau se propage dans un milieu, ainsi, le diamètre du faisceau peut augmenter jusqu'à 1mm par mètre parcouru.

Cohérent : Le faisceau laser est ordonné dans le temps et dans l'espace. Ainsi, chaque photon qui la compose oscille en même temps de la même manière. La directivité de la lumière laser est d'ailleurs une conséquence de sa cohérence.

La diode laser se base sur trois processus fondamentaux pour effectuer la génération de la lumière. Ces processus sont l'absorption, l'émission spontanée et l'émission stimulée.

Si le photon absorbé induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de bande de valence avec émission d'un photon, l'émission est dite stimulée [7].

Pour obtenir l'effet laser, il est nécessaire de privilégier l'émission stimulée au détriment des deux autres processus. Deux conditions doivent être réalisées pour favoriser cette émission stimulée et ainsi obtenir l'effet laser :

- Il faut avoir suffisamment d'électrons dans l'état d'énergie supérieure. Dans un semi-conducteur, ceci est réalisé par une opération dite de pompage électrique qui consiste à promouvoir un maximum d'électrons dans la bande de conduction : c'est ce qu'on appelle une inversion de population.
- Il faut favoriser l'émission stimulée : il faut donc avoir suffisamment de photons incidents (excitateurs). Pour cela, on enferme le semi-conducteur dans une cavité résonante constituée par exemple par un résonateur du type Fabry-Pérot, obligeant ainsi l'énergie lumineuse à s'accumuler.

5.1.3. Les applications de lasers :

Au cours des 20 dernières années, le laser n'a cessé de se diversifier et de s'améliorer et il existe à présent de très nombreux types de lasers (liquide, solide ou à gaz) travaillant dans de multiples longueurs d'onde et fréquences et pouvant remplir une multitude d'applications dans tous les domaines : physique, énergie, électronique, télécommunications, médecine, biologie, militaires [8]

Les lasers sont largement utilisés dans la fabrication, par ex. Pour le découpage, le soudage, le traitement de surface, etc.

- ***Applications de soudage :***

Les applications de soudage peuvent nécessiter une puissance élevée, mais seulement une qualité de faisceau modérée, alors que le soudage à distance (c'est-à-dire le soudage avec une distance importante entre la tête de laser et les pièces soudées) dépend d'une qualité de faisceau élevé.

- **Applications médicales :**

Il existe un large éventail d'applications médicales. Souvent, elles concernent les parties extérieures du corps humain, qui sont facilement atteintes par la lumière

Les trois types de laser les plus utilisés dans le domaine de médecine (ex :En dermatologie) sont les lasers CO₂, les lasers (Nd-YAG, YAG KTP)

Dans de nombreux cas, la longueur d'onde du laser est choisie de telle sorte que certaines substances (par exemple les pigments dans les tatouages ou les caries dans les dents) absorbent la lumière plus fortement que les tissus environnants, de sorte qu'ils puissent être ciblés plus précisément.

- **Métrologie :**

Les lasers sont largement utilisés dans la métrologie optique, par ex. Pour des mesures de position extrêmement précises et un profil optique de surface avec interféromètres, pour la recherche et la navigation à longue distance. Les capteurs à fibre optique, souvent sondés par la lumière laser, permettent la mesure répartie de la température, de la contrainte et d'autres quantités.

- **Stockage de données :**

Stockage de données optiques, par ex. Dans des disques compacts (CD), des DVD et des disques magnéto-optiques, repose presque toujours sur une source laser, qui a une cohérence spatiale élevée et peut donc être utilisée pour adresser des taches très petites dans le support d'enregistrement [9] On prend comme exemple un type de laser à semi-conducteur qui est utilisé aux Disques optiques. Laser GaN.

5.1.4. Structure de la diode bleue à base de GaN :

La diode laser est un dispositif à base de matériaux semi-conducteurs. Les candidats pour accéder aux courtes longueurs d'onde (bleu, violet), sont des semi-conducteurs à grande bande interdite comme le séléniure de zinc (ZnSe), le nitrure de gallium (GaN), ou encore le carbure de silicium (SiC). Typiquement, un laser à semi-conducteur est formé d'un empilement de couches de compositions différentes que l'on fait croître sur un substrat. Dans un laser bleu à base de GaN, la région active (qui produit l'émission laser) est constituée de quelques puits quantiques de InGaN contenant 10% à 20% d'In et séparés par des barrières de GaN. Cette zone active est prise en sandwich entre des couches de GaN et AlGaN dopées n ou p,

c'est-à-dire comprenant un excès de charges négatives ou positives (jonction p n). Ces couches jouent le double rôle de guide d'onde pour la lumière émise et de réservoirs d'électrons et de trous qui seront injectés dans la région active par le courant électrique d'alimentation. C'est la recombinaison des paires électron-trou qui va produire les photons de l'émission laser [10].

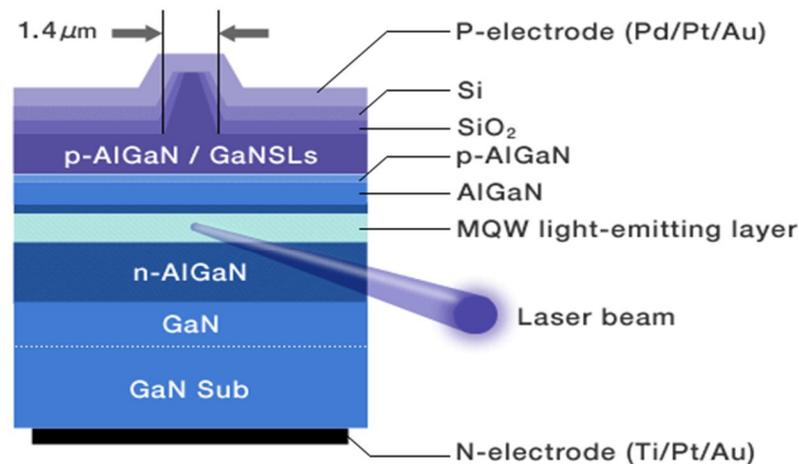


Figure I.5 : Structure de la diode bleue à base de GaN

6. Les cellules photovoltaïques :

6.1. Définition du phénomène photovoltaïque PV :

Le phénomène photovoltaïque est la transformation directe de la lumière en électricité à l'échelle atomique. Certains matériaux se caractérisent par une propriété connue sous le nom d'effet Photoélectrique qui leur fait absorber les photons de la lumière et libérer des électrons. Lorsque ces électrons libres sont capturés, il en résulte un courant électrique qui peut être utilisé comme de l'électricité.

6.2. Le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque :

Le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque de base, également appelée cellule solaire. Les cellules solaires sont fabriquées à partir des mêmes types de matériaux semi-conducteurs, comme le silicium, que ceux utilisés dans le secteur de la microélectronique. Pour les cellules solaires, une fine plaquette semi-conductrice est spécialement traitée pour former un champ électrique, positif sur une face et négatif sur l'autre. Lorsqu'une énergie lumineuse frappe la cellule solaire, les électrons se détachent des atomes du matériau semi-conducteur.

Si des conducteurs électriques sont fixés sur les faces positive et négative, pour former un circuit électrique, les électrons peuvent être capturés sous forme de courant électrique, c'est-à-dire de

l'électricité. Cette électricité peut ensuite être utilisée pour alimenter une charge, telle qu'une lampe ou un outil [11].

6.3. Les types de cellules photovoltaïques :

Il existe différents types de cellules en fonction de la nature et des caractéristiques des matériaux utilisés. Le type le plus commun est la cellule de silicium cristallin (Si). Ce matériau est coupé en tranches minces en forme de disque, monocristallin ou poly cristallin, en fonction du procédé de fabrication de la barre de silicium.

La première cellule de cristal a été fabriqué dans le secteur industriel est le silicium monocristallin pur.

Ces types de cellules solaires ont une énergie efficace, mais ils ont un plus élevé que d'autres types coûtent. Pour cette raison, ils ont actuellement un niveau modéré de mise en œuvre.

Les cellules solaires monocristallines ont généralement une forme carrée avec des coins arrondis. Dans le procédé de fabrication de silicium poly-cristallin, le silicium est laissé se solidifier lentement dans un moule rectangulaire et un solide rectangulaire est obtenu avec de nombreux cristaux, ce qui se traduit dans des cellules poly cristallines. Ces cellules sont plus petites que la performance monocristallin, mais ont actuellement une forte présence, car ils ont un coût économique inférieur monocristallin [12].



Figure I.6 : cellule solaire polycristalline, Monocristalline [11]

Afin de réduire les coûts matière et d'ouvrir de nouvelles applications, une seconde génération des cellules, basée sur des matériaux en couches minces. L'intérêt de la technologie couche

mince vient de la faible quantité de matériau nécessaire à la fabrication d'une cellule comparativement aux cellules classiques. Les principaux matériaux utilisés en couches minces sont le Si amorphe (a-Si), le Si microcristallin ($\mu\text{c-Si}$), le CdTe, le Cu(In,Ga)Se₂ [13 ,14]. On prend comme exemple une cellule de CdTe

6.4. Une cellule de CdTe :

Parmi les technologies couches minces, celles utilisant l'hétérojonction tellurure de cadmium/CdS devraient connaître une forte croissance commerciale dans les années à venir. CdTe présente plusieurs avantages à commencer par son gap de 1.45 eV qui approche la valeur idéale. Ce matériau présente un fort coefficient d'absorption qui lui permet d'absorber 90% des photons incidents sur une couche de seulement quelques μm , et il est stable chimiquement et thermiquement. La couche de CdS sert principalement à assurer le transport des électrons qui sont majoritairement photogénérés dans la zone de charge d'espace de CdTe. Une cellule typique de CdTe est illustrée figure I.8. Une couche ($\sim 2 \mu\text{m}$) de CdTe de type p est accolée à une couche mince ($\sim 0,1 \mu\text{m}$) de CdS de type n pour former une hétérojonction. La couche de CdS est largement transparente aux photons incidents car son gap est de 2.4 eV. Les photons sont essentiellement absorbés par la couche de CdTe. Pour compléter la cellule, une couche de TCO (Transparent Conducting Oxide) recouvre la couche de CdS et est connectée à un contact électrique. Le contact électrique au dos des cellules peut être métallique et recouvrir toute la surface car cette couche n'a pas besoin transparente.

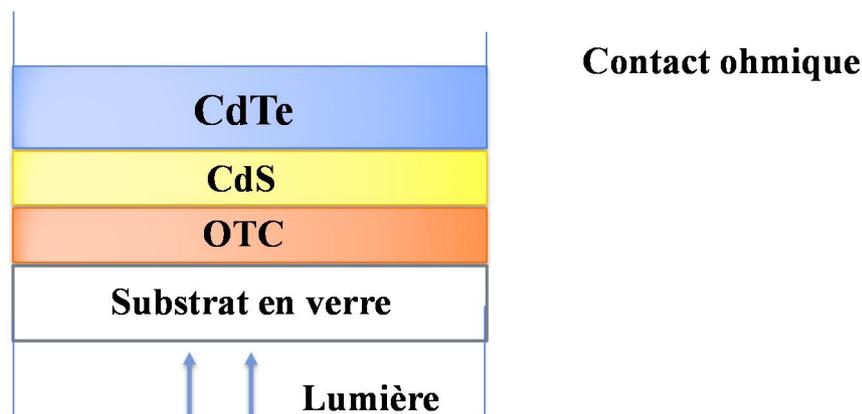


Figure I.8 : Schéma des différentes couches composant une cellule CdTe

6.5. Les Avantages de la cellule solaire CdTe :

- Avantages comme dispositifs individuels :

Le CdTe est un semi-conducteur à bande interdite directe qui ne nécessite pas de phonon dans l'absorption de la lumière ; Par conséquent, il a un coefficient d'absorption élevé ($\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ à 700 nm).

Par conséquent, la cellule solaire CdTe ne nécessite que des matériaux semi-conducteurs très fins ($\sim 2 \mu\text{m}$) Car il absorbe la lumière plus efficacement que Si ($\sim 200 \mu\text{m}$). CdTe a également une bande interdite presque optimale de 1,6 eV pour une génération de puissance maximale lorsqu'elle est utilisée dans un dispositif à jonction unique. Un autre avantage est que le CdTe est un composé binaire ; Il est donc plus facile de maintenir la stœchiométrie que les composés ternaires ou quaternaires.

- Avantages dans la fabrication :

Le fait qu'il y ait une très petite quantité d'utilisation de matériau et une faible quantité de consommation d'énergie dans la croissance poly cristalline donne un temps de récupération d'énergies courtes (EPBT). EPBT est le temps que l'énergie utilisée pour fabriquer le panneau solaire est récupérée par l'énergie générée par le panneau. Le composé binaire simple permet des panneaux solaires uniformes de grande surface. Avec les techniques de traçage au laser, il réduit considérablement le travail manuel. La structure simple a également rendu possible la reproduction d'une efficacité raisonnablement bonne grâce à diverses techniques de dépôt [15].

7. Les Détecteurs infrarouges :

7.1. Le rayonnement infrarouge :

Le rayonnement infrarouge (IR) fut découvert en 1800 par Frédéric Wilhelm Herschel. Ces radiations localisées au-delà des longueurs d'onde dans le rouge, sont situées entre la région du spectre visible et des ondes hertziennes. Le domaine infrarouge s'étend de $0,8 \mu\text{m}$ à $1000 \mu\text{m}$. Il est arbitrairement divisé en 3 catégories,

Le proche infrarouge ($0,8$ à $2,5 \mu\text{m}$ soit 12500 - 4000 cm^{-1}) : A cette longueur d'onde, les verres restent transparents, et ces rayons sont identifiables grâce à des récepteurs identiques ou similaires à ceux utilisés pour détecter la lumière visible (par exemple des **photodiodes**). Ce type d'infrarouge est utilisé pour la transmission d'informations par fibres optiques ou bien encore par les radiateurs destinés au chauffage ou au séchage

Le moyen infrarouge ($2,5$ à $25 \mu\text{m}$ soit 4000 - 400 cm^{-1}) : infrarouge dont la longueur d'onde est située entre 3 micromètres et 20 micromètres. C'est ce type de rayonnement qui a une origine thermique. En effet, ce rayonnement à une source thermique, et plus la température d'un corps est élevée, plus le rayonnement infrarouge ainsi émis est intense. Les matériaux optiques utilisables pour la détection de cette partie d'infrarouges sont **le germanium**, ou bien encore **le séléniure de zinc**

Le lointain infrarouge (25 à $1000 \mu\text{m}$ soit 400 - 10 cm^{-1}) : infrarouge dont la longueur d'onde est supérieure à 20 micromètres. Ce type de rayonnement est difficilement détectable et nécessite des capteurs très sensibles descendus à température très basse (grâce par exemple à l'hélium liquide). Ce type de rayonnement est utilisé notamment pour **la spectroscopie moléculaire** ou les expériences spatiales [16].

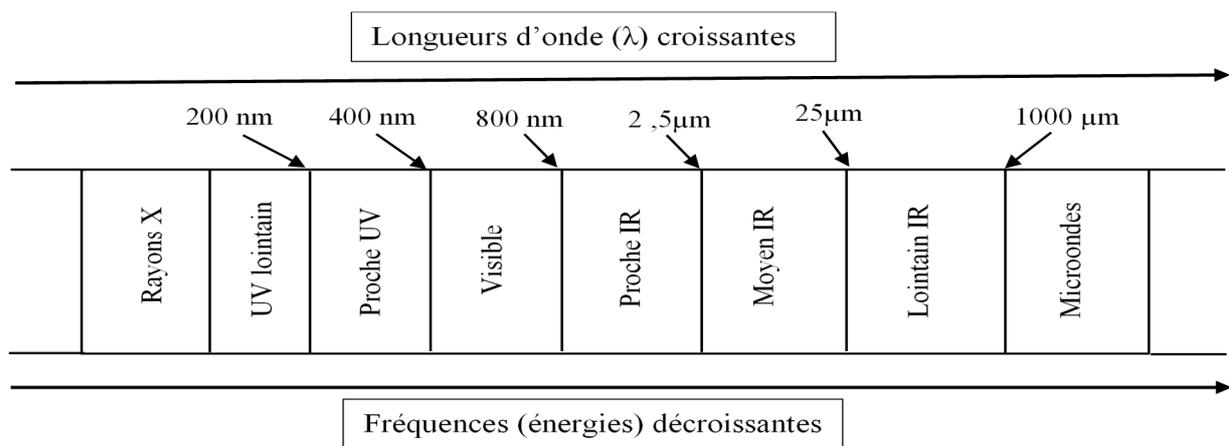


Figure I.9 : Domaines de l'IR dans le spectre électromagnétique

La nécessité de mesurer ou de déceler les rayonnements optiques situés en dehors du domaine spectral de sensibilité de l'œil. Alors le besoin de capteurs sensibles à ce rayonnement : les détecteurs infrarouges [17]. Il existe principalement deux filières de détecteurs IR : les détecteurs thermiques et les détecteurs quantiques.

7.2. Les types des détecteurs IR :

7.2.1. Les détecteurs thermiques :

Les détecteurs thermiques sont des récepteurs dans lesquels le flux lumineux est transformé en chaleur par absorption. La mesure de la variation thermique d'un paramètre du matériau délivre le signal.

Les détecteurs thermiques fonctionnent selon un principe simple lorsqu'ils sont chauffés par un rayonnement infrarouge entrant, leur température augmente et les changements de température sont mesurés par tout mécanisme dépendant de la température, tel que la tension thermoélectrique, la résistance [18].

7.2.2. Les détecteurs quantiques :

Les détecteurs quantiques utilisent l'effet photoélectrique pour mesurer le flux de photons incidents, qui génère un courant appelé courant photonique résultant d'un processus d'excitation.

Il existe plusieurs filières technologiques de détecteurs quantiques, que l'on peut classer en deux catégories :

- Les détecteurs photovoltaïques, dans lesquels la structure de détection est basée sur une jonction p-n. Diverses architectures existent, on peut citer par exemple Les détecteurs à semi-conducteur massif et les super-réseaux.
- Les photoconducteurs, qui sont basés sur l'utilisation d'un semi-conducteur dopé « n » ou « p », auquel on applique une tension de polarisation pour détecter les photons incidents. Parmi les architectures connues, on peut citer les multi-puits quantiques.

L'inverse des détecteurs thermiques, ces détecteurs ont besoin d'être refroidis afin que l'agitation thermique des électrons ne vienne pas perturber le signal mesuré. Ils sont d'ailleurs appelés "détecteurs refroidis". Ces détecteurs ont une signature spectrale propre très caractéristique que l'on étudiera dans le cas des détecteurs photovoltaïques HgCdTe [19].

Nous allons présenter dans les paragraphes qui suivent l'un de type des détecteurs quantiques qui est appelé « détecteur HgCdTe ». À l'heure actuelle, le HgCdTe est le plus utilisé pour la photodétecteurs IR en raison de ces propriétés remarquables.

Les détecteurs infrarouges quantiques à base de HgCdTe ont des sensibilités extrêmement grandes (résolution thermique de quelques millièmes de degré K) et atteignent le plus souvent les limites théoriques, mais ceci à la condition d'être refroidis à basse température (typiquement 78 K) [20].

7.3. Les Propriétés fondamentales de HgCdTe :

L'alliage ternaire HgCdTe est un système de matériau détecteur infrarouge idéal. Sa position est conditionnée par trois caractéristiques principales :

- un intervalle de bande d'énergie adaptable sur la plage de 1 à 30 μ m,
- de grands coefficients optiques qui permettent un rendement quantique élevé,
- des mécanismes de recombinaison inhérents favorisant une température de fonctionnement élevée.

Ces propriétés sont une conséquence directe de la structure de bande d'énergie du zinc Blende semi-conducteur. De plus, les avantages spécifiques de HgCdTe sont la capacité à Obtenir des concentrations de porteurs faibles et élevées, une mobilité élevée des électrons et un faible constante diélectrique [21].

8. Conclusion :

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté des rappels sur les semi-conducteurs qui se comportent en fonction de la population d'électrons et de trous dans chacune des bandes de conduction et de valence.

De ce fait, les semi-conducteurs se distinguent des autres solides par leurs propriétés très différentes, l'intérêt vient du fait que l'on sait très bien contrôler ces propriétés par une excitation externe contrôlable par l'utilisateur (dopage, champ électrique, onde électromagnétique etc. ...).

Les matériaux semi-conducteurs présentent un riche éventail de propriétés optiques mises en valeurs dans de nombreuses applications pratiques telles que les détecteurs de rayonnement lumineux et de sources de radiation spontanée ou stimulée comme les photoconducteurs, les photodiodes, photovoltaïques, quant au domaine d'émission, on peut citer les diodes électroluminescentes, les lasers, les télécommunications, etc.

Chapitre II :

Méthodes de Calcul

1. La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité :

Dans les domaines de la physique du solide et de la chimie quantique, La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une des méthodes quantiques les plus couramment employées pour la détermination des grandeurs physiques et quantiques d'un système (et particulièrement les systèmes contenant un grand nombre d'électrons), telles que sa structure électronique, son énergie d'ionisation ... etc.

En effet, elle repose sur les fondements de la mécanique quantique et ne fait intervenir qu'un nombre limité de données d'entrées. Pour un système donné à plusieurs corps, elle permet de résoudre l'équation de Schrödinger sans l'introduction de paramètres ajustés par l'expérience. Les méthodes « ab initio » qui reposent sur la DFT permettent de modéliser les matériaux de manière fiable et quantitative et de traiter des systèmes de taille importante. Elles autorisent de ce fait la comparaison avec les résultats expérimentaux.

Dans ce chapitre, nous exposerons les bases sur lesquels repose la DFT, en discutant les différents niveaux d'approximations nécessaires à la résolution de l'équation de Schrödinger [1].

La résolution de l'équation de Schrödinger pour un tel système est extrêmement difficile comme l'a déclaré Dirac en 1929

$$H \Psi = E \Psi \quad (\text{II.1})$$

Un solide est une collection de particules lourdes, chargées positivement (noyaux) Et des particules légères, charges négativement (électrons) si nous avons N noyaux, nous sommes confrontés à un problème de (N+ZN) particules en interaction électromagnétique c'est un problème a plusieurs corps

L'hamiltonien exact pour ce système compose de cinq termes : l'énergie cinétique des Noyaux et celle des électrons, ainsi que les différentes interactions entre eux :

$$\vec{H} = \vec{T}_n + \vec{T}_e + \vec{V}_{n-n} + \vec{V}_{n-e} + \vec{V}_{e-e} \quad (\text{II.2})$$

Ou :

- T_n : est l'énergie cinétique des noyaux
- T_e : est l'énergie cinétique des électrons
- V_{n-n} : L'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux
- V_{n-e} : L'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons
- V_{e-e} : L'énergie potentielle de répulsion entre les électrons

Plusieurs questions sont posées autour de ce problème : Comment résoudre le problème à N corps ? Autrement dit, comment obtenir l'état fondamental du système à partir de l'équation de Schrödinger ?

Pour répondre à toutes ces questions des nombreuses approches ont été développé pour affranchir cette difficulté. Nous avons besoin de faire des approximations, Premièrement, on trouve l'approximation de Born-Oppenheimer.

1.1. L'approximation de Born-Oppenheimer :

Selon Born-Oppenheimer (Max Born (1882-1970) et Robert Oppenheimer (1904- 1967), le traitement des électrons et des noyaux d'une façon séparé est la seule possibilité qui permet la simplification de ce problème et la résolution de l'équation de Schrödinger [2] Supposent que les noyaux sont très lourds et donc plus lents que les électrons, ainsi les électrons peuvent se déplacer dans le solide beaucoup plus rapide que les noyaux. Donc, le mouvement de noyaux est négligeable alors leur énergie cinétique est nul et l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux devient constante. Cette approximation est basé sur approximation adiabatique connu sous le nom « approximation adiabatique de BO» [3].

Le hamiltonien électronique peut ainsi être défini comme :

$$\vec{H} = \vec{T}_e + \vec{V}_{n-e} + \vec{V}_{e-e} \quad (\text{II.3})$$

Plusieurs méthodes existent pour la résolution de l'équation (II.3) dont les premières sont les méthodes de Hartree-Fock basées sur hypothèse des Électrons libres. Ces méthodes sont beaucoup utilisées en chimie quantique pour traiter les atomes et les molécules, mais elles sont moins précises pour les solides. Il existe une méthode plus moderne et probablement plus puissante qui est la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).

Son histoire revient à la première trentaine du 20^{ème} siècle mais elle a été formellement établie en 1964 par les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn Ces auteurs ont démontré que tous les aspects de la structure Electronique d'un système dans un état fondamental non dégénère sont complètement déterminés par sa densité électronique $\rho(r)$ au lieu de sa fonction d'onde.

1.2. Théorèmes de Hohenberg et Kohn (1964) :

Dans le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité, l'utilisation de la densité de charge comme fonction principale permet de reformuler le problème de la résolution de l'équation de Schrödinger électronique est basé sur les théorèmes de Hohenberg et Khon. [4] sur lequel repose toute la DFT qui se résume en deux théorèmes

- **Premier théorème :**

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

$$E = E[\rho(r)] \quad (\text{II.4})$$

- **Deuxième théorème :**

Hohenberg et Kohn montrent que la valeur minimale de cette fonctionnelle est l'énergie exacte de l'état fondamental, et que la densité qui conduit à cette énergie est la densité exacte de l'état fondamental. Les autres propriétés de l'état fondamental sont aussi fonctionnelles de cette densité.

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{II.5})$$

Ou :

- ρ_0 : la densité de l'état fondamental.

La démonstration du fait que l'énergie totale d'un système à l'état fondamental soit une fonctionnelle de la densité électronique a permis à Hohenberg et Kohn d'exprimer cette fonctionnelle $E[\rho(r)]$ selon l'expression suivante :

$$E[\rho(r)] = F[\rho(r)] + \int V_{ext}(r)\rho(r)d^3r \quad (\text{II.6})$$

Avec :

$$F[\rho(r)] = \langle \Psi | T + V | \Psi \rangle$$

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

Il n'existe pas une formulation exacte pour exprimer l'énergie cinétique comme une fonctionnelle de la densité électronique. Les équations de Kohn et Sham présentent la seule solution de ce problème qui est établies dans l'objectif de fournir des fondements nécessaires pour exploiter de façon effective les théorèmes de Hohenberg et Kohn [5].

1.3. Les équations de Kohn-Sham :

En 1965 Walter Kohn et Lu Sham [3] proposent une méthode pratique permettant d'utiliser la théorie de la fonctionnelle de la densité. Tout d'abord ils supposent qu'il existe un système fictif de N électrons indépendants ayant la densité dans son état fondamental.

L'intérêt vient du fait que les expressions de l'énergie cinétique et de l'énergie potentiel pour ce système fictif sont connues. Puis, ils montrent que pour qu'il en soit ainsi, ces électrons doivent être plongés dans un potentiel extérieur effectif, c'est la première équation de *Kohn-Sham* ($K.S$), et ont utilisé le principe variationnel pour obtenir l'énergie de l'état fondamental et la densité donnant la fonctionnelle $E_{xc}[\rho]$. Par conséquent, la fonctionnelle d'énergie $E_{KS}[\rho]$ s'écrit sous la forme.

$$E_{KS}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho] + V_{est}[\rho] \quad (\text{II.7})$$

Avec :

- T_0 : l'énergie cinétique du système sans interaction,
- V_H : désigne le terme de Hartree (l'interaction de Coulomb classique entre les électrons),
- V_{xc} : Le terme qui comprend les effets de l'échange et de la corrélation,
- V_{est} : inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux.

Les termes les plus importants dans le traitement de l'interaction des électrons sont :

Le terme de Hartree et celui de l'énergie cinétique qui jouent un rôle important dans la description des états des électrons libres. L'équation de Schrödinger à résoudre dans le cadre de l'approche de Kohn et Sham est de la forme suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_i^2 + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] |\varphi_i(\vec{r})\rangle = \varepsilon_i |\varphi_i(\vec{r})\rangle, i = 1, \dots, N \quad (\text{II.8})$$

Où le potentiel effectif est de la forme :

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ext}} + \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{\text{xc}} \quad (\text{II.9})$$

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

$$V_{\text{xc}}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{\text{xc}}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (\text{II.10})$$

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

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \quad (\text{II.11})$$

Déterminer l'état fondamental du système revient alors à résoudre, de manière auto cohérente, l'ensemble des équations (II.8) appelés équations de Kohn et Sham.

Lorsque la connaissance de le potentiel d'échange-corrélation sera précise, plus φ sera connue avec précision, plus l'énergie sera proche de l'énergie exacte. Cela implique qu'il est nécessaire de trouver une expression pour le terme d'échange-corrélation $V_{\text{xc}}[\rho]$ qui se rapproche plus de l'expression exacte. Pour cela, il existe plusieurs approximations.

Parmi ceci, l'approximation de la densité locale (LDA) qui est la plus simple est celle qui consiste à considérer la densité comme celle d'un gaz d'électrons homogènes, c.-à-d. la densité varie lentement en fonction de position. Puis les méthodes d'Approximation du Gradient Généralisé (GGA) où l'énergie d'échange-corrélation dépend non seulement de la densité mais aussi de ses dérivées.

1.4. La fonctionnelle d'échange-corrélation

La forme de la fonctionnelle échange-corrélation, présente la principale difficulté de la DFT. Il faut alors avoir recours à une approximation pour l'évaluer. Il existe de nombreuses approximations de la fonctionnelle d'échange-corrélation. Pour cela, on désigne l'approximation de la densité locale (LDA) et l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA).

1.4.1. L'approximation de la densité locale (LDA) :

Afin d'obtenir une bonne approximation de la fonctionnelle d'échange-corrélation $E_{xc}[\rho]$ Kohn et Sham proposait dès 1965 l'approximation de la densité locale (LDA). Dans cette approximation, on suppose que la densité électronique varie suffisamment lentement à l'intérieur du système, Cette approximation repose sur l'hypothèse que les termes d'échange-corrélation ne dépendent que de la valeur locale $\rho(r)$ c'est-à-dire qu'elle traite un système non homogène comme étant localement homogène L'énergie d'échange-corrélation [6] s'exprime alors de la manière suivante.

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] d^3\vec{r} \quad (\text{II.12})$$

- ε_{xc} : Représente l'énergie d'échange - corrélation d'un gaz d'électron uniforme.

La LDA suppose que la fonctionnelle ε_{xc} est purement locale. Cette énergie est divisée en deux termes :

$$\varepsilon_{xc}(\rho(r)) = \varepsilon_x(\rho(r)) + \varepsilon_c(\rho(r)) \quad (\text{II.13})$$

- ε_x est l'énergie d'échange
- ε_c est l'énergie de corrélation

La fonctionnelle ε_{xc} peut être constante, mais généralement, elle est déterminée par des procédures de paramétrage comme celles de Wigner [7], Ceperly et Alder [8], Perdew et Zunger [9], Kohn et Sham [5], Hedin et Lundqvist [10] et Perdew et Wang [11].

1.4.2. L'approximation du gradient généralisé (GGA) :

L'énergie d'échange-corrélation dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) est une fonctionnelle des densités de charges locales et de leurs gradients s'écrivent de la forme générale [12] suivante :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) f_{xc}(\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})) d^3\vec{r} \quad (\text{II.14})$$

Avec :

- $f_{xc}(\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r}))$: est une fonction de la densité locale et du gradient de la densité

Les paramétrisations utilisées pour la GGA sont différentes. Parmi elles celles de Perdew et al. (1992) [13] et Perdew et al. (1996) [14]. Il existe plusieurs versions de la GGA les plus utilisées sont celles de Perdew et Wang [15] et Perdew [16].

1.5. Résolution des équations de Kohn-Sham :

La résolution des équations de Kohn et Sham nécessite le choix d'une base pour les fonctions d'ondes que l'on peut prendre comme une combinaison linéaire d'orbitales appelées orbitales de Kohn-Sham (KS) écrites sous la forme suivante

$$\varphi_i(\vec{r}) = \sum C_{ij} \phi_j(\vec{r}) \quad (\text{II.15})$$

Ou :

- les $\phi_j(\vec{r})$ sont les fonctions de base et les C_{ij} coefficients de développement.

La résolution des équations de Kohn et Sham se résume à la détermination des coefficients C_{ij} pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. La résolution des équations de KS pour les points de symétrie dans la première zone de Brillouin permet de simplifier les calculs [17].

La résolution des équations de Kohn et Sham revient à déterminer les coefficients C_{ij} pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. Cette résolution se fait d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent.

Il existe plusieurs méthodes de calcul des propriétés des solides et leur point commun est la résolution de l'équation de Kohn et Sham de façon auto cohérente. Cette dernière est l'origine de plusieurs méthodes numériques, parmi ces méthodes qui sont utilisées dans le calcul ab-initio, la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW : Full Potential Linearized Augmented Plane Wave) et la méthode des orbitales muffin-tin linéarisées à potentiel total (FP-LMTO : Full Potential Linearized Muffin Tins Orbitals) qui permettent de gagner plusieurs ordres de grandeur dans le temps de calcul qui seront présentées dans les paragraphes suivants .

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

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW : Linearized Augmented Plane Wave), développée par Andersen [18], est fondamentalement une amélioration de la méthode dite des ondes planes augmentées (APW : Augmented Plane Wave) élaborée par Slater [19, 20] (cette méthode est détaillée encore plus dans le livre de Loucks [21]).

Avant de décrire la méthode FP-LAPW, et d'exposer leur principe, nous allons voir les différents aspects de la méthode APW et rappellerons ces bases.

1.6.1. La méthode des ondes planes augmentées (APW) :

La méthode des ondes planes augmentées (APW) est exposée par Slater dans son article [22]. Il a supposé qu'au voisinage du noyau atomique le potentiel et les fonctions d'onde sont similaires à ceux que dans un atome isolé. Certainement, ils varient fortement, mais ils sont presque sphériques, alors que les électrons qui sont loin du noyau considérés comme libres, d'où leur comportement est représenté par des ondes planes. La méthode APW est basée sur l'approximation « Muffin-tin » pour décrire le potentiel cristallin qui s'appelle le potentiel « Muffin-Tin » [23].

Selon cette approximation, la cellule unitaire se divise en deux régions, illustrées sur la Figure (II.1).

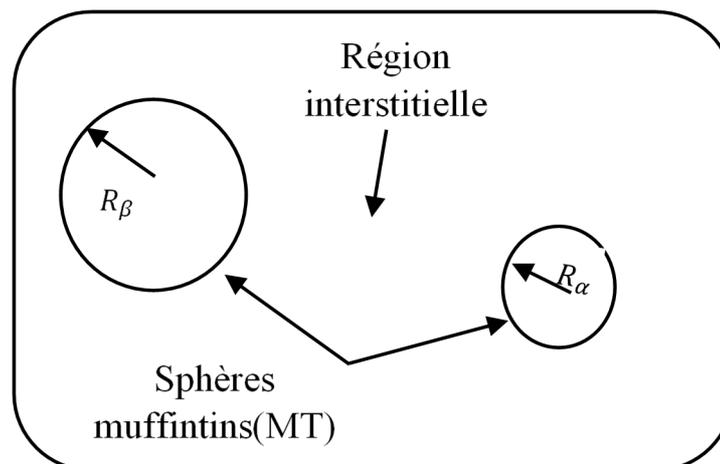


Figure II.1 : Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions

Région I : décrit les sphères appelées les sphères « Muffin-tin » [24] qui ne se chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome α de rayon R_α (les sites atomiques) dans lesquels les solutions radiales de l'équation de Schrödinger sont employées.

Région II : décrit la région interstitielle délimitant l'espace résiduel non occupé par les sphères (voir la figure (II.1)), où le potentiel est lisse ou varie très lentement.

Les deux régions sont définies par les fonctions d'ondes ϕ_I et ϕ_S qui sont écrites sous la forme suivante :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \phi_I(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(\vec{K}+\vec{G})\cdot\vec{r}} & r > R_\alpha \\ \phi_S(\vec{r}) = \sum_{lm} A_{lm} U_l^\alpha(r, E_l) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.16})$$

- $\phi(\vec{r})$: La fonction d'onde.
- Ω : Le volume de la cellule unitaire de simulation.
- $U_l^\alpha(r, E_l)$: La fonction radiale.
- $Y_{lm}(r)$: L'harmonique sphérique.
- C_G, A_{lm} : Les coefficients du développement en ondes planes et en harmonique sphérique.
- \vec{K} : Le vecteur d'onde dans la première zone irréductible de Brillouin (ZIB).
- \vec{G} : Le vecteur de réseau réciproque.
- \vec{r} : Les positions à l'intérieur des sphères α et β .
- R_α, R_β Les sphères Muffin tin α et β .

La fonction $U_l^\alpha(r)$ est une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale qui s'écrit sous la forme :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (\text{II.17})$$

Pour assurer la continuité de la fonction $\Phi(r)$ à la surface de la sphère MT, les coefficients A_{lm} , doivent être développés en fonction des coefficients C_G , des ondes planes existantes dans les régions interstitielles. Ainsi, après quelques calculs algébriques, nous trouvons que :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^2 U_l(R_\alpha)} \sum_G C_G j_l(|K + G|R_\alpha) Y_{lm}^*(K + G) \quad (\text{II.18})$$

Où :

- j_l sont les fonctions sphériques de Bessel, 4π provient de la surface des sphères *Muffin – Tin* [25].

A partir l'équation (II .18), les A_{lm} coefficients sont déterminé à partir de ceux des ondes planes et C_G, E_l (les paramètres d'énergie). Les fonctions individuelles, étiquetées par G deviennent ainsi compatibles avec les fonctions radiales dans les sphères, et on obtient alors des ondes planes augmentées (APWs).

Les fonctions APWs sont des solutions de l'équation de Schrödinger dans les sphères, mais seulement pour l'énergie E_l . En conséquence, l'énergie E_l doit être égale à celle de la bande d'indice G. Ceci signifie que les bandes d'énergie (pour un point k) ne peuvent pas être obtenues par une simple diagonalisation, et qu'il est nécessaire de traiter le déterminant séculaire comme une fonction de l'énergie.

La méthode APW ainsi construite représente quelques difficultés de calcul, dont celles liées au problème de l'asymptote, car les coefficients donnés par l'équation (II.18) contiennent le terme $U_l(R_\alpha)$ qui apparaît au dénominateur de l'équation. Il est donc possible de trouver des valeurs de l'énergie pour lesquels la valeur $U_l(R_\alpha)$ s'annule à la limite de la sphère. C'est ce qu'on appelle le problème de l'asymptote. Les calculs deviennent plus compliqués quand les bandes apparaissent près de l'asymptote.

Donc, afin de surmonter ce problème, plusieurs modifications à la méthode APW ont été apportées, notamment celles proposées par Koelling[26] et par Andersen [27].

1.6.2. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) :

La méthode LAPW constitue l'une des bases les plus précises pour le calcul des solides cristallins, et comme nous avons déjà mentionné dans les paragraphes précédents que cette dernière utilise une description du potentiel de type Muffin-Tin et correspond à une amélioration de la méthode APW développée par Andersen [28, 29], Koelling et Arbman [28, 30] basé sur l'idée de Marcus.

Dans la méthode LAPW les fonctions de base dans MT sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $U_l(r)y_{lm}$ et de leurs dérivées $\dot{U}_l(r)y_{lm}$ par rapport à l'énergie. Les Fonctions U_l comme dans la méthode APW et la fonction $U_l(r)y_{lm}$ doivent satisfaire la condition suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = 0 \quad (\text{II.19})$$

Ces fonctions radiales $U_l(r)$ et $\dot{U}_l(r)$ assurent, à la surface de la sphère MT, la continuité avec les ondes planes de l'extérieur. Les fonctions d'onde ainsi augmentées deviennent les fonctions de base (LAPW) de la méthode FP-LAPW :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(\vec{K}+\vec{G})\cdot\vec{r}} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r, E_0) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_0)] Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.20})$$

1.7. Les rôles des énergies de linéarisation (E_l) :

Les fonctions U_l et \dot{U}_l sont orthogonales à n'importe quel état de cœur strictement limité à la sphère MT. Mais cette condition n'est satisfaite que dans le cas où il n'y a pas d'états de cœur avec le même l , et, par conséquent, on prend le risque de confondre les états de semi-cœur avec les états de valence. Ce problème n'est pas traité par la méthode APW, alors que la non orthogonalité de quelques états de cœur dans la méthode FP-LAPW exige un choix délicat de E_l . Dans ce cas, on ne peut pas effectuer le calcul sans modifier E_l .

La solution idéale dans de tels cas est d'utiliser un développement en orbitales locales. Cependant, cette option n'est pas disponible dans tous les programmes, et, dans ce cas, on doit choisir un rayon de la sphère le plus grand possible. Finalement, il faut remarquer que les divers E_l devraient être définis indépendamment les uns des autres. Les bandes d'énergie ont des orbitales différentes. Pour un calcul précis de la structure électronique, E_l doit être choisi le plus proche possible de l'énergie de la bande, si la bande a le même l .

1.8. Développement en orbitales locales :

Le développement de la méthode LAPW consiste en une modification des orbitales locales de sa base afin d'éviter l'utilisation de plusieurs fenêtres. L'idée principale est de traiter toutes les bandes avec une seule fenêtre d'énergie en particulierisant l'état de semi-cœur. Plusieurs propositions ont été faites par Takeda [31], Smrcka [32], Petru [33] et Schanghnessy [34]. Récemment Singh [35] a proposé une combinaison linéaire de deux fonctions radiales correspondant à deux énergies différentes et de la dérivée par rapport à l'énergie de l'une de ces fonctions.

1.8.1. Le concept de la méthode (FP-LAPW) :

Dans la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves : FP-LAPW) [39] aucune approximation n'est faite pour la forme du potentiel ni de la densité de charge. Ces derniers sont plutôt développés en des harmoniques du réseau à l'intérieur de chaque sphère atomique, et en des séries de Fourier dans les régions interstitielles ; ce qui est à l'origine du nom Full-Potential.

Cette méthode assure donc la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT et le développe sous la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} \sum_k V_k e^{ikr} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.21})$$

De la même manière, la densité de charge est développée sous la forme :

$$\rho(r) = \begin{cases} \sum_k \rho_k e^{-kr} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} \rho_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.22})$$

Cette méthode est très précise, très utilisée, avec une efficacité de calcul raisonnable pour simuler les propriétés des matériaux sur la base de Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT).

1.9. Le code Wien2k :

Le code Wien2k est une implémentation de la méthode FP-LAPW. Ce programme a été conçu par Blaha et ses collaborateurs [40]. Ses applications sont nombreuses, telles que le gradient du champ électrique [41,42], les systèmes supraconducteurs à haute température [43], les minéraux [44], les surfaces des métaux de transition [45], les oxydes non ferromagnétiques [46].

Le code Wien2k est constitué de plusieurs programmes indépendants liés par le CSHELL SCRIPT. Le calcul se fait en trois étapes :

1. Initialisation :

Pour déterminer les propriétés d'un matériau donné, il faut générer les données de départ qui se trouvent dans le fichier case.struct. Ce dernier contient le paramètre du réseau, la structure cristalline, les rayons muffin-tin, les opérations de symétrie...etc. Cette étape est faite pour la préparation du cycle SCF. Ces éléments sont générés par une série de petits programmes :

- **NN** : donne les distances entre plus proches voisins et aide à déterminer le rayon de la sphère muffin-tin.
- **LSTART** : génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande (c'est à dire états de cœur et états de valence, avec ou sans orbitales locales ...).
- **SYMMETRY** : 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** : génère une maille k dans la zone de Brillouin.
- **DSTART** : génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

2. Calcul SCF : le cycle SCF comprend les étapes suivantes :

- **LAPW0** : génère le potentiel à partir de la densité.
- **LAPW1** : calcule les bandes de valence (les valeurs propres et les vecteurs propres)
- **LAPW2** : calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres.
- **LCORE** : calcule les états de cœur et les densités.
- **MIXER** : mélange les densités de valence et du cœur pour produire la nouvelle densité.

3. Calcul des propriétés : le calcul des propriétés physiques se fait à l'aide des programmes

:

- **OPTIMISE** : détermine l'énergie totale en fonction du volume qui sert à calculer le paramètre du réseau, le module de compressibilité et sa dérivée.
- **TETRA** : calcule la densité d'état totale et partielle.
- **SPAGHETTI** : calcule la structure de bandes en utilisant les valeurs propres générés par LAPW1.
- **OPTIC** : calcule les propriétés optiques.
- **XSPEC** : calcule les structures des spectres d'absorption et émission des rayons

X

1.10. Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons décrit la méthode de premier principe « ab-initio », méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) décrivant sa définition et son principe. La méthode est choisit pour calculer les propriétés optiques basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger, selon la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT.

Après nous avons exposé brièvement le code *Wien2k* qui implémente cette méthode,

Chapitre III :

Résultats et discussions

1. Introduction :

Au cours de ce chapitre nous allons utiliser le code Wien2k pour étudier les semi-conducteurs GaN et le CdTe en déterminant leurs propriétés optiques.

Nous allons comparer les résultats obtenues des propriétés optiques pour les deux composés, à d'autres valeurs expérimentales et théoriques calculées par la même méthode ab-initio appelée la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées à potentiel total (FP-LAPW). Nous commençons par l'utilisation des approximations LDA et GGA et ensuite nous introduisons la correction « scissor » sur le gap afin d'améliorer les propriétés optiques.

2. Présentation des matériaux :

2.1. Propriétés cristallographiques :

Pour le composé CdTe :

Le tellure de cadmium (CdTe) est un composé semi-conducteur binaire de la famille II-VI. Il peut cristalliser dans deux structures différentes : soit dans la structure cubique (Zinc-blende), ou dans la structure hexagonale (Wurtzite). La structure cubique est cependant, la plus stable à la pression atmosphérique et à la température ambiante ($T = 300\text{K}$). Elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques faces centrées (cfc), l'un constitué d'atomes Cd, et l'autre d'atomes Te, décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale principale du cube.

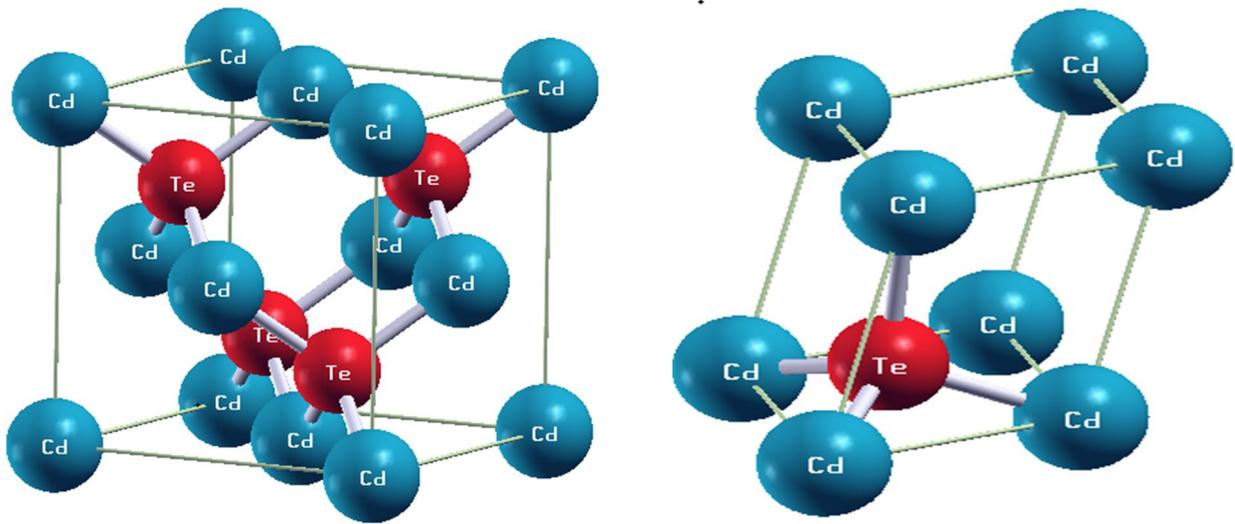


Figure III.1 : Représentation la structure cristalline Zinc-blende de CdTe

2.2. Propriétés électriques et thermiques :

Le tableau suivant présenté quelque propriété (électriques et thermiques) de ce matériaux CdTe

Propriétés électriques [1]		
Grandeur	Symbole (unité)	Valeur
Largeur du gap (à 2 K)	$E_g(\text{eV})$	1,606
Largeur du gap (à 300 K)	$E_g(\text{eV})$	$1,50 \pm 0.02$
Mobilité maximale des électrons à (300K)	$\mu_e(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1})$	1200
Mobilité maximale des trous à (300 K)	$\mu_t(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1})$	80
Masse effective des électrons	$m_{eff}^e(m_0)$	0,14
Masse effective des trous	$m_{eff}^t(m_0)$	0.35
Affinité électronique	χ (eV)	4.28
Ionicité	fi	0,72

Densité d' états dans la bande de conduction (à 300 K)	$N_c (cm^{-3})$	$7,46. 10^{14}$
Densité d' états dans la bande de valence (à 300 K)	$N_v (cm^{-3})$	$1,16. 10^{19}$
Vitesse thermique des électrons (à 300 K)	$V_e (cm. S^{-1})$	$3,7.10^7$
Vitesse thermique des trous (à 300 K)	$V_t (cm. S^{-1})$	$1,5.10^7$
Résistivité maximale pratique (à 300 K)	$\rho (\Omega.cm)$	10^9
Résistivité théorique (à 300 K)	$\rho_{th} (\Omega.cm)$	10^{11}
Propriétés thermiques		
Température de fusion	$T_f (°C)$	1092
Densité	$D (g.cm^{-3})$	5,85
Conductivité thermique	$\lambda (W.cm^{-1}. K^{-1})$	0,075
Chaleur spécifique (à 300K)	$C (cal.g^{-1}.K^{-1})$	0,44
Coefficient de dilatation thermique (à 300K)	K^{-1}	$4,96. 10^{-6}$

Tableaux III.1 : Les propriétés électriques et thermiques de composé CdTe

✚ **Pour le composé GaN :**

Le nitrure de gallium (GaN) appartient à la famille des semi-conducteurs III-V et plus précisément à celle des III-Nitrides (GaN, AlN, InN).

Ce composé présente de nombreuses caractéristiques d'un point de vue thermodynamique, optique et électrique. Ce matériau est utilisé dans plusieurs domaines comme l'optoélectronique tels que des émetteurs et des détecteurs de lumière couvrant une large gamme spectrale allant du visible au proche ultra-violet. En particulier, le bleu inaccessible aux autres semi-conducteurs est le domaine d'excellence du GaN.

Il existe principalement sous deux formes cristallographiques : la structure hexagonale Wurtzite et la structure cubique Zinc-blende.

Pour la structure Zinc-blende, les atomes d'azote forment alors un empilement cubique faces centrées dans lequel l'élément III occupe la moitié des sites tétraédriques. La structure est caractérisée par le paramètre de maille "a", $a=4,461 \text{ \AA}$ [2].

La configuration électronique des atomes :

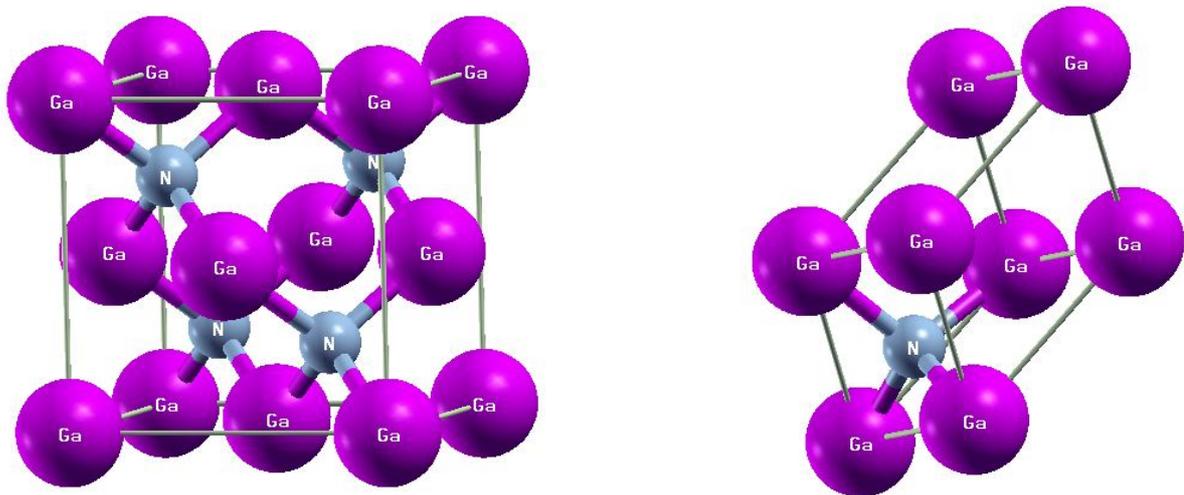
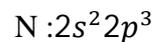
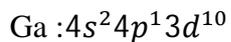


Figure III.2 : Représentation de la structure cristalline Zinc-blende de GaN

3. Détail de calcul :

Dans ce travail nous allons présenter les propriétés optiques du deux semi-conducteur CdTe et le GaN, à savoir l'absorption, la réflectivité... à l'aide des méthodes ab initio implémenté dans le code Wien2k. Son algorithme est basé sur la méthode de la DFT.

Nous avons utilisé des méthodes d'approximation telle que l'Approximation de la Densité Local (*LDA*), l'Approximation du Gradient Généralisé (*GGA*) avec ces variantes *GGA-PBE*.

Pour le composé CdTe :

Nous avons traité les états de valence (états 4d et 5s Les états de Cd et les états 5s et 5p de Te) de manière cohérente dans l'approximation semi-relativiste (l'interaction spin-orbite est négligée). Les calculs sont performés par le paramètre de convergence $R_{MT}K_{max}=8$. (où K_{max} est le module maximal pour le vecteur de réseau réciproque, et R_{MT} le rayon le plus petit de tous les rayons de la sphère atomique) qui correspond à l'énergie de stabilité.

D'autres valeurs de paramètres sont :

- $l_{max}=8$ (le maximum des ondes planes utilisées).
- $R_{MT}(Cd)=2,35$ a.u, $R_{MT}(Te)=2,55$ a.u

Selon le schéma de $14 \times 14 \times 14$, 104 k-points ont été utilisés dans la zone irréductible de Brillouin (équivalent aux 3000 points dans toute la zone de Brillouin).

Le processus d'itération a été répété jusqu'à ce que l'énergie totale calculée du cristal converge vers moins de 10^{-4} Ry.

Pour le composé GaN :

Les calculs ont été effectués pour la structure zinc-blende du composé GaN, Les valeurs de paramètre :

- $R_{MT}k_{max}=7$
- $l_{max}=10$
- $R_{MT}(Ga)=1,95$ a.u, $R_{MT}(N)=1,68$ a.u
- $G_{max}=9$
- Le nombre de point k considéré dans la zone de Brillouin : nous avons choisi $k=100$
Selon le schéma de $4 \times 4 \times 4$.

4. Propriétés optiques :

La DFT permet de calculer toutes les propriétés optiques, à savoir l'indice de réfraction, le coefficient d'extinction, le coefficient d'absorption, qui se déduisent de la fonction diélectrique complexe $\epsilon(\omega)$.

4.1. Fonction diélectrique :

La fonction diélectrique complexe $\epsilon(\omega)$ représente la réponse linéaire d'un système à cause d'un champ électromagnétique externe avec un petit vecteur d'onde.

Nous avons commencé notre calcul à partir de l'expression générale du tenseur diélectrique complexe. Ainsi, nous avons calculé la partie imaginaire $\epsilon''(\omega)$ de la fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$ qui définit toutes les transitions des états occupés aux inoccupés donnée par l'équation suivante :

$$\epsilon''(\omega)_{\alpha\beta} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{i,f} \int \langle f | p_\alpha | i \rangle \langle i | p_\beta | f \rangle W_i (1 - W_f) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d^3k \quad (\text{III.1})$$

Où :

- e et m sont la charge et la masse de l'électron, respectivement
- ω est la fréquence du Photon
- $\langle f | p_\alpha | i \rangle$ et $\langle i | p_\beta | f \rangle$ sont les éléments de matrice dipolaire correspondant aux directions α et β du cristal (x , y et z) et f et i , sont les états final et initial, respectivement
- W_i et E_n sont la fonction de distribution de Fermi et l'énergie des électrons Pour le n^{th} état, respectivement.

La partie réelle $\epsilon'(\omega)$ de la fonction diélectrique est calculée à partir de $\epsilon''(\omega)$ en utilisant la relation Kramers-Kronig, elle est exprimée sous la forme suivante:

$$\epsilon'(\omega)_{\alpha\alpha} = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon''(\omega')_{\alpha\alpha}}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{III.2})$$

Lorsque P signifie la valeur principale de l'intégrale.

✚ Pour le composé CdTe :

Nous présentons par les figures (III.3), (III.4) les courbes de la partie réelle $\varepsilon'(\omega)$ et la partie imaginaire $\varepsilon''(\omega)$ de la fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ en fonction de l'énergie de photon de composé CdTe, nous rappelons que les deux grandeurs sont reliées par la relation de Kramers-Kronig, nous les avons calculées en utilisant l'approximation LDA.

Nous remarquons que :

- dans la figure (III.3), la fonction $\varepsilon'(\omega)$ s'annule à la valeur d'énergie suivante 4,589 eV.
- dans la figure(III.4), il existe 3 pics notés E_0 , E_1 et E_2 correspondent aux transitions inter-bandes.

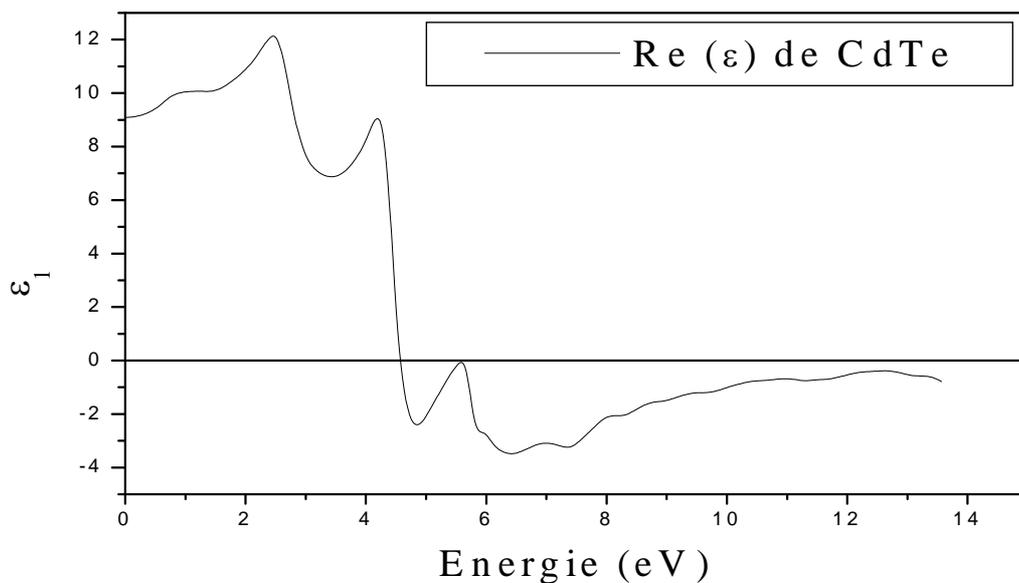


Figure III.3 : La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\varepsilon'(\omega)$ en fonction de l'énergie du photon du composé CdTe

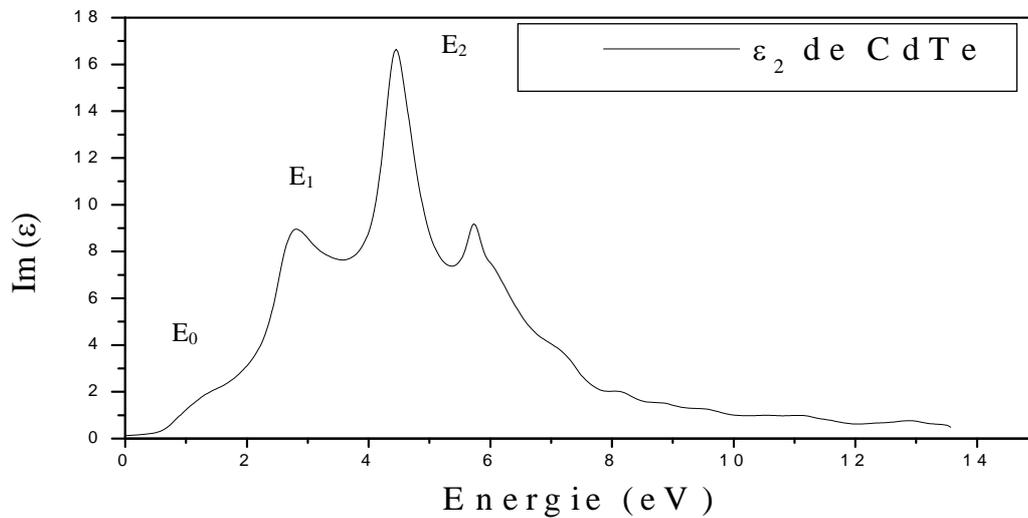


Figure III.4 : La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\epsilon''(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon

Les positions des trois pics de la partie imaginaire de la fonction diélectrique calculée dans notre travail sont résumées dans le tableau III.2

	<u><i>Notre travail</i></u>	<u><i>Autres calculs</i></u>		
E₀	0,67	0,566 [7]	0,583 [8]	0,65 [9]
E₁	2,80	2,7 [6]		
E₂	4,44	4,2 [6]		

Tableau III.2 : Les énergies de transitions inter-bande E₀,E₁et E₂ pour le CdTe

Nous regroupons les valeurs statiques de la fonction diélectrique $\epsilon_0(\omega = 0)$ et les valeurs de la fonction à hauts énergie ϵ_∞ dans le tableau III.3. La valeur ϵ_∞ est négative car elle n'est pas encore stabilisée à haute énergie. Il faudra donc la détecter à des énergies encore plus élevées.

	<u>Notre travail</u>	<u>Autres calculs</u>	<u>Expérience</u>
ϵ_0	9,09	9,02 [6] 10,2(300K) [11] 10,4(300K) [12]	7,2 [10]
ϵ_∞	-0,62	7,1(300K) [12]	-

Tableau III.3 : Les valeurs des $\epsilon_0, \epsilon_\infty$ du CdTe

✚ Pour le composé GaN :

Les figures (III.5), (III.6) montrés la partie réelle la fonction diélectrique $\epsilon'(\omega)$ et la partie imaginaire $\epsilon''(\omega)$ respectivement, en utilisant l'approximation GGA.

Nous remarquons que la fonction $\epsilon'(\omega)$ s'annule aux valeurs d'énergies 6,482 eV.

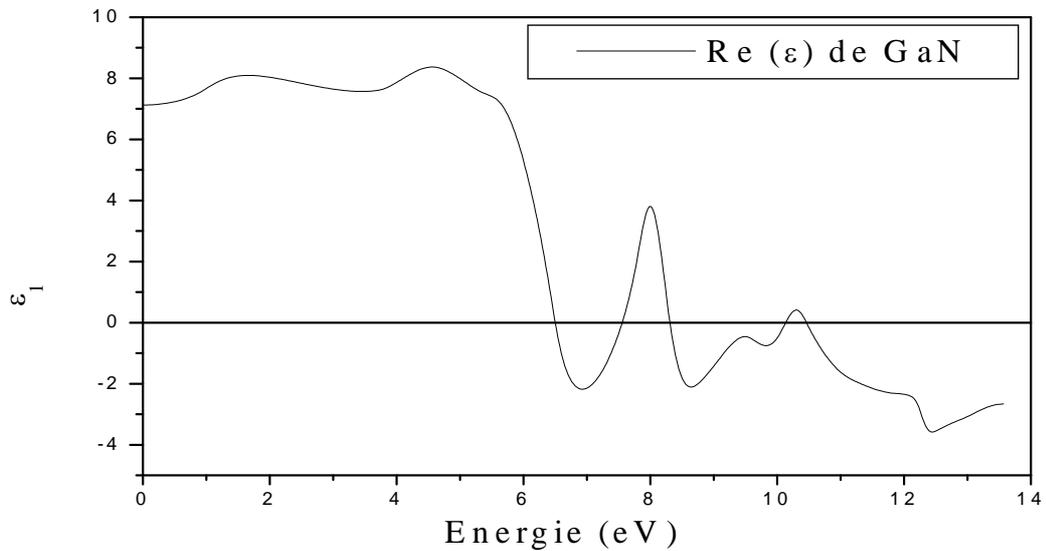


Figure III.5 : La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\epsilon'(\omega)$ en fonction de l'énergie du photon du composé GaN.

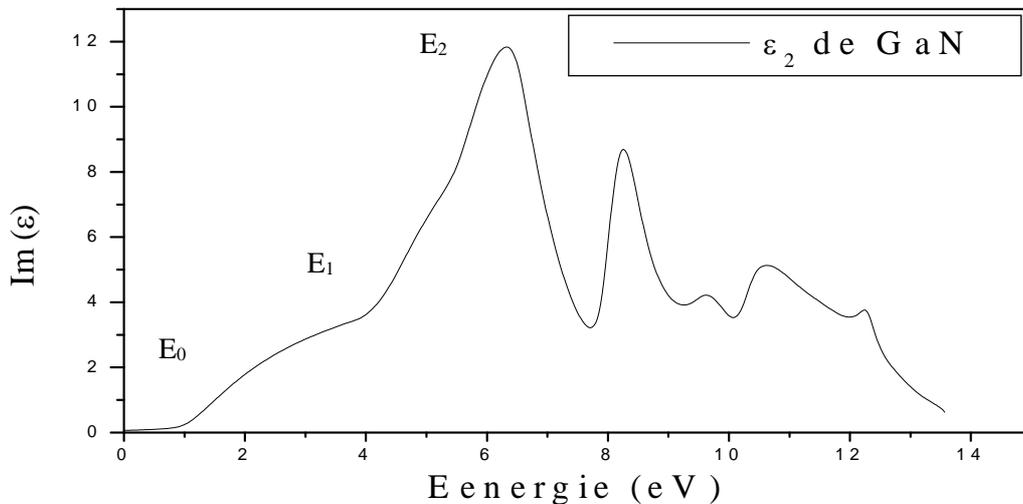


Figure III.6 : La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\epsilon''(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon

Les énergies de transitions inter-bande E_0 , E_1 et E_2 sont données dans le tableau III.4, et les valeurs de ϵ_0 , ϵ_∞ données dans le tableau III.5. De même que le CdTe, la valeur de ϵ_∞ doit être détectée à haute énergie plus que celle délimitée dans la figure III-5. En effet, la figure montre que la fonction diélectrique n'est pas stable jusqu'au 14 eV.

	<i><u>Notre travail</u></i>
E_0	0,94
E_1	3,93
E_2	6,34

Tableau III.4 : Les énergies de transitions inter-bande E_0, E_1 et E_2 pour le GaN

	<i><u>Notre travail</u></i>
ϵ_0	7,12
ϵ_∞	-2,69

Tableau III.5 : Les valeurs des $\epsilon_0, \epsilon_\infty$ du GaN

La connaissance des deux parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique permet de calculer d'autres propriétés optiques comme les suivantes :

4.2. L'indice de réfraction et le coefficient d'extinction :

L'indice de réfraction complexe peut être écrit sous la forme suivante :

$$\tilde{n} = n(\omega) - ik(\omega) \quad (\text{III.3})$$

Avec :

$$n(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_1}}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{III.4})$$

Et $k(\omega)$ le coefficient d'extinction :

$$k(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 - \varepsilon_1}}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{III.5})$$

Pour le composé CdTe :

L'indice de réfraction $n(\omega)$ et le coefficient d'extinction $k(\omega)$ sont présentés sur les figures (III.7) et (III.8).

La courbe de variation de l'indice de réfraction dans la gamme d'énergie [0-14] eV présentent un maximum à l'énergie 2,531 eV.

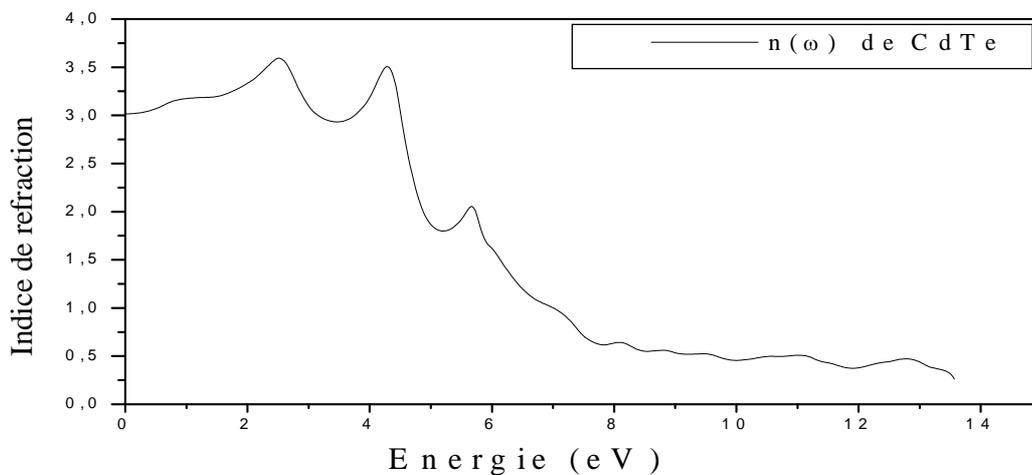


Figure III.7 : La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon

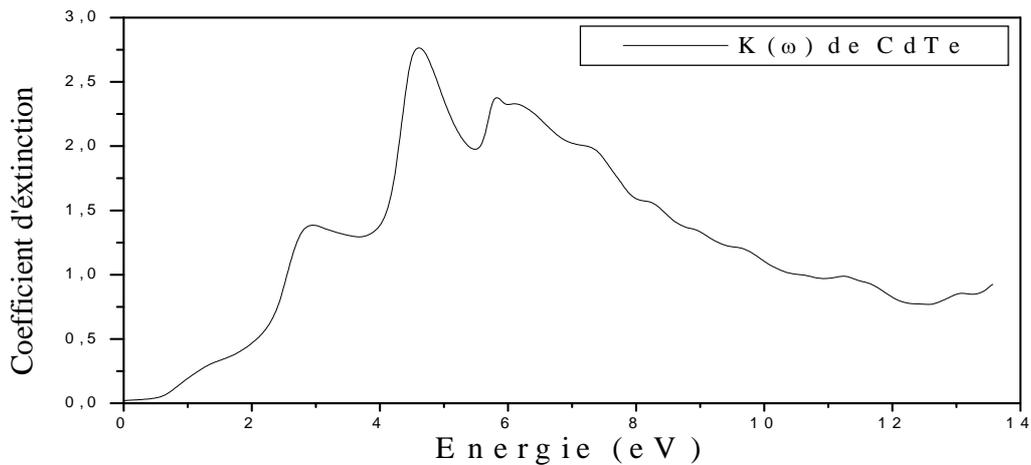


Figure III.8 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon

Concernant le coefficient d'extinction k , nous remarquons que la valeur maximale du coefficient d'extinction k_{\max} correspond à l'énergie 4,601 eV.

Pour le composé GaN :

Les figures (III.9) et (III.10) montrent la variation de l'indice de réfraction de coefficient d'extinction respectivement en fonction de l'énergie du photon de composé GaN.

Les courbes de variation de l'indice de réfraction dans la gamme d'énergie [0-14] eV

Nous remarquons que :

- L'indice de réfraction à l'énergie 5,692 eV présente un maximum.
- La valeur maximale du coefficient d'extinction k_{\max} correspond à l'énergie 6,604 eV.

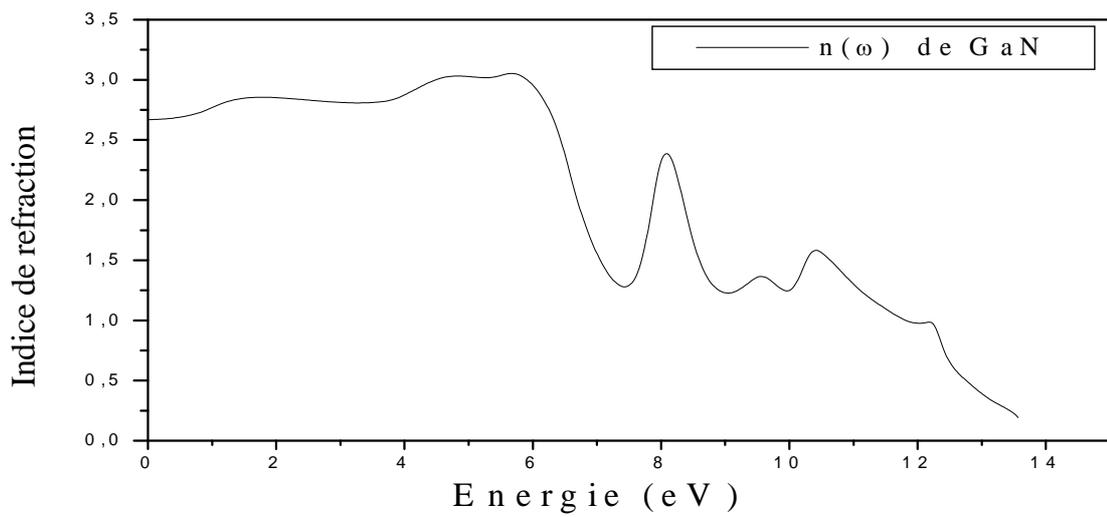


Figure III.9 : La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon

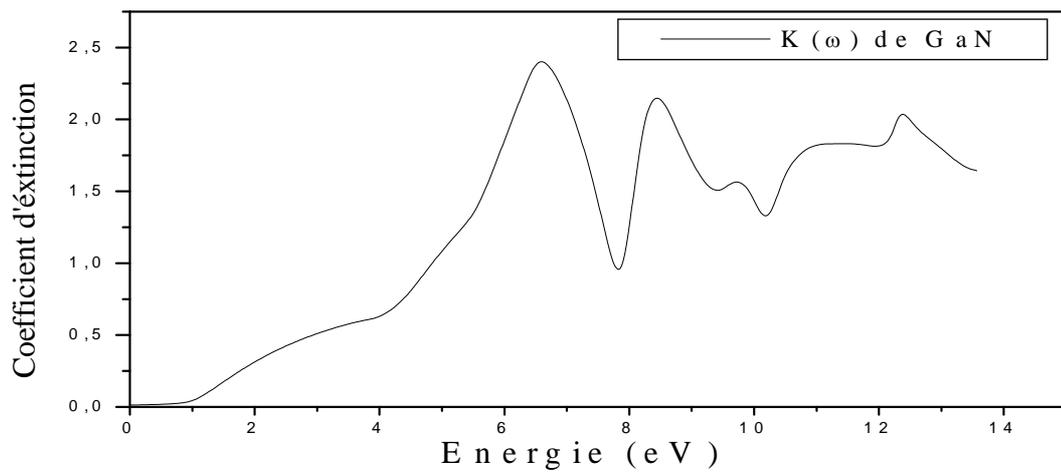


Figure III.10 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon

Le tableau III.6 montre les valeurs statiques de l'indice de réfraction des deux composés CdTe, GaN

		<u><i>Notre travail</i></u>
CdTe	n(0)	3,00
GaN		2,68

Tableau III.6 : La valeur statique d'indice de réfraction de deux composés

4.3. Le coefficient d'absorption et la réflectivité :

Le coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ peut être écrit sous la forme suivante :

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi\omega}{c} \sqrt{\frac{-\varepsilon_1 + |\varepsilon|}{2}} \quad (\text{III.6})$$

Et la réflectivité $R(\omega)$ s'écrit sous la forme :

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{III.7})$$

Pour le composé CdTe :

La figure (III.11) montré le coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ en fonction de l'énergie des photons incidents Pour le composé CdTe.

Nous remarquons que le maximum d'absorption $\alpha(\omega)$ est situé dans l'intervalle d'énergie 6-8 eV (figure III.11).

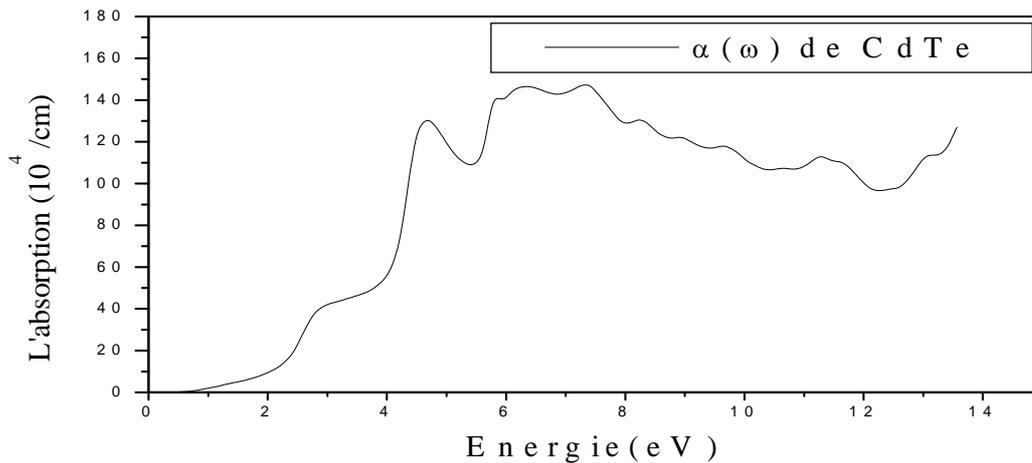


Figure III.11 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon

La figure (III.12) montre la réflectivité $R(\omega)$ en fonction de l'énergie des photons incidents Pour le composé CdTe.

Pour le CdTe : $R(\omega)$ indique un maximum de 56,90% à haute énergie (7,566 eV).

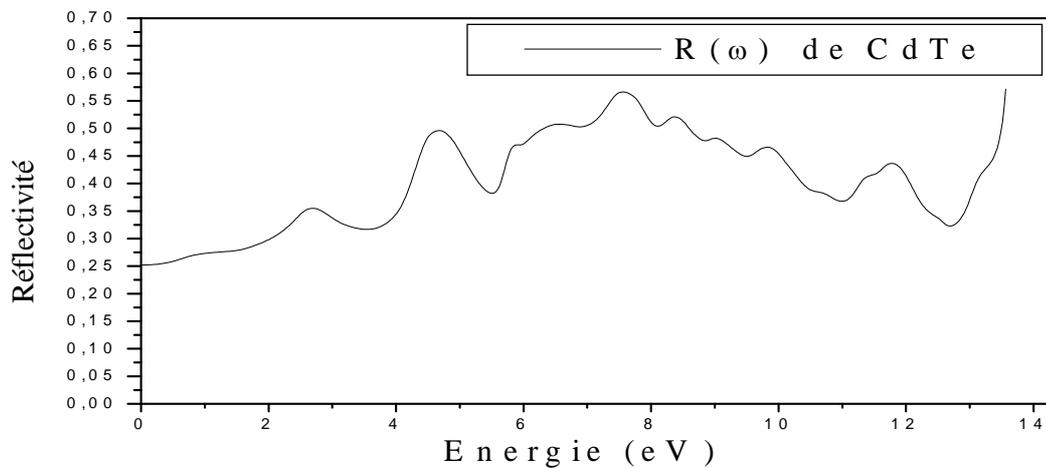


Figure III.12 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé CdTe en fonction de l'énergie du photon

✚ Pour le composé GaN :

Les figures (III.13) et (III.14) montrent la variation de coefficient d'absorption et la réflectivité respectivement en fonction de l'énergie du photon de composé GaN.

- Le pic principal qui reflète le maximum d'absorption, il situé 6,337 eV.
- $R(\omega)$ indique un maximum de 45,12% à haute énergie 6,731 eV.

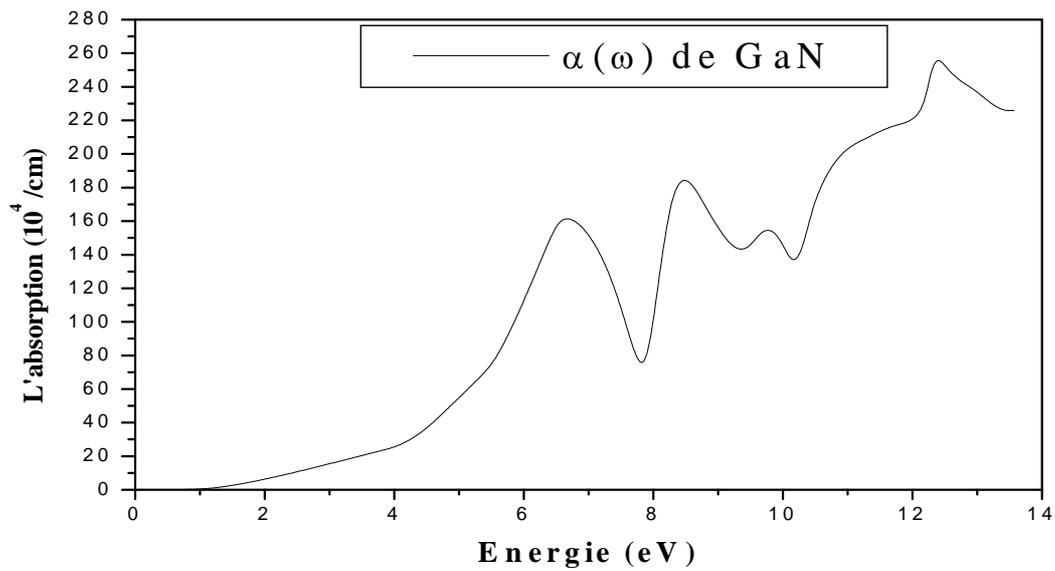


Figure III.13 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon

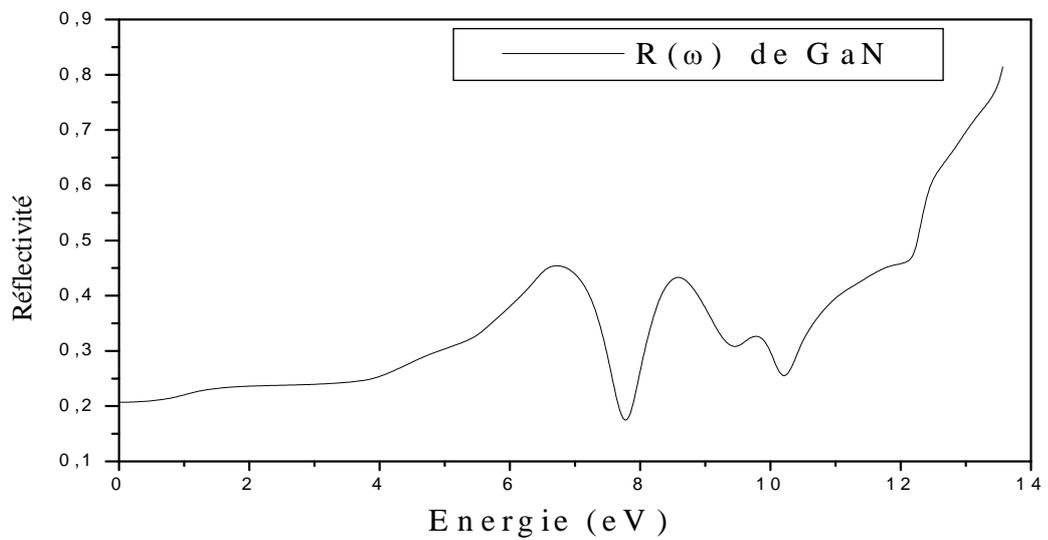


Figure III.14 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé GaN en fonction de l'énergie du photon

5. L'opérateur Scissor :

L'approximation de la densité locale (LDA) de théorie fonctionnelle de la densité (DFT) est une méthode très efficace pour le calcul des propriétés électroniques, optique et structurales de solides.

Toutefois, les procédures de calculs basés sur LDA sous-estiment systématiquement les énergies de gap. Ce problème est connue comme étant lié intrinsèquement à la DFT elle-même. Il a également été démontré que la bande interdite d'un isolant peut être décrite en fonction de l'écart de la LDA avec une « correction de self-énergie », d'où la nécessité de méthodes simples d'estimer une telle correction, sans passer par la complexité des calculs de plusieurs corps au-delà de LDA [2].

En outre, il est généralement admis que la correction de la self-énergie $\delta\Sigma$ peut-être grossièrement approchée comme un glissement rigide des bandes de conduction par rapport à des bandes de valence. Telle que $\delta\Sigma = \Delta + \delta_{EK}$.

les corrections non constantes s'élèvent à petites fractions de Δ (dans les semi-conducteurs, Δ est d'ordre 1 eV, alors que $\delta_{EK} \simeq 0.1$ eV), la constante Δ est censée donner une estimation semi-quantitative de la correction dans la région près de gap [3].

Nous avons calculé les différentes propriétés optiques à l'aide de l'opérateur scissor. Avant de présenter nos résultats, nous décrivons brièvement cet opérateur utilisé pour corriger les propriétés optiques en se déplaçant vers le haut l'énergie et par conséquent de bien reproduire les états excités.

6. Description de la correction « Scissor » :

Afin de corriger la sous-estimation bien connue de l'énergie du gap dans la DFT [4], la correction à l'aide de l'opérateur scissor est généralement utilisée, pratiquement dans la détermination des décalages des énergies de gap et aussi lorsque des transitions optiques sont étudiées. Il est défini comme une modification de l'hamiltonien Kohn-Sham-LDA/GGA qui comprend un terme qui fait déplacer de façon rigide la bande de conduction vers les énergies supérieures. Le terme de scissor \hat{S} est donné par [5] :

$$\hat{S} = \hbar \bar{\omega} \sum_n \int d^3 k (1 - f_n) |nK\rangle \langle nK| \quad (\text{III.7})$$

Où

- $\hbar \bar{\omega}$: l'énergie de correction à appliquer
- f_n :Facteur d'occupation indépendant de K, égal à 1 pour les états occupés et 0 pour les états inoccupés.
- $|nK\rangle$: est le ket de la représentation en coordonnées $\Psi_{nk} = \langle r|nk\rangle$

L'hamiltonien de scissor est alors :

$$\mathcal{H}^S(r, \frac{\hbar}{i} \nabla) = \mathcal{H}^{GGA}(r, \frac{\hbar}{i} \nabla) + S(r, \frac{\hbar}{i} \nabla) \quad (\text{III.8})$$

Les états propres $\mathcal{H}^S(r, \frac{\hbar}{i} \nabla)$ et $\mathcal{H}^{GGA}(r, \frac{\hbar}{i} \nabla)$ identiques, mais les valeurs propres sont différentes, de sorte que :

$$\mathcal{H}^{GGA}(r, \frac{\hbar}{i} \nabla) \psi_{nk}(r) = \hbar \omega_{nk}^{GGA} \psi_{nk}(r) \quad (\text{III.9})$$

Et :

$$\mathcal{H}^S(r, \frac{\hbar}{i} \nabla) \psi_{nk}(r) = \hbar \omega_{nk}^S \psi_{nk}(r) \quad (\text{III.10})$$

Avec :

$$\omega_{nk}^S = \omega_{nk}^{GGA} + (1 - f_n) \bar{\omega} \quad (\text{III.11})$$

7. Propriétés optiques

7.1. Fonction diélectrique :

Pour le composé CdTe :

La partie réelle $\epsilon'(\omega)$ et la partie imaginaire $\epsilon''(\omega)$ de la fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$ calculées sont représentées dans les figure (III.15) et (III.16) pour le semi-conducteur CdTe. Nous les avons calculées en utilisant l'approximation LDA (courbes noir) et nous avons utilisé l'opérateur « scissor » pour recalculer les dispersions $\epsilon'(\omega)$ et $\epsilon''(\omega)$ (courbes en rouge).

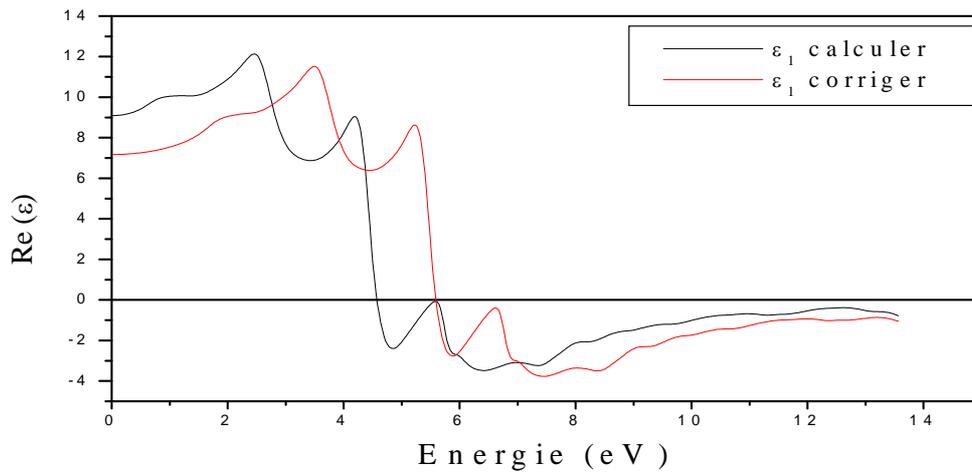


Figure III.15 : La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\epsilon'(\omega)$ calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon du composé CdTe

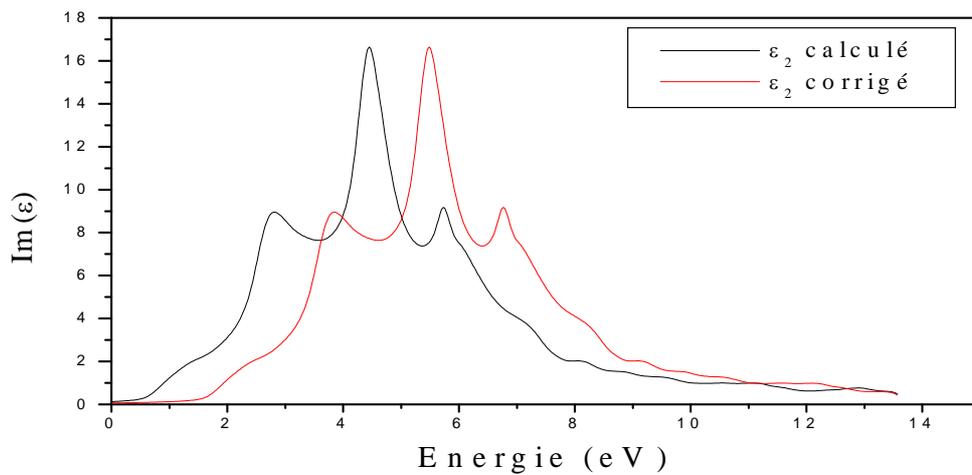


Figure III.16 : La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\epsilon''(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

✚ Pour le composé GaN :

Pour le composé GaN, les parties : réelle et imaginaire de la fonction diélectrique sont montrées dans les figures (III.17) et (III.18) respectivement.

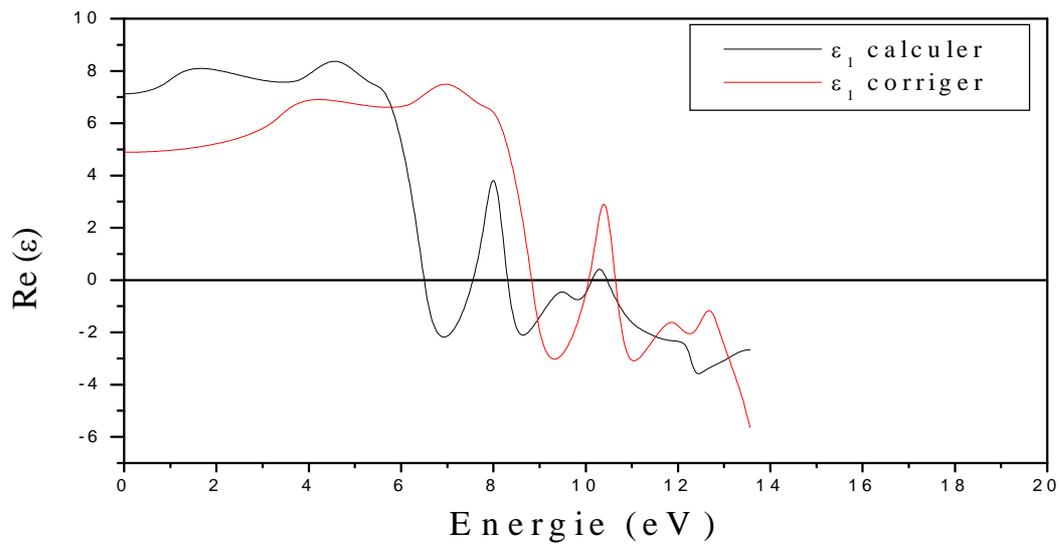


Figure III.17: La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique $\epsilon'(\omega)$ calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon du composé GaN

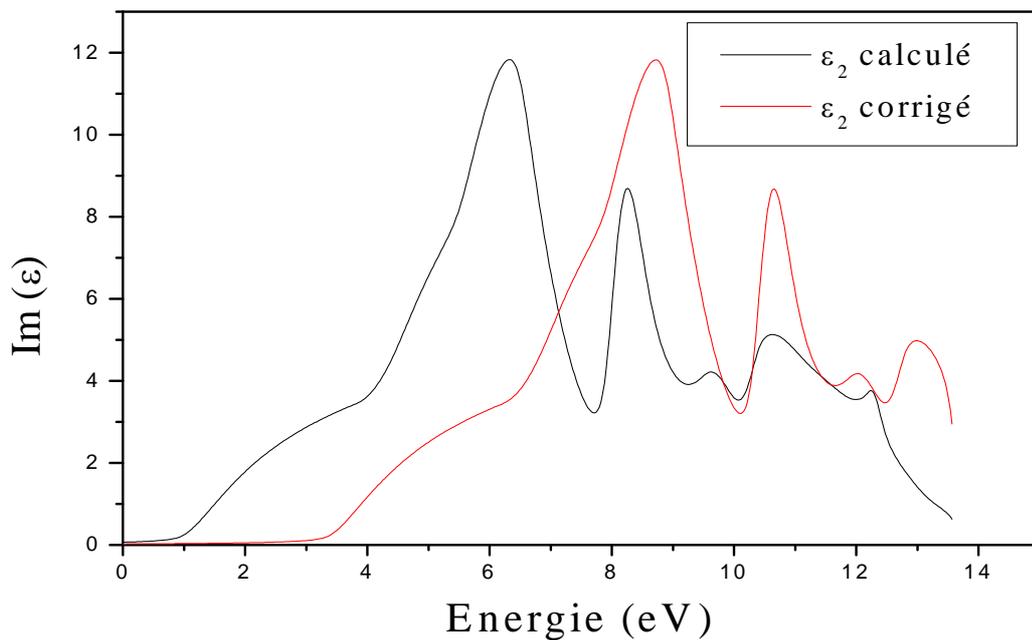


Figure III.18 : La variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique $\epsilon''(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

7.2. L'indice de réfraction et le coefficient d'extinction :

Pour le composé CdTe

Les figure (III.19) et (III.20) illustres les dispersions des indices de réfraction et des coefficients d'extinction de semi-conducteur CdTe calculé et corrigée par correction « scissor ».

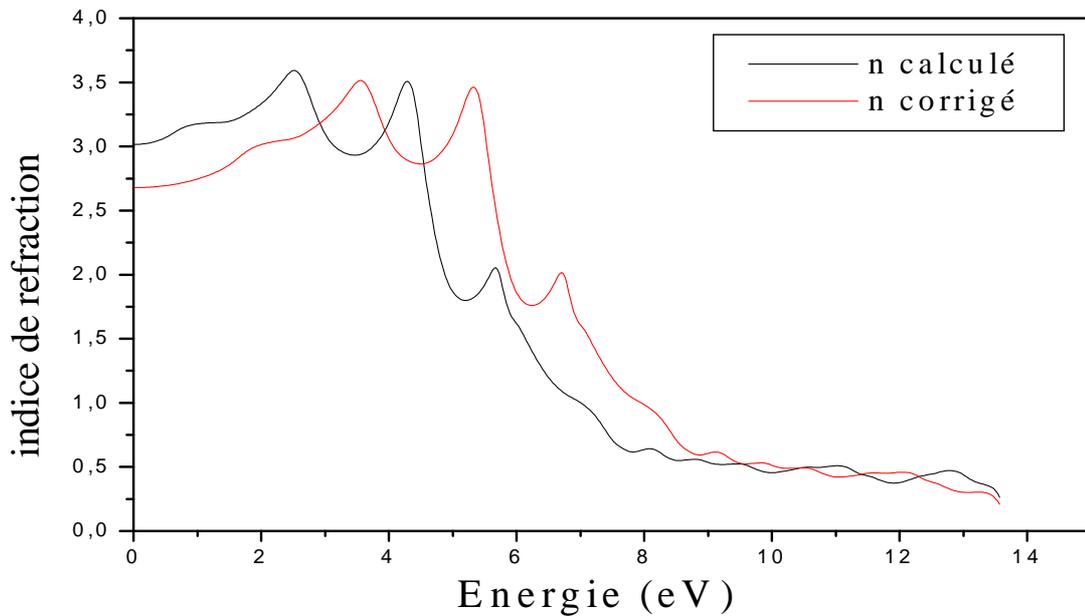


Figure III.19: La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

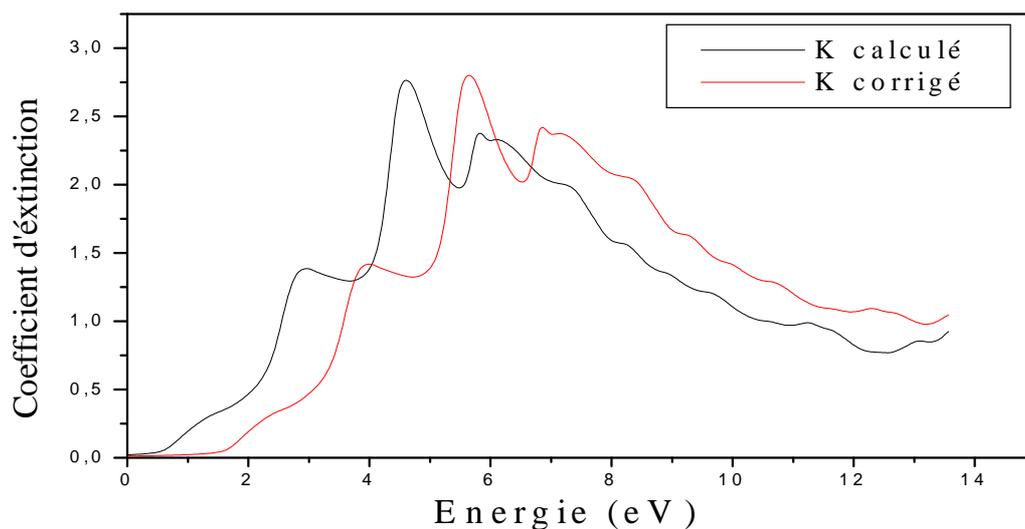


Figure III.20 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

✚ Pour le composé GaN :

Les figure (III.21) et (III.22) illustres les dispersions des indices de réfraction et des coefficients d'extinction de composé GaN calculé et corrigée par correction « scissor ».

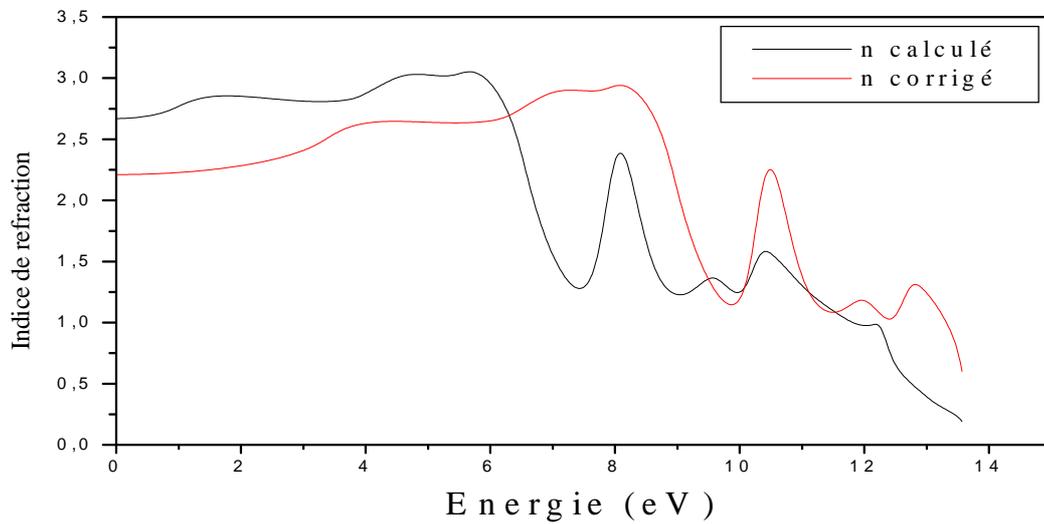


Figure III.21 : La variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

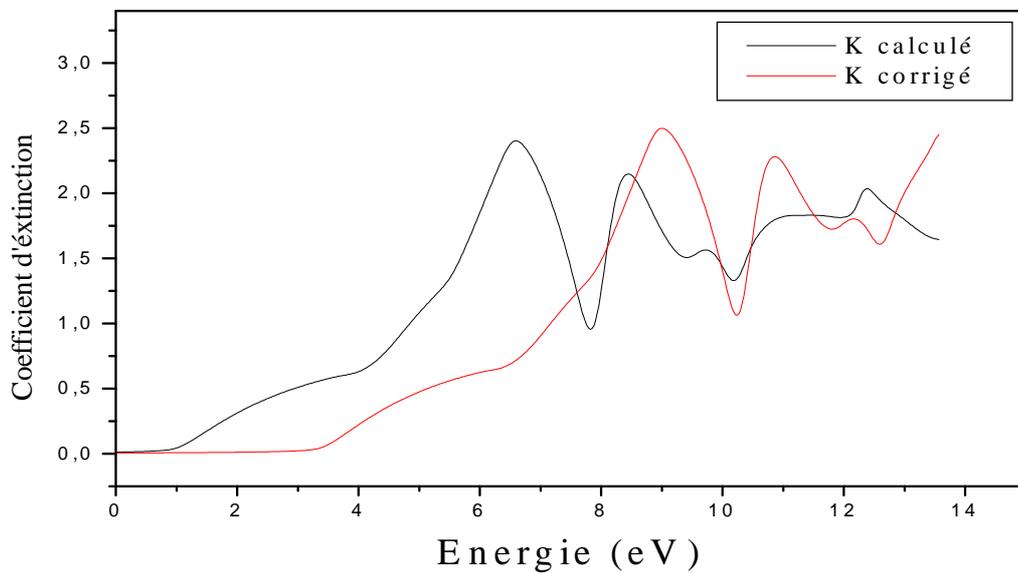


Figure III.22 : La variation de coefficient d'extinction $k(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

7.3. Le coefficient d'absorption et la réflectivité :

Pour le composé CdTe :

Les figures (III.23) et (III.24) montrent la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons et la réflectivité respectivement. Les courbes correspondent aux résultats obtenus par l'approximation LDA et la correction à base du « scissor »

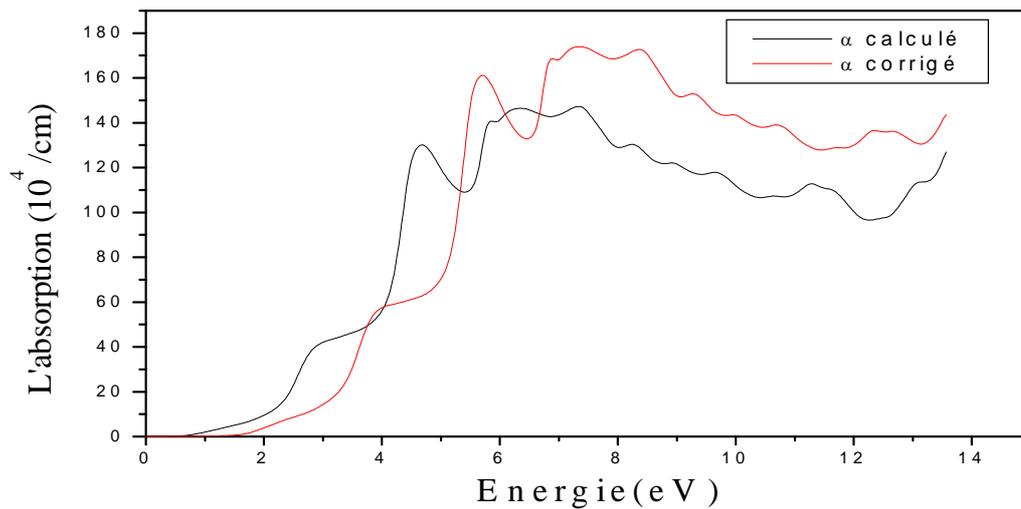


Figure III.23 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

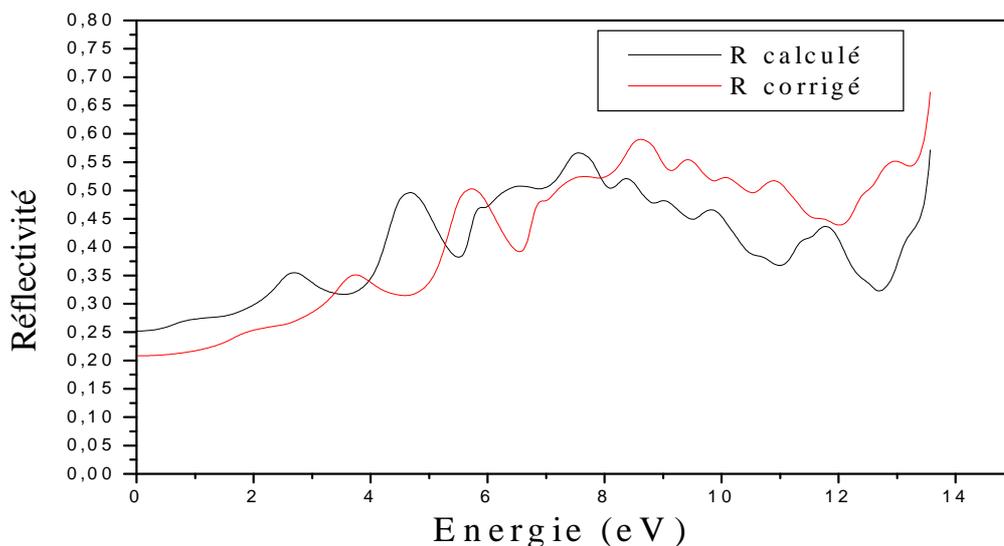


Figure III.24 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé CdTe calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

✚ **Pour le composé GaN :**

Dans la figure (III.25) et figure (III.26) , nous présentons les courbes la variation du coefficient d'absorption et de la réflectivité de composé GaN respectivement en fonction de l'énergie de photons $h\nu$, que nous avons obtenues par les approximations GGA (sans correction) et par l'approximation« Scissor ».

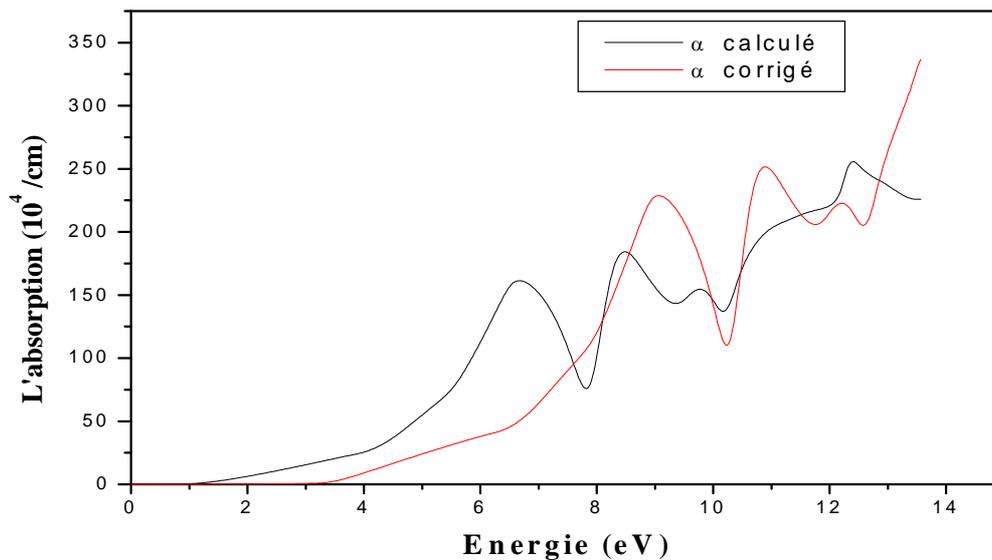


Figure III.25 : La variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

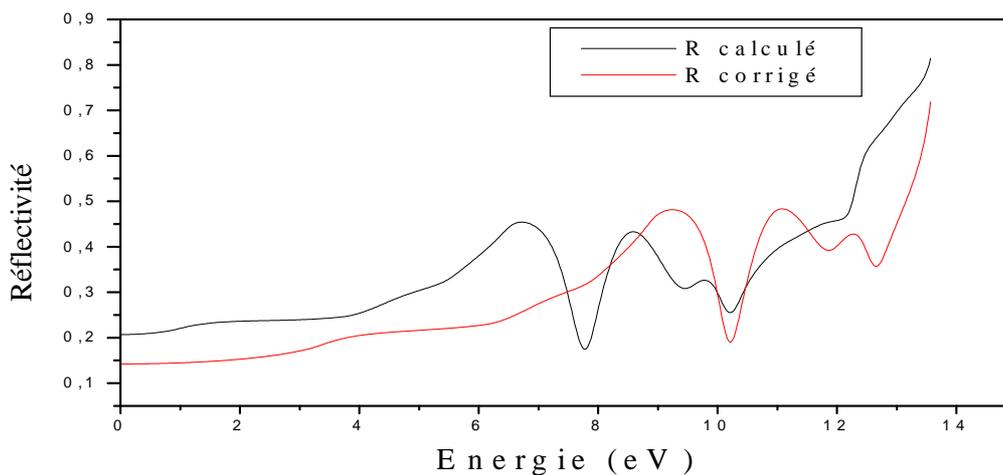


Figure III.26 : La variation de la réflectivité $R(\omega)$ de composé GaN calculé et de correction scissor en fonction de l'énergie du photon

Le tableau III.7 regroupe les valeurs des transitions électroniques inter-bande ainsi que les constantes optiques après la correction scissor de deux composés CdTe et GaN.

	E_0	E_1	E_2	ϵ_0	ϵ_∞	$n(0)$	$\Delta E\%$
CdTe	1,66 1,606[13]	3,85	5,50	7,19	-0,90	2,67	14 %
GaN	3,40	6,19	8,72	4,90	-4,56	2,21	25 %

Tableau III.7 : les valeurs des énergies inter-bandes et les constantes optiques après la correction « scissor » pour CdTe et GaN.

8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté des calculs FP-LAPW des propriétés optiques des deux composés CdTe et le GaN. Il s'agissait de la fonction diélectrique complexe, l'indice de réfraction, le coefficient d'extinction, le coefficient d'absorption et la réflectivité. En premier lieu, nous avons présentés nos calculs basés sur les deux approximations LDA, GGA. Vu que ces deux approximations sous-estiment l'énergie de gap des semi-conducteurs, les propriétés optiques seront sous-évaluées sous ces approximations. A cet effet, nous avons opté en deuxième lieu à corriger les propriétés optiques en se basant sur l'opérateur « scissor ». Par conséquent, nous avons montré nos calculs des propriétés optiques en question avec des améliorations remarquables.

Conclusion Générale

Conclusion générale :

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude ab initio dite méthode des ondes planes augmentées et linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), pour étudier les propriétés optiques des deux composés CdTe et GaN.

Actuellement dans le contexte de la DFT, l'Approximation de la Densité Local (LDA), introduite par *Perdew-Wang* en 1992 est devenue la principale méthode de calcul des propriétés physiques de plusieurs semi-conducteurs. C'est une approximation valide seulement pour les systèmes d'électrons localement homogènes et généralement pour les cristaux réels. Nous l'avons utilisé pour le composé CdTe.

Ensuite, nous avons utilisé un autre approximation appelée l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA) avec cette variante : (GGA-PBE) introduite par *Perdew-Burke-Ernzerhof* en 1996, pour le composé GaN.

Nos calculs ont été consacrés à l'étude des propriétés optiques. Nous avons calculé la fonction diélectrique complexe dont ses parties réelle et imaginaire sont reliées par les relations de Kramers-Kroning.

A partir de la détermination de la fonction diélectrique, nous avons déduit les autres grandeurs optiques à savoir : le coefficient d'absorption, l'indice de réfraction, le coefficient d'extinction . . . etc.) Pour les deux composés CdTe et GaN.

L'utilisation de correction « scissor » nous a permis d'avoir une bonne amélioration sur les propriétés optiques en introduisant une correction sur l'énergie du gap de telle sorte qu'elle soit proche de la valeur expérimentale. Par conséquent, nous avons proposé et montré des corrections sur les grandeurs optiques, à savoir, les constantes diélectriques, le spectre d'absorption, la réflectivité, l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction.

Cette étude peut être étendue à d'autres composés dont les propriétés optiques sont importantes pour des applications comme le photovoltaïque et bien d'autres...

Références Bibliographiques

Références bibliographiques :

Introduction générale :

[1]:L. Pearce Williams. Experimental Researches in Electricity. Vols. 1 to 3. Michael Faraday. Dover, New York, 1965. vols. 1, 2 and 3. Science, 150(3696):598–599, 1965.

Chapitre I :

[1] : A Chovet, P Masson. « Physique des semi-conducteurs » .Cours de l'école polytechnique universitaire de Marseille. 2004.

[2]:O Bonnaud . « Physique des Solides, des Semi-conducteurs et Dispositifs ». Université de Rennes.2003.1.

[3]: B GYacobi.«Semiconductor materials an introduction to basic principles ». Springer Science & Business Media. 2003.

[4] : J L Polleux , C Rumelhard. « Modélisation physique et coefficient d'absorption optique de photodétecteursSiGe pour les applications opto-microondes ». Douzièmes Journées Nationales Microondes, JNM, Poitiers, France, 2001.

[5] :N M Ridene. « Effet de la concentration des nanoparticules sur la fluorescence et l'électroluminescence de nanocomposites organiques-inorganiques : aspects expérimentaux et modélisation ».2016.

[6] :W Mohamed kara . « Les Structures de bandes électroniques et les propriétés relatives aux semi-conducteurs quasi binaires (GaP) 1-x (ZnSe) x ».Thèse de doctorat, Université Mohamed Khider-Biskra.2012.

[7] : B N Brahmi. « Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc ». Thèse de doctorat Université Abou Bakr Belkaïd –Tlemcen. 2013.

[8] :<http://www.pavillon-orange.org/blog/?p=4850>

[9] : https://www.rp-photonics.com/laser_applications.html

[10] :C Louala . « La diode laser bleue à base de GaN », Ingénieur d'études CNRS, 2002.

[11] :<http://www.connaissancedesenergies.org/fiche-pedagogique/solaire-photovoltaïque>

[12] : <https://fr.solar-energia.net/energie-solaire-photovoltaique/types-cellules-photovoltaiques>

[13] : C Roger. « Développement de cellules photovoltaïques à base de CIGS sur substrats métalliques. ». Université Grenoble Alpes, 2013.

[14] : I Michel . « Recherche & Industrie Photovoltaïque (PV) aux Etats-Unis » . Juin 2006.

[15]: K Dohyoung. « Studies of sputtered CdTe and CdSe solar cells». 2012.

[16] :H Atrari, S Bayraktar ,I Belhamiti. « Avancées scientifiques et réalisations techniques»

[17] :Gaussorgues, Gilbert, et al. « Détecteurs infrarouges." Techniques de l'ingénieur. Electronique » 6.E4060 (1996): E4060-1.

[18]: R Antoni. « Infrared detectors: status and trends. Progress in quantum electronics ».2003.27

[19] :S Mouzali. «Modélisation spectrale de détecteurs matriciels infrarouge HgCdTe : application à un micro-spectromètre. Optique ».Université Paris-Saclay.2015. Français

[20] :G Destefanis.« Les nouvelles générations de détecteurs infrarouge à base de HgCdTe ». Comptes Rendus Physique, (2003),4(10), 1109-1120.

[21]: R Antony. « HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook. Reports on Progress in Physics», 2005. 68.

Chapitre II :

[1] : S Lardjane. « Étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du semi-conducteur magnétique dilué: ZnO dopé au cobalt »Thèse de doctorat, Université de Technologie de Belfort-Montbéliard; Université Abou Bekr Belkaid de Tlemcen.2013.

[2]: W. Kohn, Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 12531266

[3]: R. G. Parr, W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, Oxford, 1989

[4]: P. Hohenberg, W. Kohn, Inhomogeneous electron gas, Phys. Rev. 136 (1964), B864- B871

[5]: W. Kohn L.J. Sham, Phys. Rev. 140, B1133 (1965).

[6]: V. Sahni, Physical interpretation of electron correlation in the local-density approximation. , New York

[7]: E. Wigner, Phys. Rev. 46, 1001 (1934).

[8]: D. M. Ceperly and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45, 566 (1980).

[9]: J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981).

- [10]: L. Hedin and B. Lundqvist, J. Phys. C 4, 2064 (1971).
- [11]: J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992).
- [12]: W. Kohn Reviews of Modern Physics, Vol. 71, No. 5, p 1253 (1999)
- [13] : J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson; C.Fiolhais,Phys. Rev. B46, 6671 (1992).
- [14]: J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
- [15]: J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 33, 8800 (1986).
- [16]: J. P. Perdew in .Electronic Structure of Solids., AcademieVerlag, Berlin,11(1991).
- [17]:Étude de deux méthodes de premier principe appliquées aux Heuslers
- [18]:K. Endo, K. Yamamoto, and K. Deguchi, J. Phys. Chem. Solids 54, 15 (1993).
- [19]:A. Y. Liu, R. M. Wentzcovitch, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 39, 1760 (1989).
- [20]: R. Wentzcovitch, K.J. Chang and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 34, 107 1 (1 986).
- [21]: R. Wentzcovitch, M. L. Cohen, and Pui K. Lam, Phys. Rev. B 36,6058 (1987)
- [22]: J.C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).]
- [23]:Adrain P. Sutton, electronic Structure of Materials, Clarendon Press. Oxford (1992).
- [24]: J.S Slater Wave function in a periodic potential, phy.Rev.51:846-851. (1937).
- [25]: Adrain P. Sutton, electronic Structure of Materials, Clarendon Press. Oxford (1992).]
- [26]: D.D. Koelling and G.O. Arbman, J. Phys. F 5, 2041 (1975).
- [27]:O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [28]:H. C. Hwang, and J. Henkel, Phys. Rev. B 17, 4100 (1978)
- [29]: O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [30]: D. D. Koelling et G. O. Arbman, "Use of Energy Derivative of the Radial Solution in an Augmented Plane Wave Method: Application to Copper", J.Phys. F (Metal Phys.) 5: 2041, 1975.
- [31]:T. Takeda, J. Phys. F 9, 815 (1979).
- [32]:L. Smrcka, Czech. J. Phys. B 34, 694 (1984).
- [33]: J. Petru and L. Smrcka, Czech. J. Phys. B 35, 62 (1985).
- [34]: D. J. Shaughnessy, G.R. Evans and M.I. Drby, J. Phys. F 14, 1671 (1987).
- [35]: D. J. Singh, Phys. Rev. B 43, 6388 (1991)
- [36]: E. Sjösted, L. Nordström and D. J. Singh, Solid State Commun. 114, 15 (2000).

[37] : G.H.K. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjösted and L. Nordström, Phys. Rev.B. 64,195134 (2001).]

[38] : D. Singh, Phys. Rev. B 43, 6388 (1991).

[39]: D. R Hamann, Phys. Rev. Lett. 212, 662 (1979).

[40]:P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2k, AnAugmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for calculating CrystalProperties, Vienna University of Technology, Vienna, Austria (2008).

[41] :W. A. Harrison, Phys. Rev. B 10, 767 (1974).

[42]: W. A. Harrison and S.Ciraci, Phys. Rev. B 10, 1516 (1974).

[43]: S. P .Kowalsczyk, L. Ley, F. R. Mc Feely and D. A. Shirley, J. Chem 61, 2850 (1974).

[44]: D. R. Penn, Phys. Rev. 128, 2093 (1962).

[45] : P. J. Stiles, Sol. Stat. Com. 11, 1063 (1972).

[46]:D. Shifert, Phys. Rev. B 10, 3316 (1974).

Chapitre III :

[1]: H. Harthmann, R. Mach and B.Sell, in CurrentTopics in material Science, vol 9, Ed. E. Kaldis North Holland, (1982).

[2]: Fiorentini, V. et Baldereschi, A. Semiempirical self-energy corrections to LDA bands of semiconductors, and a scaling law for the scissor operator. Journal of Physics: Condensed Matter, 1992, vol. 4, no 27, p. 5967.

[3]:FIORENTINI, Vincenzo et BALDERESCHI, Alfonso. Dielectric scaling of the self-energy scissor operator in semiconductors and insulators. Physical Review B, 1995, vol. 51, no 23, p. 17196.

[4]: L. J. Sham and M. Schlüter, Phys. Rev. Lett. 51, 1888 (1983).

[5] : F. Nastos, B. Olejnik, K. Schwarz, and J. E. Sipe, Phys. Rev B 72, 045223 (2005).

[6]: HUANG, Ming-Zhu et CHING, W. Y. Calculation of optical excitations in cubic semiconductors. I. Electronic structure and linear response. Physical Review B, 1993, vol. 47, no 15, p. 9449.

[7]: A.E. Merad, “physical properties of ZnTe, CdTe, ZnMnTe and CdMnTe compounds ” Du livre “Investigation of Electronic, Magnetic and Elastic Properties Using First Principles Calculations and New Empirical Approach: Application to III-V, II-VI Semiconductors and Perovskite-Like Fluorides Materials” (2006) Ed.: Transworld Research Network, Kerala, INDIA,ISBN: 81-7895-201-7.

[8]: M Cardona, N.E. Christensen, Phys. Rev. B 35 (1987) 6182.

[9]: X Chen, X Hua, J Hu, J M Langlois ,W A Goddard, Phys. Rev.B 53 (1996) 1377.

- [10]:** D T F Marple, Refractive index of ZnSe, ZnTe, and CdTe. Journal of Applied Physics, 1964, vol. 35, no 3, p. 539-542.
- [11]:** B GYacobi. Semiconductor materials: an introduction to basic principles. Springer Science & Business Media, 2003.
- [12]:** S Adachi. Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors. John Wiley & Sons, 2009.
- [13]:** B.Gil,D.J.Dunstan,Semicond.Sci.Technol.6(1991)428.

Résumé :

Une méthode de calcul Ab-Initio a été utilisée pour étudier les propriétés optiques de CdTe et GaN, en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées potentiel (FP-LAPW) implémentée dans le code WIEN2k.

L'énergie de d'échange-corrélation est décrite dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) et dans l'approximation de la densité local (LDA). En utilisant le paramétrage de Perdew, Burke et Ernzerhof (PBE).

D'après les résultats des propriétés optiques, nous constatons que ces matériaux ont des bandes interdites directes. Les valeurs des 3 pics de la partie imaginaire de la fonction diélectrique et les valeurs statiques des paramètres optiques dans la phase blende de zinc sont déterminées. Une cohérence a été montrée entre nos résultats et ceux d'autres calculs théoriques et d'autres données expérimentales.

Abstract :

A calculation method Ab-Initio was used to study the optical properties of CdTe and GaN, using the method of linearized augmented plane wave potential (FP-LAPW) implemented in the WIEN2k code.

The energy of exchange-correlation is described in the generalized gradient approximation (GGA) and the approximation of the local density (LDA). Using the (PBE).

The results of the optical properties, we see that these materials have direct band gaps. The values of the three peaks of the imaginary part of the dielectric function, and the static values of the optical parameters in the zinc blende phase are determined.

Consistency has been shown between our results and those of other theoretical calculations and other experimental data

ملخص:

تم استخدام طريقة "ab-initio" لدراسة الخصائص البصرية لشبه الموصلات CdTe و GaN، وذلك باستعمال تقريب الأمواج المستوية المتزايدة خطياً (FP-LAPW) نفذت في برنامج wien2k، باستخدام تقريب الكثافة المحلية LDA من أجل شبه الموصل CdTe و تقريب التدرج المعمم GGA من أجل GaN

وفقاً لنتائج الخصائص البصرية، قمنا بتحديد ثلاثة قيم لقمم من الجزء التخيلي لدالة العزل الكهربائي، وقيم ثابتة من خصائص أخرى. وقد تبين أن النتائج المحصل عليها وتلك الحسابات النظرية والبيانات التجريبية الأخرى متناسقة

Mots clés :

CdTe, GaN, FP-LAW, propriétés optiques, blende de zinc, LDA, GGA, ab-initio