



République Algérienne Démocratique et Populaire
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
Université Larbi Tébessi – Tébessa



Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie
Département des Sciences de la Matière

MEMOIRE DE MASTER

Domaine : Sciences de la matière

Filière : Physique

Option : Physique de la matière condensée

THEME

**Influence de la composition stœchiométrique de
l'Aluminium sur les propriétés élastiques de
l'alliage ternaire (Al, Ga) Sb**

Présenté par :

Hanane Amrane et Nour el Houda Sedira

Devant le jury

Med Lotfi Benkhedir	Professeur	Univ. Tébessa	Président
Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Izzeddine Saouane	MAA	Univ. Tébessa	Examinateur

Soutenue le Dimanche 27 / 05 / 2018 à 10^h:00

ملخص :

عملنا هذا يتوقف على دراسة الخواص المرونية لأنصاف النواقل III-V ذات البنية زنك-بلاند للمركبات الثنائية AISb و GaSb وسبائكها الثلاثية $Al_xGa_{1-x}Sb$ ، مستخدمين في ذلك طريقة شبه الكمون التجريبية (E.P.M) المرتبطة بتقريب البلورة الافتراضية (VCA) والذي يتضمن تأثير العشوائية ككمون فعال مقرون بنموذج المدارات الحرة لـ Harisson.

حسبنا الثوابت المرونية C_{11} ، C_{12} و C_{44} ، معامل الإنضغاط B، معامل القص G، معامل يونغ Y معامل بواسون ν ، معامل تباين المناحي A والأيونية f_i ومعامل Kleinman ξ ، بالإضافة إلى ثوابت القوة للإستطالة α والإنحاء β .

قمنا بدراسة فعل العشوائية المركب وتأثير تركيز الألمنيوم على تغيرات هذه العوامل المرونية المتحصل عليها في حساباتنا على طول المجال من $x=0$ إلى $x=1$.
عموما نتائجا متوافقة جدا مع النتائج التجريبية والنظرية المتوفرة.

الكلمات المفتاحية : أنصاف النواقل III-V ، السبيكة الثلاثية $Al_xGa_{1-x}Sb$ ، الخواص المرونية، طريقة شبه الكمون التجريبية، تقريب البلورة الافتراضية، نموذج المدارات الحرة، تأثير التركيز، فعل العشوائية.

Abstract :

Our work aims at studying the elastic properties of semiconductors III-V crystallizing in zinc-blend structure of binary compounds $AlSb$, $GaSb$ and ternary alloy $Al_xGa_{1-x}Sb$ using empirical pseudopotential method (EPM) coupled with the Virtual Crystal Approximation (VCA), which includes the disorder effect as an effective potential, and combined with the related orbital model of Harrison (OBM).

We calculated the elastic constants C_{11} , C_{12} , C and C_{44} and the bulk modulus B , the shear modulus G and Young's modulus Y , Poisson's ratio ν , the anisotropy factors A and ionicity f_i as well as the Kleinman's parameter ξ , we have also the force constants of elongation α and bending β .

We have studied the disorder effect compositionnel and the concentration x of Aluminum influence along the interval let's go from $x=0$ at $x=1$.

generally our results obtained for agree better with the experimental data and with other theoretical work available.

Key words: III-V semiconductors, alloy $Al_xGa_{1-x}Sb$, elastic proprietes, empirical pseudopotential method, virtual crystal approximation, related orbital model, influence of concentration, disorder effect.

Résumé :

Notre travail consiste à étudier les propriétés élastiques des semiconducteurs III-V cristallisants dans la structure Zinc blende des composants binaires $AlSb$, $GaSb$ et leurs alliages ternaires $Al_xGa_{1-x}Sb$. En utilisant la méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui inclut l'effet du désordre comme un potentiel effectif et associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (OBM).

Nous avons calculés les constants élastiques C_{11}, C_{12} et C_{44} , le module de compressibilité B , le module de cisaillement G , le module de Young Y , coefficient de poisson ν , les facteurs d'anisotropie A , de l'ionicté f_i , le paramètre de Kleinman ξ , ainsi que les constantes de force : d'élongation α et de recourbement β .

Nous avons étudiés l'effet du désordre compositionnel et l'influence de la concentration de l'Aluminium sur les variations de ces paramètres élastiques obtenues dans nos calculs sur tout l'intervalle allons de $x = 0$ jusqu'à $x = 1$.

Généralement nos résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles.

Mots clés : semiconducteurs III-V, alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$, les propriétés élastiques, méthode du pseudopotentiel empirique, approximation du cristal virtuel, modèle des orbitales liées, l'influence de la concentration, l'effet du désordre.

Remerciements

Mes remerciements s'adressent tout d'abord à ma directrice de mémoire, Docteur **Benmakhlouf Fella** professeur à l'université Larbi Tébessi (Tébessa). Ses idées, ses conseils et surtout la confiance qu'elle m'a témoignée m'ont permis de mener à bien ces recherches.

Mes sincères remerciements vont également aux membres du jury.

Je remercie vivement le **professeur Benkhedir Mohamed Lotfi** d'avoir accepté de présider le jury de ma soutenance de thèse.

Merci au **docteur Saouane Izzeddine** d'avoir accepté d'examiner mes travaux de recherche.

Mes remerciements s'adressent également à toute l'équipe du département de physique de l'université de Tébessa.

Un grand merci à toute ma famille qui a toujours été présente lorsque j'en ai eu besoin et mes collègues.

Hanane Amrane

Dédicace

Merci Allah (mon dieu) de m'avoir donné la capacité d'écrire et de réfléchir, la force d'y croire, la patience d'aller jusqu'au bout du rêve et le bonheur de lever mes mains vers le ciel et de dire :

"Ya Kayoume "

Je dédie ce mémoire à :

Ma chère Famille : mes parents, mes tantes et sœurs, pour leur encouragement constant et le soutien morale qu'ils m'ont assurés depuis le début de cette thèse jusqu'à cela.

Mes amis.

Tous nos enseignants.

Une spéciale dédicace à une personne qui a été très paternaliste avec nous : Professeur Abderrachid Sechiri. Trouver dans ce modeste travail nos sincères gratitude et reconnaissances. Ce travail est le votre.

Et à tous ceux qui nous ont assistés, dans la réalisation et le bon déroulement de ce travail.

Hanane Amrane

Sommaire

Table des matières

المُلخَص

Abstract

Résumé

Remerciement

Dédicace

Sommaire

Liste des tableaux	<i>i</i>
Liste des figures	<i>ii</i>
Liste des symboles	<i>iv</i>
Liste des abréviations	<i>vi</i>

Introduction générale

Introduction générale.....	1
Références.....	2

Chapitre I : Méthode de pseudopotentiel

I.1. Introduction	3
I.2. Théorie du Pseudopotentiel	3
I.2.a. Du potentiel au pseudopotentiel	4
I.2.b. Qu'est-ce qu'un pseudopotentiel ?	5
I.2.c. Construction des pseudopotentiels	5
I.3. Méthode du pseudopotentiel	6
I.4. Les caractéristiques du pseudopotentiel	6
I.5. Le principe de cette méthode	6
I.6. Concept du pseudopotentiel	7
I.7. Les modèles pseudo potentiel	9
I.7.1. Le modèle local	9
I.7.1.a. Modèle d'Ashcroft	10
I.7.1.b. Modèle de Heine et Abarenkov	10
I.7.2. Modèle non local	10
I.7.2.a. Modèle d'Ashcroft	11

I.7.2.b. Modèle de Heine-Abarenkov	11
I.7.2.c. Modèle de Gauss	11
I.8.La méthode empirique de pseudopotentiel [E.P.M]	12
I.9.La procédure de calcul de la méthode E.P.M	13
I.10.L'ajustement des facteurs de forme	14
Références	17

Chapitre II : Etude des propriétés élastiques

II-1 Introduction	19
II.2. Tenseurs.....	19
II.2.a - Tenseur des contraintes	20
II.2.b - Tenseur de déformation	21
II.2. c - Tenseur de dilatation.....	25
II-3- Relation contrainte-déformation	27
II-3-a- La loi de Hooke généralisée	27
II-4-Densité d'énergie élastique (U)	29
II-5- Les méthodes de calcul des propriétés élastiques	31
II-5-1- Le calcul des constants élastiques	31
II-5-2-Le module de compressibilité	32
II-5-3-Les constantes des force	32
II-5-4-Le Module de cisaillement (G)	33
II-5-5-Le Module de Young (Y)	33
II-5-6- Le coefficient de poisson	33
II-5-7- Le facteur d'anisotropie A	33
II- 5-8-Le facteur d'ionicité f_i	33
II-5-9-Le paramètre de Kleinman ξ	34
Références	35

Chapitre III : Résultats et Discussions

III -1- Introduction	37
III -2-a- Les avantages des semiconducteurs III-V	38

III-3- L'approximation du cristal virtuel (VCA)	39
III-4- Approximation du cristal virtuel Améliorée (VCAA)	39
III-5- Les propriétés élastiques de l'alliage semiconducteur $Al_xGa_{1-x}Sb$	41
III-5-1- Les constants élastiques	41
III-5-2- Le module de compressibilité et les constantes des forces	45
III-5-3- Les modules de cisaillement G, de Young Y, le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A	48
III-5-4- Le facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ	52
Références	55

Conclusion générale

Conclusion générale	58
---------------------------	----

Liste des tableaux

<i>Tableau</i>	<i>Titre</i>	<i>page</i>
Tableau III-1	<i>représentation simplifié du tableau périodique de Mendeleïev</i>	37
Tableau III-2	<i>Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs GaSb et AlSb dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en ($Å^\circ$).</i>	41
Tableau III-3	<i>Les constants élastiques C_{11}, C_{12} et C_{44} en (10^{11} dyne/cm²) de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$</i>	42
Tableau III-4	<i>Le module de compressibilité B en (10^{11} dyne/cm²) et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en (N/m) de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$.</i>	46
Tableau III-5	<i>les modules de cisaillement (G), Young (Y) en (10^{11} dyne/cm²) le coefficient de Poisson (ν) et le facteur d'Anisotropie (A) de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$.</i>	49
Tableau III-6	<i>Facteur de l'ionicité f_i et le paramètre de Kleinman ξ de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$.</i>	53

Liste des figures

Figure	Titre	page
Chapitre I		
Figure I-1	Schémas représentant : (à gauche) un potentiel (AE), les fonctions d'onde de l'état s et p correspondantes ; (à droite) les pseudopotentiels correspondant à chaque état ainsi que les pseudo-fonctions d'onde respectives.	4
Figure I-2	Illustration schématise le potentiel de tout-électron (lignes continues) et pseudo-électron (lignes discontinues) et leurs fonctions d'ondes correspondantes.	5
Figure I-3	La fonction d'onde et le potentiel.	7
Figure I-4	Schéma du pseudo potentiel dans l'espace réel.	8
Figure I-5	Les modèles du pseudopotentiel non local.	12
Figure I-6	l'organigramme de la méthode E.P.M.	16
Chapitre II		
Figure II-1	$T(M)$ liant deux grandeurs physiques (u et v) dans un repère donné.	19
Figure II-2	Une force s'exerce sur l'unité de surface du solide.	20
Figure II-3	Les composantes du tenseur de contraintes.	21
Figure II-4	Axes des coordonnées avant et après la déformation.	22
Figure II-5	L'élément tensoriel de déformation.	25
Figure II-6	Le changement du volume de l'échantillon sous l'effet d'une contrainte.	26
Figure II-7	Une rotation de $2\pi/3$ autour de l'axe numéroté 3 change $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$	30
Chapitre III		
Figure III-1	Réseau cristallin dans la structure zinc blende	38
Figure III-2	Les variations des constants élastiques C_{11}, C_{12}, C_{44} en fonction de la concentration x de l'Aluminium sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage ternaire.	44

Figure III-3	Les variations des constants élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de concentration x de l'Aluminium de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$, avec et sans désordre.	45
Figure III-4	La variation des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	47
Figure III-5	La variation du module de compressibilité B avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	48
Figure III-6	La variation du module de cisaillement (G) en (dyne/cm^2), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	50
Figure III-7	La variation du module de Young (Y) en (dyne/cm^2), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	51
Figure III-8	La variation de coefficient de Poisson ν avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	51
Figure III-9	La variation du facteur d'Anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$, en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	52
Figure III-10	La variation de facteur d'ionicté f_i avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	54
Figure III-11	La variation du facteur de Kleinman ξ avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.	54

Liste des symboles

Ψ : Fonction d'onde.	ψ_c : Fonction d'onde du cœur
ϕ : Fonction d'onde plane.	r : Rayon.
ϕ_c : Etats atomiques qui occupent le cœur.	r_c : Rayon du cœur.
H : Hamiltonien	Z : Nombre d'électrons.
E : Energie propre.	Z_e : Valence atomique.
E_c : Energie du cœur.	A : Potentiel constant dans la région du cœur.
V_p : Pseudo potentiel.	V_{NL} : Potentiel non local.
V_R : Potentiel répulsif.	$A_I(E)$: Energie des états profonds.
V_o : Potentiel attractif.	\hbar : Constante réduite de Planck.
$f_I(\mathbf{r})$: Fonction qui représente l'effet de l'état du cœur.	p_I : Opérateur de projection de la 1 ^{ème} composante du moment angulaire.
m : Masse de l'électron.	A_I : Profondeur du puits.
Δ : Laplacien.	\vec{r} : Vecteur de translation du réseau direct.
\vec{R} : Vecteur du réseau direct.	G : Module de cisaillement.
$V_a(\vec{G})$: Facteur de forme.	Y : Module de Young.
$S\vec{G}$: Facteur de structure.	ν : Coefficient de Poisson.
\vec{G} : Vecteur du réseau réciproque.	A : Facteur d'anisotropie
N_a : Nombre d'atomes de base.	B : Module de compressibilité.
m : Nombre de maille élémentaires dans le solide.	f_i : Facteur d'ionicté
$\Psi_{n,k}(\mathbf{r})$: Fonctions d'ondes propres.	ξ : Paramètre de Kleinman.
σ : Contrainte.	V_{VCA} : Potentiel périodique virtuel du cristal.
F : Force exercée.	$V_{dés}$: Potentiel non périodique.
S : Surface d'un matériau solide .	P : Paramètre ajustable
\vec{r} : Vecteur de position.	$V_{AC}(G)$: Facteurs de formes des composés AC.
\vec{u} : Vecteur du déplacement.	$V_{BC}(G)$: Facteurs de formes des composés BC.
ε_{ij} : Constantes de proportionnalité.	$a(x)$: Constante du réseau.
$[\varepsilon_{ij}]$: Tenseur des petits déplacements.	α_{AC} : Paramètre du réseau du composé binaire
Δu_i : Vecteur des petits déplacements.	α_{BC} : Paramètre du réseau du composé binaire
e_{ij} : Tenseur symétrique.	$C_{\alpha\beta}$: Matrice des constantes élastiques du 2 ^{ème} ordre.

ω_{ij} : Tenseur antisymétrique.	$V_s(\mathbf{3})$: Facteurs de formes symétriques.
C_{ijkl} : tenseur d'ordre 4	$V_a(\mathbf{3})$: Facteurs de formes antisymétriques.
e_{ii} : Déformation relative longitudinale sous l'extension.	d : Distance entre les plus proches voisins.
δ : Dilatation.	a : Paramètre du réseau.
V : Volume de l'échantillon avant la dilatation.	C_{11}, C_{12}, C_{44} : Constants élastiques.
V' : Nouvel volume après la dilatation.	α : Constante de force d'élongation.
$e^{(1)}, e^{(2)}, e^{(3)}$: Coefficients de déformation principaux	β : Constante de force de recourbement.
e_{ii} : Déformation relative longitudinale sous l'extension.	Z_1, Z_2 : Charges ioniques et cationiques, respectivement.

Liste des abréviations

- ❖ O.P.W : Ondes planes orthogonalisées (orthogonalized plane waves).
- ❖ N.F.E.M : Nearly Free Electron Model.
- ❖ EPM : Méthode du pseudopotentiel empirique.
- ❖ VCA : Approximation du cristal virtuel ((Virtual-Crystal Approximation).
- ❖ VCAA : Approximation du cristal virtuel améliorée.
- ❖ OBM: model of the bond orbital.
- ❖ (ATA) : Approche de la matrice t-moyenne.
- ❖ (CPA) : Approche de potentiel cohérent.

Introduction Générale

Introduction générale

La physique des matériaux joue un rôle de plus en plus important dans les applications technologiques, et ce rôle ne fera que progresser dans beaucoup de domaines. La conception et la fabrication des matériaux nouveaux, aux propriétés souvent étonnantes (alliages spéciaux, matériaux composites très légers et très résistants, cristaux liquides, semiconducteursetc.) constitue un domaine très actif de la recherche et de la technologie moderne [1].

Dans la science des matériaux les composants semiconducteurs III-V qui ont un caractère moins ionique. S'offrent des perspectives très prometteuses, en raison de leurs propriétés intrinsèques remarquables. Ils sont en effet dotés d'une forte mobilité électronique et, le plus souvent, d'une bande interdite directe permettant l'émission de lumière. Ils ont un large champ d'applications nouvelles dans des domaines très divers incluant la microélectronique rapide digitale et analogique, les composants électroniques de puissance hyperfréquence et l'optoélectronique intégrée. En électronique rapide et en optoélectronique [2,3], Ils sont formés presque tous à la structure de zinc-blende.

Les alliages ternaires de type AB_xC_{1-x} ont été connus comme semiconducteurs très utiles pour la fabrication de nouveaux dispositifs optoélectroniques. Ceci est du à la possibilité d'ajustement la largeur du gap en variant la concentration x de ces alliages. Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques (optique, électronique, structural, mécanique, etc...) des alliages ternaires. L'approximation du cristal virtuel (VCA) à cause de sa simplicité est restée la méthode la plus préférée pour le traitement du désordre chimique des alliages semiconducteur [4].

L'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ est un matériau d'une très grande importance dans l'électronique rapide, et il est utilisé comme dispositif infrarouge dans l'optoélectronique, le paramètre de maille est de $6,09 \text{ \AA}$ pour le composant $GaSb$ et de $6,14 \text{ \AA}$ pour le composant $AlSb$ ce qui signifie qu'il y'a un assez bon accord de maille [5].

De nos jours, la modélisation physique par simulation numérique joue un rôle de plus en plus prépondérant dans de nombreux domaines de la physique, grâce à leur succès dans la description et la prédiction des propriétés des matériaux [6].

Pour le traitement de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ nous avons utilisé la méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M) qui permet de calculer proprement et d'une façon relativement économique en temps, des paramètres physiques, dont les résultats sont en très bon accord avec l'expérience.

Cette simulation a été effectuée par un programme de Fortran. Ce programme est basé sur la méthode du pseudopotentiel empirique local, en utilisant une technique de couplage entre l'approche du cristal virtuel (VCA) et l'approche du cristal virtuel améliorée (VCAA) qui tient en compte de l'effet du désordre compositionnel, combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (Bond Orbital Model). Ce programme permet d'obtenir les propriétés élastiques telles que les constants élastiques (C_{11} , C_{12} , C_{44}) et certains autres paramètres, tels que : Le module de compressibilité B et les constantes des forces α et β , le module de cisaillement G, le facteur d'anisotropie A, et par conséquent l'effet de désordre sur les évolutions de ces paramètres élastiques tels que, le module de Young Y, le coefficient de Poisson ν , le facteur d'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ ...

Ce manuscrit est organisé comme suit : une introduction générale sur l'alliage d'intérêt, suivie d'un premier chapitre où nous présenterons la méthode de pseudopotentiel utilisée. Pour déterminer les propriétés élastiques de notre alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$; Le deuxième chapitre est consacré à une petite rappelle sur les propriétés élastiques des semi conducteurs dans la structure zinc blende, et la méthode utilisée dans nos calculs.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons les résultats obtenus lors de nos calculs des propriétés élastiques pour l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en tenant et sans tenir compte de l'effet du désordre. Ces résultats sont confrontés et comparés avec les valeurs expérimentales et théoriques disponible d'autres chercheurs.

Finalement, notre travail sera achevé par une conclusion générale.

Références

- [1] P. Arnaud, chimie physique, édition Dunod (2001).
- [2] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA. **30**, 244 (1944).
- [3] F. El Haj Hassan, A. Breidia, S. Ghemid, B. Amrani, H. Meradji, O. Pagès Journal of Alloys and Compounds .**499**, 80 (2010).
- [4] S. J. Lee, T. S. Kown, K. Nahm and C.K.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter. **2**,3253 (1995).
- [5] M. Ayat, Mémoire de magister, Université d'Oran (Algérie) (2009).
- [6] S. Benyettou, Thèse de doctorat, Université de Biskra (Algérie) (2016).

Chapitre I

Méthode de Pseudopotentiel

Chapitre I

Méthode de Pseudopotentiel

I-1- Introduction :

La méthode de pseudopotentiel est basée sur l'hypothèse que les propriétés physiques et chimiques des matériaux dépendent essentiellement aux électrons de valences, tandis que les électrons de cœur peuvent être considérés comme étant gelés dans leurs configurations atomiques [1]. Elle consiste ainsi à ne traiter explicitement que les électrons de valence, qui se déplacent alors dans un potentiel externe effectif produit par ces cœurs ioniques immobiles appelé : Pseudopotentiel.

Cette méthode est introduite pour simplifier les calculs. Cependant, le calcul sera réduit uniquement aux électrons de valence qui seront choisis. Cette approximation est bien justifiée du fait que les orbitales de cœur ont une énergie plus basse et localisées près du noyau, elles sont peu sensibles à l'environnement et ne participent pas aux liaisons chimiques. Par ailleurs, elles sont difficiles à représenter sur une base car elles possèdent généralement de fortes oscillations autour du noyau. En revanche, les orbitales de valence sont peu localisées et s'étendent loin du noyau, ainsi elles déterminent au premier ordre les propriétés physiques et chimiques. L'idée de base proposée par Fermi et alors la simplification des calculs de structures électroniques par élimination des états de cœur. L'effet des électrons de cœur sera remplacé par un pseudopotentiel effectif. Ce qui revient à remplacer un potentiel externe électrons-noyaux par un potentiel plus faible traduisant l'écrantage par les électrons de cœur [2].

I-2- Théorie du Pseudopotentiel :

Il est bien connu que la plupart des propriétés physiques des solides dépendent des électrons de valence beaucoup plus que ceux du cœur, car les premiers sont les seuls à intervenir dans l'établissement des liaisons chimiques. Les fonctions d'onde de valence oscillent rapidement dans la région occupée par les électrons du cœur et ceci est dû au potentiel ionique fort dans cette région. Ces oscillations permettent de conserver l'orthogonalité entre les fonctions d'onde du cœur et celles de valence, "condition oblige" du principe d'exclusion.

L'idée fondamentale du "pseudopotentiel" est de remplacer un problème par un autre. L'application primordiale dans la structure électronique, consiste à remplacer le potentiel fort de Coulomb, provenant des noyaux et des effets des électrons du cœur étroitement liés, par un potentiel ionique effectif agissant sur un ensemble de pseudo-fonctions d'onde, plutôt que sur les vraies fonctions d'onde de valence. La plupart des pseudopotentiels sont construits à partir de

calculs sur l'atome isolé impliquant tous les électrons, et ensuite utilisés pour déterminer les propriétés des électrons de valence dans le cas des molécules ou des solides [3].

I-2-a- Du potentiel au pseudopotentiel :

Un potentiel, une fonction d'onde de valence ainsi que les pseudos potentiels et Pseudo fonctions d'onde correspondants sont illustrés sur la Figure (I-1).

Le pseudopotentiel est idéalement construit, c'est-à-dire que les propriétés de diffusion ou les déphasages pour la pseudo fonction d'onde sont identiques aux propriétés de diffusion de l'ion et des électrons du cœur pour les fonctions d'onde de valence. Ceci de façon à ce que les pseudos fonctions d'onde n'aient pas de nœuds radiaux dans la région du cœur. Pour chaque nœud que les fonctions de valence possèdent dans la région du cœur, le déphasage total produit par l'ion et les électrons du cœur sera plus grand de π que celui produit par l'ion et les électrons de valence dans la même région. A l'extérieur de la région du cœur, les deux potentiels sont identiques [3].

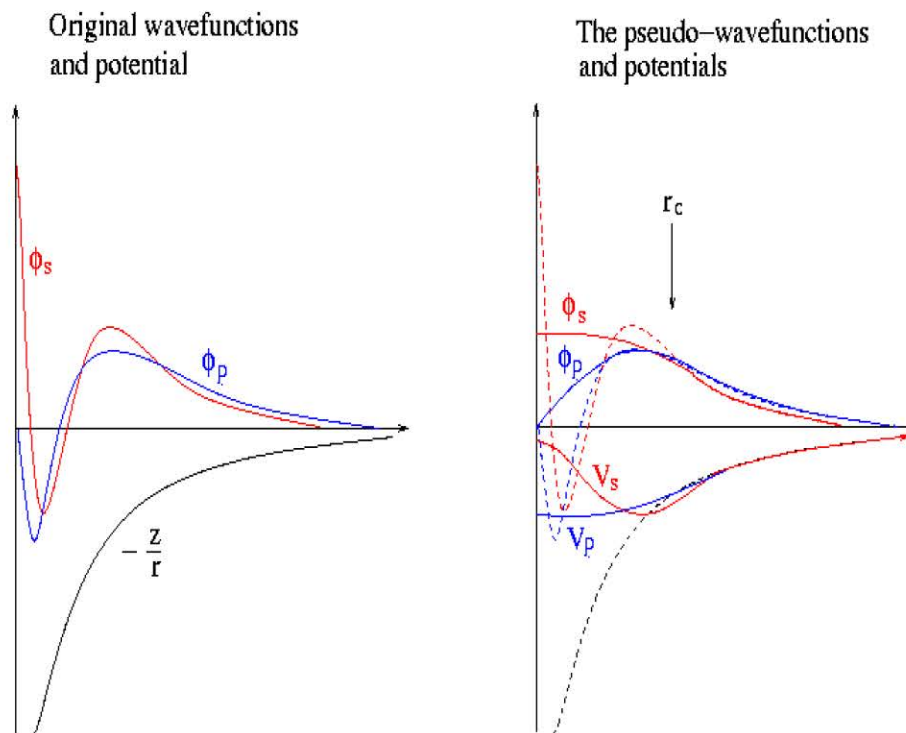


Figure I-1: Schémas représentant : (à gauche) un potentiel (AE), les fonctions d'onde de l'état s et p correspondantes ; (à droite) les pseudos potentiels correspondant à chaque état ainsi que les pseudo-fonctions d'onde respectives [2].

Le rayon pour lequel les fonctions et pseudo-fonctions d'onde se rejoignent est désigné par r_c [2].

I-2-b- Qu'est-ce qu'un pseudopotentiel ?

Dans les molécules et les composées solides, les électrons de valence sont les seuls à intervenir dans les liaisons chimiques, les électrons du cœur, qui sont sur les couches les plus internes, proches du noyau, sont très peu sensible à l'environnement, en outre elles sont difficiles à représenter sur une base d'onde plane car elles possèdent généralement de fortes oscillations autour du noyau. On peut donc regrouper les électrons du cœur avec les noyaux, pour former des ions rigides, dont les états électroniques resteront inchangés quel que soit l'environnement dans lequel l'atome sera placé; **c'est l'approximation du cœur gelé** [1].

On peut aller plus loin en remplaçant l'interaction des électrons de valence avec l'ensemble {noyau et électrons de cœur} par un potentiel effectif, beaucoup moins attractif que le potentiel créé par le noyau avec tous les électrons, c'est ce potentiel effectif qu'on appelle un pseudo potentiel, voir la figure (I-2)

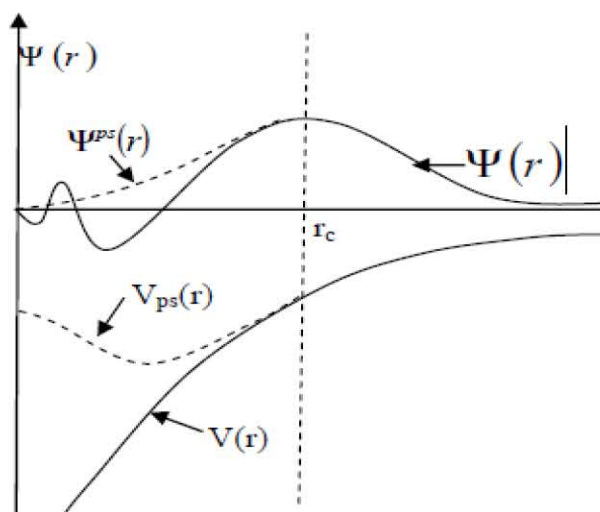


Figure I-2 : Illustration schématisant le potentiel de tout-électron (lignes continues) et pseudo-électron (lignes discontinues) et leurs fonctions d'ondes correspondantes [4].

I-2-c-Construction des pseudopotentiels :

Le pseudopotentiel doit vérifier un certain nombre de propriétés :

- ♦ Il doit être additif, c'est-à-dire il doit être la somme des pseudopotentiels lorsque plusieurs atomes sont en présence.
- ♦ Il doit être transférable c'est à dire qu'on doit pouvoir utiliser le même Pseudopotentiels dans des environnements chimiques différents.
- ♦ Il induit des variations de potentiel plus faibles que dans le cas du potentiel de cœur réel par la réduction du nombre d'onde planes nécessaires à la description des Fonctions d'onde.

Les méthodes de construction des pseudopotentiels sont divisées en deux catégories selon la base utilisée pour développer les pseudo-fonctions. La méthode de conservation de la norme et la méthode de la non-conservation de la norme [5].

I-3-Méthode de pseudopotentiel :

La méthode du pseudopotentiel est une technique de calcul très utilisée dans l'étude des structures de bande. Cette méthode s'est avérée, depuis son introduction, très efficace dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides [6].

I-4- Les caractéristiques du pseudopotentiel:

La méthode du pseudopotentiel fut introduite par Fermi en 1934 pour étudier les états atomiques des couches minces. Dans l'année suivante, Hellman [7] a proposé une approximation du pseudopotentiel qui a pu être utilisée dans la détermination du pseudopotentiel énergétique dans les métaux alcalins. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Phillips et Kleinman en 1959 qui se sont basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W) [1]. L'intérêt de cette méthode est que seuls les électrons de valence seront pris en compte. Les électrons du cœur seront supposés "gelés" et seuls les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électronique [8].

Les coefficients utilisés dans la méthode O.P.W pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur, peuvent être utilisés pour construire un potentiel orthogonal. Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valence loin du cœur. Et on obtient par effet d'annulation un potentiel faible ou "pseudopotentiel". Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres (N.F.E.M : Nearly Free Electron Model) ou toute autre méthode standard pour résoudre l'équation de Schrödinger [9, 10].

I-5- Le principe de cette méthode:

Cette méthode fut appliquée notamment pour le calcul des structures électroniques des solides et liquides, les interactions électron-phonon, la supraconductivité, les vibrations des réseaux, les liaisons et structure des cristaux ...etc [11].

Mais les techniques numériques deviennent assez compliquées quand un nombre infini d'électrons sans interaction qui se meuvent dans le potentiel statique d'un nombre infini de noyaux ou d'ions. A ce stade, une fonction d'onde doit être calculée pour chaque électron parmi un nombre infini dans le système. Ce problème peut être surmonté en appliquant le théorème de Bloch à la fonction d'onde électronique. Ce qui va naturellement conduire à utiliser une base d'ondes planes et la technique des points spéciaux dans l'espace réciproque [12].

I-6-Concept du pseudopotentiel :

Dans un atome ou dans un solide le potentiel agissant sur un électron de valence est très attractif à l'intérieur du cœur (figure I-3-a).

Dans cette région la fonction d'onde oscille rapidement (figure I-3-c), ce qui se traduit par une énergie cinétique élevée, où l'énergie potentielle est très faible, ou bien comme une manifestation du principe de Pauli qui exige que la fonction d'onde soit orthogonale aux orbitales des électrons du cœur [13].

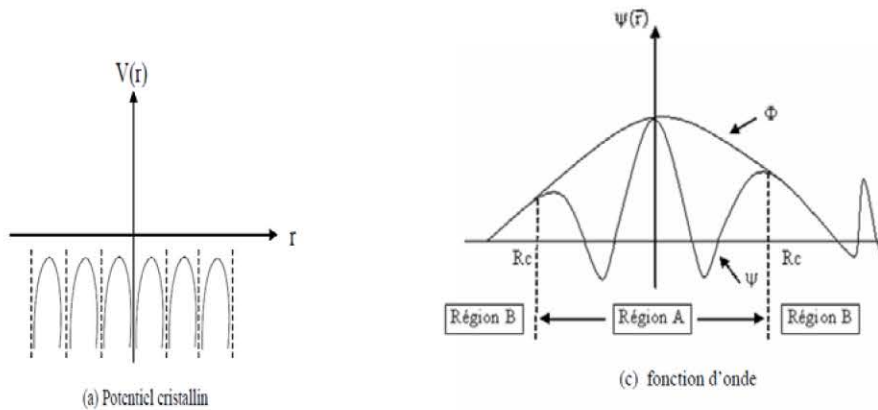


Figure I-3 : La fonction d'onde et le potentiel [14].

La description de la théorie de Phillips et Kleinman [15, 16] est la suivante :

La fonction d'onde ψ est donnée par la relation d'onde plane et des états atomiques représentées par cette relation:

$$\psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \tag{I-1}$$

Cette fonction d'onde doit être orthogonale aux états du cœur ϕ_c donc

$$\langle \phi_c | \psi \rangle = 0 \tag{I-2}$$

Avec:

$$\psi = \phi - \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c \tag{I-3}$$

ψ : est la fonction d'onde.

Reportant cette expression dans l'équation de Schrödinger :

$$H \psi = E \psi \tag{I-4}$$

Nous aboutissons à la pseudo-équation d'onde, qui aura comme caractéristiques :

- La faiblesse du potentiel, c'est le pseudopotentiel.
- L'absence des oscillations à l'intérieur du cœur.

En utilisant l'expression (I-2) et (I-4), nous pouvons démontrer que :

$$H \phi + \sum_c (E - E_c) \phi_c \langle \phi_c | \phi \rangle = E \phi \quad (\text{I-5})$$

D'une façon condensée, on peut écrire :

$$(H + V_R) \phi = E \phi \quad (\text{I-6})$$

V_R : C'est l'opérateur est comme un potentiel purement répulsif puisque les termes d'orthogonalisation ont l'effet de maintenir les électrons de valence à l'exercice du cœur (principe de Pauli).

E : n'est pas une pseudo énergie mais la vraie énergie correspondant à la vraie fonction d'onde ψ .

L'équation (I-6) devient :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} + V_C + V_R \right) \phi = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \right) \phi = E \phi \quad (\text{I-7})$$

Étant donné que E est légèrement supérieur à E_R donc :

V_C : Le potentiel ionique du cœur, il est puissant et négatif.

V_R : est un potentiel répulsif positif.

Leur sommation réduit ainsi la valeur de V_P [15]

$$V_P = V_C + V_R \quad (\text{I-8})$$

V_P : est un potentiel faible (Figure I-3)

Ce qui justifie l'utilisation de la méthode N.F.E.M, pour résoudre l'équation de Schrödinger. Le potentiel V_P n'a pas en toute rigueur, une forme locale $V_P(r)$, mais l'utilisation d'un modèle local a donné dans certains cas, de très bons résultats [17-20].

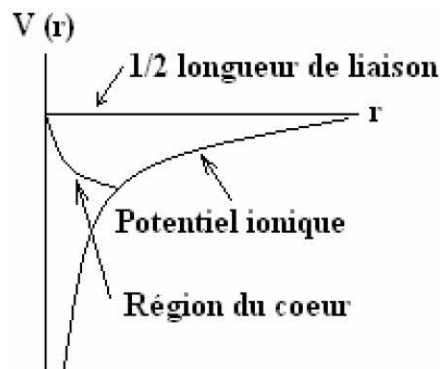


Figure I-4: Schéma du pseudo potentiel dans l'espace réel. [21]

Le pseudopotentiel est considéré comme une perturbation, les éléments matrices du potentiel V_R sont donnés par [22] :

$$\psi V_R \psi = \sum_c (E_v - E_c) |\psi_c^* \psi|^2 \quad (\text{I-9})$$

Si on néglige l'effet du cœur, le pseudo potentiel devient local et dépend explicitement de la position, il est donné par:

$$V_R = V(r, r') = \sum_c (E - E_c) |\phi(r)\rangle \langle \phi_c(r) | | \phi \rangle \quad (\text{I-10})$$

Où la fonction ϕ dépend de r.

Si on tient compte de l'effet du cœur le pseudo potentiel devient non local.

I-7-Les modèles pseudopotentiel :

La méthode du pseudopotentiel est basée principalement sur des données expérimentales telles que l'analyse des paramètres cristallins au rayon X, la réflexion et l'absorption des cristaux [23]. Il existe deux sortes de pseudopotentiel : le pseudopotentiel local (EPM local) et le pseudopotentiel non local (EPM non local)

En principe, certains états électroniques n'existent pas dans le cœur, d'où un potentiel non répulsif qui peut être supposé. Par exemple, dans le carbone, la configuration atomique est $1s^2 2s^2 2p^2$ où $1s^2$ représente le cœur. Les électrons $2s$ doivent voir un potentiel répulsif à cause des électrons $1s$ dans le cœur, mais les électrons $2p$ ne le doivent pas. D'où le pseudopotentiel qui devra dépendre du moment angulaire l, et ce pseudopotentiel est appelé : le pseudopotentiel non local.

Si par contre on néglige l'effet du cœur, la méthode est celle du pseudopotentiel local.

I-7-1-Le modèle local:

Le modèle le plus simple consiste en un potentiel local dépendant de la variable r, et pour ce fait plusieurs formes potentielles ont été proposées.

Le premier modèle [24]. Consiste en un potentiel de coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région de cœur, la forme de ce potentiel est [25]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & r \geq r_c \\ -\frac{Z_e}{r} & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-11})$$

Z: est la valence atomique.

r_c : est le paramètre utilisé pour ajuster les données atomiques.

I-7-1-a- Modèle d'Ashcroft:

Ce modèle est appelé "the empty core potential" [26]. Il est proposé par Ashcroft. C'est une autre forme de potentiel similaire qui est beaucoup utilisé, c'est le potentiel des cœurs inoccupés. [24, 27].

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{z_e}{r} & r \geq r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-12})$$

I-7-1-b-Modèle de Heine et Abarenkov:

Ce modèle introduit plus de flexibilité pour cet ajustement par l'introduction d'un potentiel A considéré comme constant dans la région du cœur. La forme de ce potentiel est :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{z_e}{r} & r \geq r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-13})$$

Ce potentiel peut être non-local (dépendant du moment angulaire) pour différents choix de la constante A . La dépendance en énergie peut être introduite par $A=A(E)$.

I-7-2-Modèle non local:

Le but de l'approche non-locale est de combler les insuffisances de l'approche précédente, le pseudo potentiel est essentiellement non local et dépend de r et de l'énergie E en choisissant des constantes différentes dans la région du cœur pour chaque valeur du nombre quantique l , la dépendance en énergie peut être ainsi incluse en remplaçant la constante A par $A_l(E)$ [28]. On peut donc écrire le pseudo potentiel non local sous la forme suivante [29].

$$V_{N,L}(r, E) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{I-14})$$

$A_l(E)$: est appelée énergie des états profonds c'est la constante de la dépendance du pseudo potentiel en énergie des états du cœur (représente la profondeur du puits en énergie).

$f_l(r)$: Une fonction simulant l'effet des états du cœur ayant une symétrie l .

P_l : est l'opérateur de projection de la 1^{ème} composante du moment angulaire.

La non localité traduit la différence d'énergie qui existe entre le cœur et l'électron de valence. Elle est calculée pour chaque moment angulaire orbital ($l = 1, 2, 3, \dots$)

[30, 31]. Dans ce cas le pseudopotentiel dépend du moment angulaire des fonctions d'ondes d'où le pseudopotentiel non local est la somme du pseudopotentiel local et d'un terme de correction (dépendance énergétique avec chaque moment angulaire) [32].

Les modèles du pseudopotentiel non local diffèrent selon la forme choisie pour $f(r)$

Dans cette approche non-locale trois modèles simulant la fonction $f(r)$ ont été extrêmement utilisés.

I-7-2-a-Modèle d'Ashcroft :

Dans ce modèle (voir figure I-5-a) :

$$f_I(r) = 0 \quad (\text{I-15})$$

L'indice zéro se réfère au paramètre non masqué. Cette dernière équation montre que le potentiel répulsif dû à l'orthogonalisation de la fonction d'ondes des électrons de conduction sur les états du cœur, annule très exactement le potentiel coulombien à l'intérieur du cœur ionique [26, 33].

I-7-2-b- Modèle de Heine-Abarenkov :

Heine et Abarenkov ont proposé une méthode pour obtenir un modèle de pseudopotentiel pour les métaux. L'information sur l'ion est déduite des niveaux d'énergie atomiques tirés des données spectroscopiques plutôt que d'un calcul élaboré de mécanique quantique. La fonction

$f_1(r)$ (voir figure I-5-b) est définie comme sui [30, 24] :

$$f_I(r) = \begin{cases} 0 & r \geq R_c \\ 1 & r \leq R_c \end{cases} \quad (\text{I-16})$$

Où R_c : le rayon du cœur ionique.

I-7-2-c- Modèle de Gauss :

C'est le modèle le plus réaliste, il s'approche de l'expérience c'est-à-dire que ses résultats convergent vers ceux trouvés expérimentalement [13, 28, 34, 36].

Dans ce modèle :

$$f_I(r) = \exp\left(\frac{-r^2}{R_c^2}\right) \quad (\text{I-17})$$

La forme du pseudopotentiel voir (figure I-5-c) est:

$$V_{NL} = A_I \exp\left(\frac{-r}{R_I}\right)^2 \quad (\text{I-18})$$

Avec :

A_I : la profondeur du puits.

R_I : le rayon du cœur ionique.

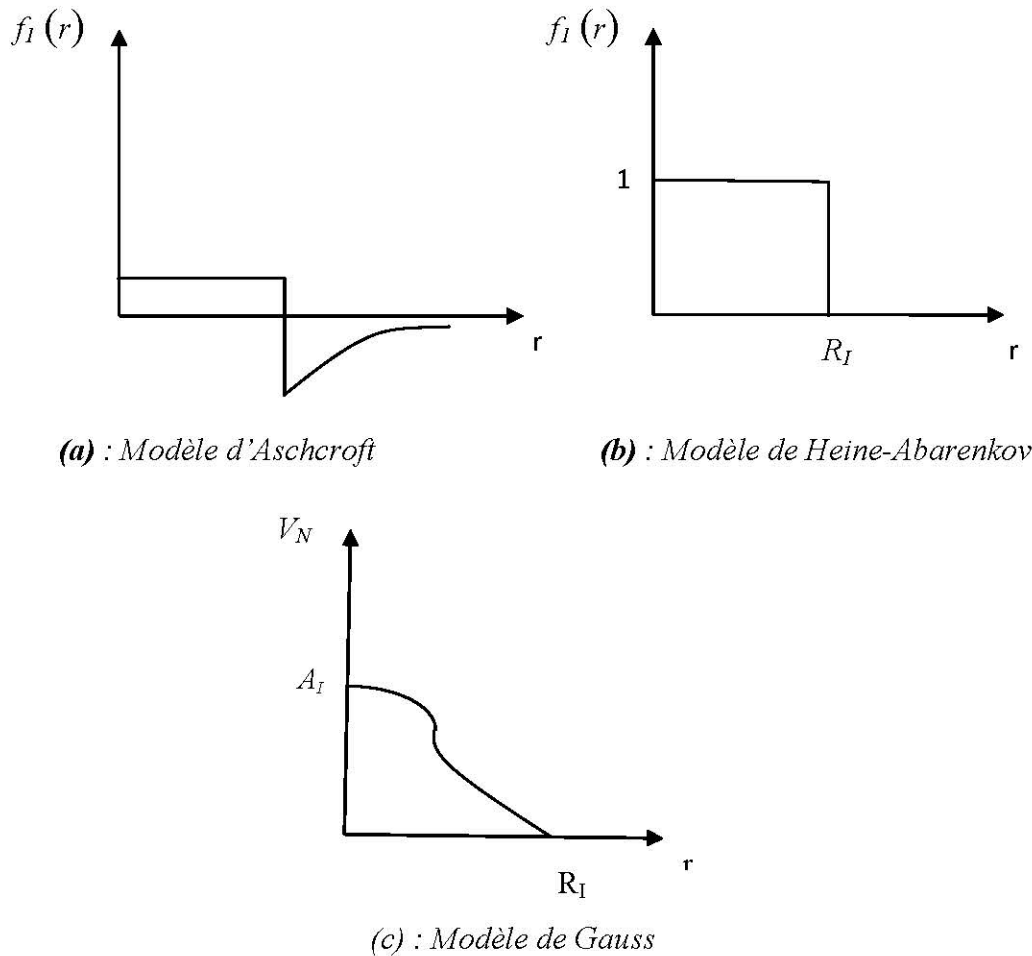


Figure I-5: Les modèles du pseudopotentiel non local.

I.8. La méthode empirique de pseudopotentiel [E.P.M]:

Cette méthode [E.P.M] daté de 1959 utilise des paramètres d'ajustement pour modéliser le potentiel ionique [35].

Elle est très exploitée dans le calcul des structures de bandes des semiconducteurs, elle ne tient pas compte de la dépendance énergétique du pseudopotentiel avec les états du moment angulaire représentant les états du cœur [37]. (On va donc s'intéresser aux électrons de valence dans le cas d'un cristal massif)[38].

C'est une autre variante de la méthode du pseudopotentiel, elle est utilisé pour déterminer les facteurs de forme, les données expérimentales telles que celles obtenues par le spectre de réflexion ou le spectre de la partie imaginaire du constant diélectrique que l'on calcule en partant du spectre de réflexion [32], elle a été appliquée avec succès aux semiconducteurs de structure diamant et de structure Zinc Blende. Dans cette méthode empirique du pseudopotentiel la structure de bandes est

calculé en utilisant seulement quelques termes de $V(\vec{G})$ que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux [39]

L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de formes $V(\vec{G})$ du pseudo potentiel.

$$V_p(\vec{r}) = \sum_{R,r} V_a(\vec{r} - \vec{R} - \vec{r}) \quad (\text{I-19})$$

Où :

\vec{R} : est un vecteur du réseau direct.

\vec{r} : est le vecteur de translation du réseau direct.

Si on étend le potentiel dans le réseau réciproque, il aura la forme suivante:

$$V_p(\vec{r}) = \sum_G V_a(\vec{G}) S(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (\text{I-20})$$

\vec{G} : est un vecteur du réseau réciproque

$V_a(\vec{G})$: est le facteur de forme.

$S(\vec{G})$: est le facteur de structure donné par:

$$S(\vec{G}) = \frac{1}{N_a} \sum_r e^{-i\vec{G}\vec{r}} \quad (\text{I-21})$$

N_a : étant le nombre d'atomes de base.

Dans cette approche le pseudopotentiel d'onde d'un électron de valence est donné par :

$$H_{ps} \psi_{n,k}(r) = E_n(k) \psi_{n,k}(r) \quad (\text{I-22})$$

La fonction d'onde $\psi_{n,k}(r)$ et les valeurs des bandes d'énergie $E_n(k)$ sont les solutions de l'équation :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_p(\vec{r}) \right] \psi_{n,k}(r) = E_n(k) \psi_{n,k}(r) \quad (\text{I-23})$$

$$H_{p,s} = \frac{p^2}{2m} + V_{p,s}(\vec{r}) \quad (\text{I-24})$$

Où :

n: représente l'indice de la bande.

$\psi_{n,k}(r)$: a la forme d'une fonction de Bloch est développée sur la base des fonctions d'ondes planes

:

$$\psi_{n,k}(r) = \sum_m C_m(k) \exp(i(K+G_m)r) \quad (\text{I-25})$$

m : nombre de maille élémentaires dans le solide.

I-8-La procédure de calcul de la méthode E.P.M:

Le calcul se fait suivant l'organigramme de la figure I-6 :

- Dans la première étape nous choisissons convenablement les facteurs de forme de notre matériau.
- on résout l'équation de Schrödinger avec les potentiels construits à l'aide des paramètres introduits (trouvé les énergies propres $E(k)$ et les fonctions d'ondes propres $\psi_{n,k}(\mathbf{r})$).
- Finalement; on fait la comparaison entre nos résultats avec l'expérience si on trouve des résultats on accord avec l'expérience on arrête si non on change les facteurs de forme $V_a(\vec{G})$ jusqu' à trouver des résultats on accord avec l'expérience [35].

I-9-L'ajustement des facteurs de forme :

Les paramètres du pseudopotentiel $V_a(G^2)$ et $V_s(G^2)$ sont déterminés en comparant les gaps d'énergies aux points de hautes symétries avec les données expérimentales des transitions optiques en utilisant la méthode des moindres carrés. Ces paramètres sont variés jusqu'à ce que l'on ait un bon accord avec le nombre maximum possible de transitions optiques (Méthode d'ajustement).

Le pseudopotentiel est défini comme étant une superposition des pseudopotentiels atomiques de la forme suivante [40] :

$$V_p(\vec{r}) = V_L(\vec{r}) + V_{NL}(\vec{r}) \quad (I-26)$$

Où :

V_L : la partie locale du pseudopotentiel.

V_{NL} : la partie non locale du pseudopotentiel.

Dans nos calculs, on néglige les parties non locales et on a considéré les composants de Fourier de $V_L(\vec{r})$ comme des paramètres du pseudopotentiel [41].

$$V_p(\vec{r}) = V_L(\vec{r}) = \sum_G V(\vec{G}) S(\vec{G}) \exp(i\vec{G}\vec{r}) \quad (I-27)$$

$V(\vec{G})$: le facteur de forme.

$S(\vec{G})$: le facteur de structure.

Les composés de Fourier $V(\vec{G})$ sont les paramètres du pseudopotentiel ou les facteurs de formes. Ces derniers ont été tirés de la littérature et ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres

carrés nommée le modèle d'optimisation de Kobayashi et Nara où tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carré de l'écart des gaps d'énergies calculés par la méthode du pseudopotentiel par rapport à ceux trouvés expérimentalement, définit par [42-44]:

$$\delta = \left[\frac{\sum_{i,j}^m (\Delta E_{ij})^2}{m-n} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I-28})$$

δ doit être minimal.

Avec :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}} \quad (\text{I-29})$$

Où :

E_{ij}^{exp} et E_{ij}^{cal} sont les énergies observées expérimentalement et calculées; entre le $i^{\text{ème}}$ état au vecteur d'onde $k_i = k$ et le $j^{\text{ème}}$ état au vecteur d'onde $k_j = k$ dans les m paires choisies (i, j) , n étant le nombre des paramètres du pseudopotentiel empirique.

Les valeurs de départ des facteurs de forme sont améliorées par itération jusqu'à minimiser le δ .

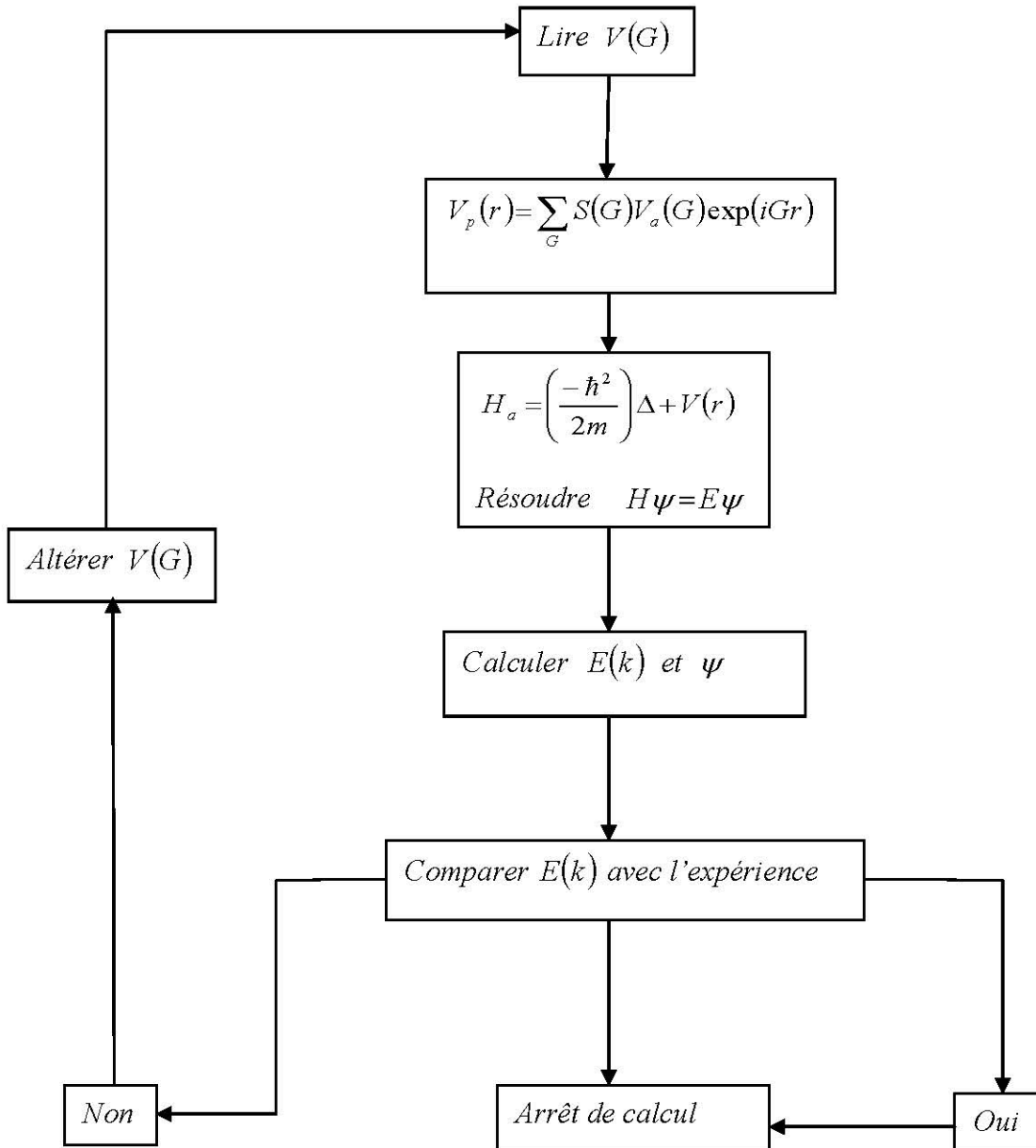


Figure I-6: l'organigramme de la méthode E.P.M

Références

- [1] U. Von Barth, C.D. Gellat, *phys.Rev.B* **12**, 2222 (1980).
- [2] M. Ferhat, B. Bouhafs, A. Zaoui et al, *J. Phys. : condens-Matter.* **10**, 7995 (1995).
- [3] K.Fatima, Thèse de doctorat, université de Metz, (France) (2007).
- [4] W. E. Pickett, *Pseudopotential Methods in Condensed Matter Applications.* Elsevier, Science Publishers.
- [5] D. J. Shadi M. L. Cohn. *J. Phys. Rev. B.* **8**, 5747(1973).
- [6] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot, D. Wolf, *phys. Rev B*, **52**, 12627 (1995).
- [7] H. Hellmann, W. Kassatotschkin, *Acta Physicochim. U.R.S.S.* **5**, 23 (1936).
- [8] J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [9] W. A. Harrison, and S. Ciraci, *Phys. Rev B* **10**, 1516 (1974).
- [10] M. L. Cohen, and J. R. Chelikosky, In *electronic structure and optical proprieties of semiconducteurs*, (Springer series in solide state sciences Ed Springer New-York) (1988).
- [11] N. Bouarissa, R. Bachiri, *Physica B* **322**, 193 (2002).
- [12] J. Yang, Y. Zidon, Y. Shapira, *J. Appl. Phys.* **91**, 703 (2002).
- [13] M. L. Cohen and V. Heine, *Solid State Physics* 24, Eds, H. Enrenreich, F. Seitz and D. Turnbull, Academic press, New-York (1970).
- [14] A. Bechiri, Thèse de doctorat, Université de Constantine, (Algérie) (2006).
- [15] J. C. Phillips and L. Kleinman, *Phys. Rev.* **116**, 287 (1959).
- [16] J. C. Phillips. *Phys. Rev.* **112**, 685 (1958)
- [17] N. Bouarissa, *J. Phys. Chem. Solids* **61**, 109 (2000).
- [18] N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* **72**, 387 (2001).
- [19] N. Bouarissa, *Europ. Phys. J. B* **32**, 139 (2003).
- [20] N. Bouarissa, *Physica B* **399**, 126 (2007).
- [21] L. Hannachi, Thèse de doctorat, Université de Sétif, (Algérie) (2010).
- [22] J. C. Phillips and L. Kleinman, *Phys. Rev.* **116**, 287 (1959).
- [23] D. Brust, *Phys. Rev.* **134**, A1337 (1963);
D. Brust and J. C. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 94 (1962).
- [24] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors.* Berlin, Springer (1988).
- [25] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot, D. Wolf, *phys. Rev B*, **52**, 12627(1995).

- [26] N.W. Aschcroft, Phys. Rev. Lett. **23**, 48 (1966).
- [27] F. Ben Salem, Mémoire de magister, Université de M'Sila, (Algérie) (2004).
- [28] H. Nara and T. Kobayashi, J. Phys. Soc. Japon, **41**,1429 (1976).
- [29] C. S. Wang, B. M. Klein, Phys. Rev B . **24**, 3417(1981).
- [30] I. V. Abarenkov, and V. Heine, Phil. Mag. **13**, 529 (1965).
- [31] W. A. Harrison, Phys. Rev. **136**, A1107 (1964).
- [32] J. Chelikowsky and M. L Cohen Phys. Rev B**14**, 552 (1976).
- [33] W. A. Harrison, « Pseudopotentiels in theory of metals », Benjamin, New York (1966).
- [34] M. Gell and al. Phys. Rev. B**35**, 1196 (1987).
- [35] H. Nara and T. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn. **41**, 1429 (1976).
- [36] H. Nara and A. Morita, J. Phys. Soc. Jpn. **21**, 1852 (1966).
- [37] M. L. Cohen and T. Bergstresser Phys. Rev. **141**, 789 (1966);
M. L. Cohen and T. Bergstresser Phys. Rev. **164**, 1069 (1976).
- [38] T. Eric, Thèse de doctorat, Université Paris-Sud 11, (France) (2012).
- [39] R. Mouici, Mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie) (2012).
- [40] N.Richard, Rapport CEA-R-6603 Actinides et terres rares sous pression: approche pseudopotentiel CEA/DAM. Direction Ile de France (2002).
- [41] F. Benmakhlouf, Thèse de doctorat d'état, université de Constantine (Algérie) (2006).
- [42] A. Mujica, A. Munoz, S. Radescu, R.J. Needs, Phys. Stat. Sol. B, **211**, 345 (1999).
- [43] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci, Tohoku.Univ, **2**, 7 (1993).
- [44] J.M.Baranowski, J.Phys. C, **17**, 6287 (1984).

Chapitre II

Etude des propriétés élastiques

Chapitre II

Etude des propriétés élastiques

II-1 Introduction :

La théorie de l'élasticité traite le comportement des matériaux qui ont la propriété de reprendre leurs dimensions et leurs formes lorsque les forces qui produisent les déformations sont supprimées [1].

La connaissance des propriétés élastiques joue un rôle important en fournissant des informations précieuses sur la stabilité structurale et les propriétés mécaniques d'un matériau. Sa stabilité élastique est représentée non seulement par son module de compressibilité B mais également par ses constantes élastiques C_{ij} ; quantités microscopiques reliant les contraintes aux déformations dans un solide homogène [2].

Le comportement élastique des matériaux (solides homogène ou des structures cristallines) soumis à des forces appliquées est généralement bien décrit par les modèles basés sur une loi de comportement élastique linéaire, parmi lesquels la loi de Hooke [2].

Cette loi permet d'établir assez facilement des relations entre les forces qui sont décrites par des tenseurs appelés tenseurs des contraintes qui détermine la direction des forces et le plan sur le quel elle s'applique, et les réponses en terme de changement relatif en dimension ou en forme appelées déformation, et sont aussi donnés par des tenseurs.

II.2- Tenseurs :

Un tenseur est un opérateur liant dans un même repère deux grandeurs physiques (par exemple u et v) dans la figure (II.1) en un même point d'un espace de dimension d . Ses composantes dans un repère donné ne dépendent que du M [3].

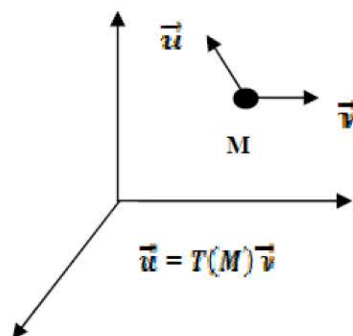


Figure II.1: Tenseur $T(M)$ liant deux grandeurs physiques (u et v) dans un repère donné

Le Rang d'un tenseur caractérise son nombre d'indices :

$T^{(0)}$ Tenseur de Rang 0 : Scalaire à $d^{(0)}$, composante $T(M)$.

$T^{(1)}$ Tenseur de Rang 1 : Vecteur à $d^{(1)}$, composantes $T_i(M)$.

$T^{(2)}$ Tenseur de Rang 2 : Matrice à $d^{(2)}$, composantes $T_{ij}(M)$.

$T^{(n)}$ Tenseur de Rang n : Matrice à $d^{(n)}$, composantes $T_{ij\dots n}(M)$.

II.2.a - Tenseur des contraintes :

La notion de contrainte résulte de la considération des forces intérieures qui naissent dans un objet lorsqu'on le déforme. Une contrainte est la force exercée sur une unité de surface, est donc homogène à une pression et exprimée en pascals (Pa).

Où : (1 Pa=1Newton/m²)

$$\sigma = \frac{F}{S} \quad (\text{II-1})$$

σ : est la contrainte.

F : est la force exercée.

S : est la surface d'un matériau solide.

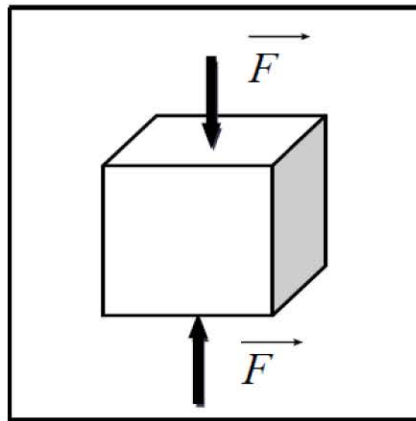


Figure II-2 : Une force s'exerce sur l'unité de surface du solide.

Pour étudier la déformation d'un élément de volume infinitésimal du solide sous l'effet d'une contrainte [4], qui est créée par le milieu qui l'entoure et elle est homogène à la pression et à la dimension d'une force par unité de surface ou d'une énergie par unité de volume. Le tenseur des contraintes σ est une matrice 3×3 symétrique [5]. Elle est définie par $\sigma_{i,j}$

Où $i, j = x, y, z$ [6].

Dans cette notation, le premier indice (i) indique la direction de la force et le deuxième indice (j) indique la normale à la facette sur laquelle s'applique la force (voir figure II.3).

Les éléments σ_{ii} sont appelés contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement à la face. Les éléments $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ avec ($i \neq j$) sont les contraintes tangentielles puisqu'elles agissent sur le plan de la surface, Le tenseur des contraintes est symétrique et s'écrit:

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{II-2})$$

Les neuf composantes du tenseur σ_{ij} de contrainte σ sont représentées sur (la figure II.3)

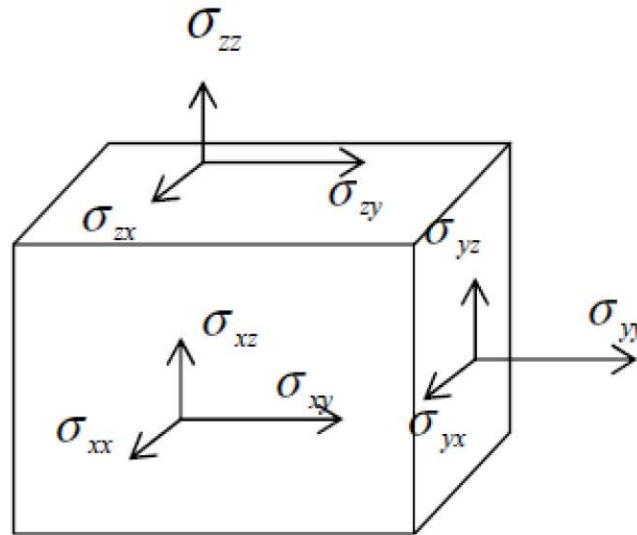


Figure II-3: Les composantes du tenseur de contraintes [7].

Le nombre de composantes indépendantes de la contrainte est réduit de 9 à 6 (tenseur de rang 2 comporte $3^2=9$ composantes, tenseur de rang 1 a $3^1=3$ composantes).

En appliquant à un cube élémentaire la condition qu'il n'y a pas d'accélération angulaire et que le couple total doit être donc nul. Les conséquences de cette condition d'équilibre (cas statique) font que le tenseur des contraintes est symétrique ($\sigma_{yx} = \sigma_{xy}, \sigma_{yz} = \sigma_{zy}, \sigma_{zx} = \sigma_{xz}$) et que ses 9 composantes peuvent en fonction de 6 termes indépendants ($\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$) [8].

II.2.b - Tenseur de déformation :

La déformation élastique est une déformation réversible, L'élasticité linéaire concerne les petites déformations proportionnelles à la sollicitation. Dans cette gamme l'allongement est proportionnel à la force dans le cas d'un étirement, et l'angle est proportionnel au couple dans le cas d'une torsion.

La déformation élastique intervient pour les faibles sollicitations. Si l'on augmente les sollicitations, on change le mode de déformation [9].

Sous l'action de forces appliquées, les corps solides se déforment [7]. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position de repos de l'objet dans laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet (lorsque l'influence externe est un peu. La déformation sera petite et réversible).

En éliminant l'effet externe, les atomes du corps reviennent à sa situation initiale avant la déformation, une telle déformation est appelée déformation flexible. Mais lorsque la contrainte extérieure est grande, la déformation sera grande et au-delà des limites de la flexibilité du corps et donc elle ne sera pas réversible: les atomes du corps ne retournent pas à leurs positions original avant la déformation lorsque on supprime la contrainte externe; une telle difformité est nommé les plastiques.

Pour étudier la déformation d'un élément de volume infinitésimal du solide sous l'effet d'une contrainte, choisissons comme axes de coordonnées les trois axes orthogonaux x_1, x_2, x_3 à l'origine 0 [10]. Comme sur la figure (II-4) après une petite déformation uniforme du solide les axes ont changé d'orientation et de longueur.

Pour la déformation uniforme chaque maille primitive du cristal est déformée de la même façon.

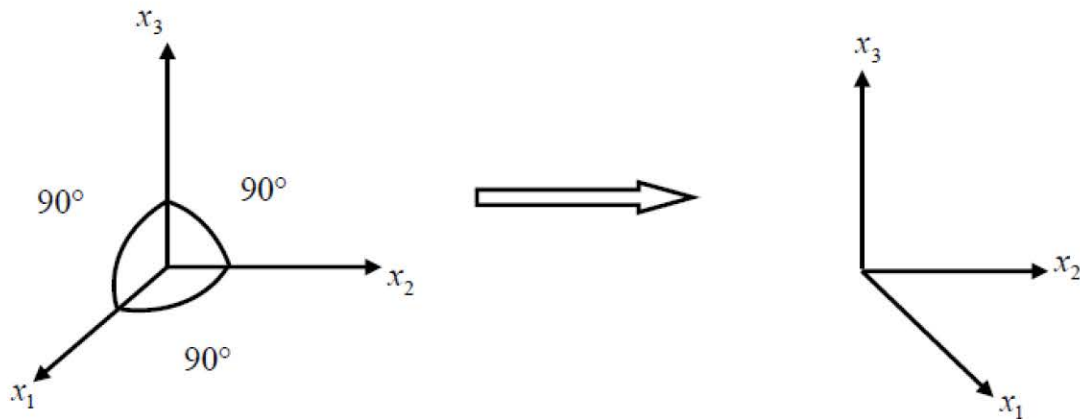


Figure II-4 : Axes des coordonnées avant et après la déformation [7].

On peut définir les vecteurs \vec{r} et \vec{r}' comme suite :

$$\vec{r} = \vec{r}(x_1, x_2, x_3) \tag{II-3}$$

$$\vec{r}' = \vec{r}'(x'_1, x'_2, x'_3) \tag{II-4}$$

Le vecteur de position \vec{r} avant la déformation devient $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{u}$ après la déformation.

\vec{u} : Le déplacement est une fonction pour les coordonnées : $\vec{u} = \vec{u}(x_1, x_2, x_3)$

Et la déformation systématique est définie comme l'état de déformation dans laquelle les coordonnées de déplacement u pour n'importe quel point dans le corps s'adapte linéairement avec les coordonnées de ce point, à savoir que:

$$u_1 = \varepsilon_{11}x_1 + \varepsilon_{12}x_2 + \varepsilon_{13}x_3 \tag{II-5-a}$$

$$u_2 = \varepsilon_{21}x_1 + \varepsilon_{22}x_2 + \varepsilon_{23}x_3 \tag{II-5-b}$$

$$u_3 = \varepsilon_{31}x_1 + \varepsilon_{32}x_2 + \varepsilon_{33}x_3 \tag{II-5-c}$$

Où :

$$u_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} x_j \quad (j=1, 2,3) \quad (\text{II-6})$$

Ou bien :

$$\vec{u} = \vec{\varepsilon} \cdot \vec{r} \quad (\text{II-7})$$

Cela signifie que les constantes de proportionnalité ε_{ij} lient les coordonnées de deux vecteurs, c'est pour cela elles forment un tenseur:

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{II-8})$$

$[\varepsilon_{ij}]$: C'est le tenseur des petits déplacements. Pour connaître les éléments du tenseur des petites déplacements, on étudie la croissance des composées du vecteur des déplacements, de sorte que:

$$u_1 = (x_1, x_2, x_3); u_2(x_1, x_2, x_3); u_3(x_1, x_2, x_3)$$

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{II-9-a})$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{II-9-b})$$

$$\Delta u_3 = \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{II-9-c})$$

ε_{ij} : définie par la formule suivante :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (\text{II-10})$$

Les quantités ε_{ij} ne dépendent pas des valeurs des déplacements sont les composées de tenseur de déformation et les équations (II-9-a), (II-9-b), (II-9-c) s'écrivent comme suit:

$$\Delta u_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} x_j \quad , \quad (i = 1, 2,3) \quad (\text{II-11})$$

Les éléments tensoriels de déformation relient les composées de deux vecteurs avant et après la déformation.

Le tenseur $[\varepsilon_{ij}]$ n'est généralement pas symétrique, il est donc comme n'importe tenseur du seconde ordre qu'on peut l'imaginer comme la somme de deux tenseurs : le première symétrique et

le deuxième est antisymétrique (le tenseur symétrique est caractérisé par $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ et le tenseur antisymétrique est caractérisé par $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji}$ et le fait que $\varepsilon_{ii} = 0$ signifie que:

$$\varepsilon_{ij} = e_{ij} = \omega_{ij} \quad (\text{II-12})$$

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji}) = e_{ji} \quad (\text{II-13})$$

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ji}) = -\omega_{ji} \quad (\text{II-14})$$

e_{ij} : Le tenseur symétrique.

ω_{ij} : Le tenseur antisymétrique.

Nous étudions le tenseur antisymétrique qui se distingue par les caractéristiques suivantes:

$$\omega_{ij} = 0 \quad (i = j) \quad (\text{II-15})$$

$$\omega_{ij} = -\omega_{ji} \quad (\text{II-16})$$

Alors nous obtenons:

$$du_i = \sum_{j=1}^3 \omega_{ij} dx_j \quad (\text{II-17})$$

Avec la combinaison et la multiplication par dx_i nous obtenons :

$$\sum_{i=1}^3 du_i dx_i = \sum_{i,j=1}^3 \omega_{ij} du_i dx_j = 0 \quad (\text{II-18})$$

En appliquant les conditions du tenseur antisymétrique. Le côté gauche de l'équation (II-17) représente le produit scalaire entre le vecteur de déplacement et le vecteur de l'emplacement de vecteur à un point quelconque du vecteur dans le corps qui est une quantité nul. Cela signifie que le vecteur du déplacement dans l'un des points du corps est perpendiculaire avec le vecteur de localisation qui est calculées pour un point fixe 'O' du corps. Aussi on peut dire que le tenseur ω_{ij} est approprié pour le procédé à une rotation pur des points du corps autour d'un axe qui passe par un point du corps 'O'. Pour cela, la partie symétrique de ε_{ij} (qui est e_{ij} qui décrit la déformation) et prend la forme suivante [11]:

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{II-19})$$

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \frac{1}{2}(\varepsilon_{12} + \varepsilon_{21}) & \frac{1}{2}(\varepsilon_{13} + \varepsilon_{31}) \\ \frac{1}{2}(\varepsilon_{21} + \varepsilon_{12}) & \varepsilon_{22} & \frac{1}{2}(\varepsilon_{23} + \varepsilon_{32}) \\ \frac{1}{2}(\varepsilon_{13} + \varepsilon_{31}) & \frac{1}{2}(\varepsilon_{32} + \varepsilon_{23}) & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{II-20})$$

Et le déplacement du à la déformation subit à la relation suivante:

$$\Delta u_i = \sum_{j=1}^3 e_{ij} \Delta x_j \quad (\text{II-21})$$

Les composés diagonaux du tenseur $[e_{ij}]$ et des composés diagonaux du tenseur de déplacement petit $[e_{ij}]$ ont la même signification qui décrit dilatation et longitudinal. Tandis que les composés non diagonaux décrivant le déplacement angulaire [9].

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -\Delta p & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta p & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta p \end{bmatrix} \quad (\text{II-22})$$

$$\sigma_{ij} = -\Delta p \delta_{ij} \quad (\text{II-23})$$

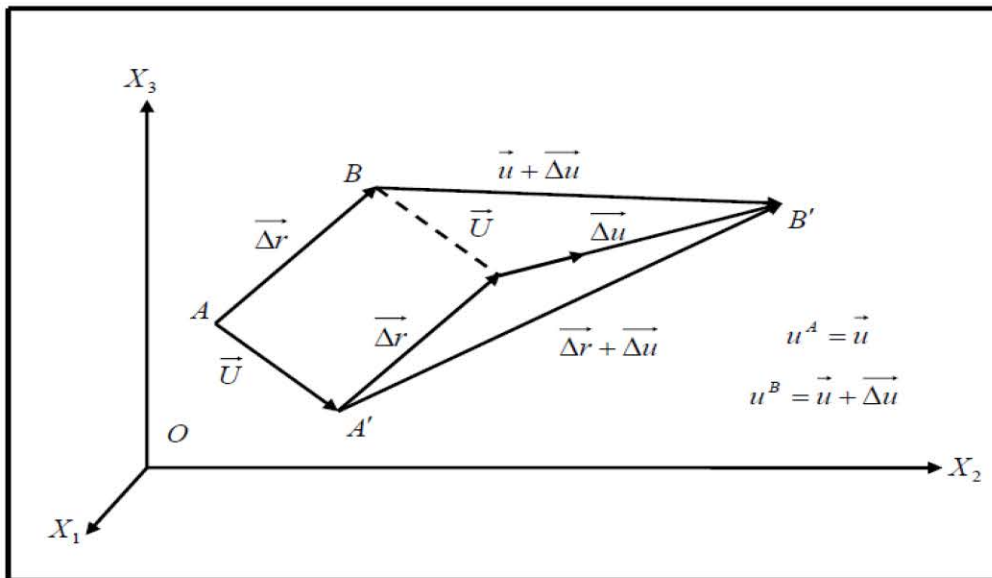


Figure II-5 : L'élément tensoriel de déformation [9].

II.2. c - Tenseur de dilatation :

La dilatation c'est l'augmentation relative de volume associée à la déformation, elle est négative dans le cas d'une pression hydrostatique [7].

Sous l'influence de cette contrainte, le volume du parallélépipède (échantillon) va changer de la quantité $V = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$ à $V' = \Delta x'_1 \Delta x'_2 \Delta x'_3$ (en supposant qu'aucun changement des angles entre les caractères applicables à coordonnées cartésiennes). Comme e_{ii} et la déformation relative longitudinale sous l'extension [12], alors :

$$e_{ii} = \frac{\Delta x'_i - \Delta x_i}{\Delta x_i} \tag{II-24}$$

$e_{ii} < 0$: Dans le cas de la compression.

Δx_i devient $\Delta x'_i$ après la déformation alors nous trouvons le nouveau volume après la déformation :

$$V' = \Delta x'_1 \Delta x'_2 \Delta x'_3 = V(1 + e_{11})(1 + e_{22})(1 + e_{33}) \tag{II-25}$$

On peut aussi définir le nouvel volume comme suit [7] :

$$V' = \begin{bmatrix} 1 + \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} & 1 + \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & 1 + \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = 1 + e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \tag{II-26}$$

Nous avons négligé les produits de deux composantes de déformation (terme du deuxième ordre).

La dilatation δ est donc donnée par la relation suivante [12] :

$$\delta = \frac{\Delta V}{V} = \frac{V' - V}{V} = e_{11} + e_{22} + e_{33} = \sum_{i=1}^3 e_{ii} \tag{II-27}$$

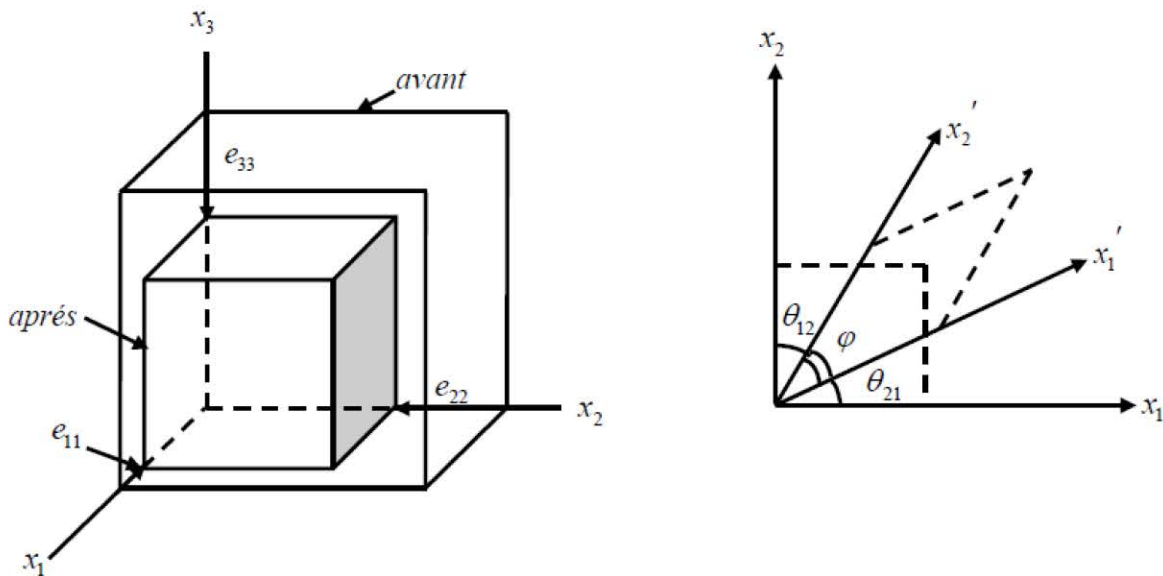


Figure II-6 : Le changement du volume de l'échantillon sous l'effet d'une contrainte [11].

Il est possible de mettre le tenseur de déformation $[e_{ij}]$ diagonale en choisissant des coordonnées appropriées appelées alors les axes principaux:

$$\begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & e^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & e^{(3)} \end{bmatrix} \quad (\text{II-28})$$

Où $e^{(1)}, e^{(2)}, e^{(3)}$ sont les coefficients de déformation principaux.

Nous savons que la réaction du cristal qui décrit par le tenseur de la déformation ne représente pas une propriété physique qui s'y rattache seul. Cette réaction ne dépend pas du cristal et de l'influence externe. Cela signifie que le tenseur de la déformation est cyclique. Et quand la déformation est irrégulière toutes les relations ci-dessus valables dans un seul point du corps, c'est-à-dire que les relations ci-dessus dépendent de l'emplacement point d'un corps [13].

II-3- Relation contrainte-déformation :

Deux tenseurs d'ordre 2 peuvent être définis : le tenseur des contraintes σ_{ij} et le tenseur des déformations ε_{ij} . Ils sont tous les deux symétriques, c'est à dire que $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ et $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$.

En théorie de l'élasticité linéaire, il existe une relation linéaire entre σ_{ij} et ε_{ij} donnée par la loi de Hooke généralisée [14].

II-3-a- La loi de Hooke généralisée:

La loi de Hooke est une loi de comportement des solides soumis à une déformation élastique de faible amplitude. Elle a été énoncée par Robert Hooke, par la phrase en latin (expériences datant de 1675). Ce qui signifie « *telle extension, telle force* », ou bien en termes modernes « *l'allongement est proportionnel à la force* ». Hooke désirait obtenir une théorie des ressorts, en soumettant ces derniers à des forces croissantes successives. De sa loi deux aspects sont importants:

1. La linéarité.
2. L'élasticité.

Ces deux aspects ne sont pas identiques, la linéarité exprime « l'allongement est proportionnel à la force », l'élasticité exprime que cet effet est réversible et permet donc de revenir à l'état initial tel un ressort soumis à de faibles forces. L'élasticité a une limite, qui est indépendante de la notion de linéarité, Hooke n'a considéré que la phase élastique et linéaire, donc proportionnelle et réversible.

Vu l'hypothèse des petites perturbations, on peut aussi supposer que les tensions s'expriment comme une fonction linéaire des déformations. Cette fonction est de plus homogène puisque les tensions doivent s'annuler avec les déformations si l'état naturel est un état sans contrainte. On supposera donc que la loi d'état qui lie les tensions aux déformations s'écrit:

$$\sigma = C \cdot \varepsilon \quad (\text{II-29})$$

La théorie macroscopique des propriétés élastiques des solides est décrite en détail dans la notation de tenseur par J. F. Nye [15, 16], d'après cette théorie, on trouve que le tenseur des

déformations d'un cristal peut être relié au tenseur des contraintes par une loi linéaire. On définit ainsi un tenseur de rang 4, \mathbf{C} de composantes C_{ijkl} où i, j, k et l varient de 1 à 3 tel que [17]:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1,3} \sum_{l=1,3} c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{II-30})$$

La relation (II-29) est appelée loi de Hooke généralisée C_{ijkl} est un tenseur d'ordre 4 appelé tenseur de rigidité élastique et il définit les constantes élastiques du matériau. Le nombre de combinaisons possibles de quatre indices $ijkl$ est de $3^4 = 81$. Dans le cas le plus général et par raison de symétrie de σ_{ij} et de ε_{kl} et en appliquant la relation de Maxwell $C_{ijkl} = C_{klij}$ [14], les éléments C_{ijkl} se réduisent à 21 éléments indépendants. En outre, la symétrie du solide cristallin réduit notablement ce nombre [18].

Les symétries des tenseurs de contraintes et de déformations font que ce tenseur de rang 4 C_{ijkl} se ramène généralement à une matrice $C_{\alpha\beta}$ 6x6 (notation de Voigt [16]) [17]:

Notation tensorielle	xx	yy	zz	yz	xz	xy
Notation matricielle	1	2	3	4	5	6

Le tenseur des contraintes devient un vecteur σ_α [17]:

$$\alpha=1,2,\dots,6 \quad \sigma \rightarrow \sigma_\alpha$$

Le tenseur des déformations devient un vecteur ε_β :

$$\beta=1,2,\dots,6 \quad \varepsilon \rightarrow \varepsilon_\beta$$

La loi de Hooke s'exprime alors [17]:

$$\sum_{\beta=1}^6 C_{\alpha\beta} \varepsilon_\beta \quad (\text{II-31})$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{21} & C_{31} & C_{41} & C_{51} & C_{61} \\ C_{21} & C_{22} & C_{32} & C_{42} & C_{52} & C_{62} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{43} & C_{53} & C_{63} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{54} & C_{64} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{65} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{II-32})$$

Les $C_{\alpha\beta}$ représentent les composantes du tenseur des constantes élastiques qui s'est réduit maintenant à une matrice 6x6, possédant 36 coefficients. Des considérations sur le travail et l'énergie permettent de ramener ce nombre à 21 (cette matrice de 6x6 éléments est symétrique) [17].

La symétrie du cristal diminue encore le nombre de paramètres indépendants. Dans les systèmes cubiques, il n'y en a plus que trois éléments indépendants non nuls : C_{11}, C_{12} et C_{44} . La matrice [C] s'écrit dans ce cas [17, 19-21].

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{II-33})$$

II-4-Densité d'énergie élastique (U):

Quand il y a une force F proportionnelle au déplacement x (par exemple $F=kx$), le travail nécessaire à un déplacement x est $kx^2/2$. Donc la densité d'énergie élastique U dans les cas où la loi de Hooke s'applique est une fonction quadratique des déformations :

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^6 \sum_{\beta=1}^6 \tilde{C}_{\alpha\beta} e_{\alpha} e_{\beta} \quad (\text{II-34})$$

Les indices de 1 jusqu'à 6 sont définis par les expressions suivantes :

$$xx = 1 ; yy = 2 ; zz = 3 ; yz = 4 ; zx = 5 ; xy = 6.$$

Nous verrons dans cette équation la relation entre \tilde{C} et C :

$$C_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\tilde{C}_{\alpha\beta} + \tilde{C}_{\beta\alpha}) = C_{\beta\alpha} \quad (\text{II-35})$$

Les relations contrainte-déformation contiennent la combinaison (II-35). Il en découle que les modules d'élasticité sont symétriques. Les 36 modules d'élasticité sont réduits à 21.

Pour obtenir les composantes de la contrainte en dérivant la densité d'énergie élastique par rapport aux composantes de déformation associées. Ce résultat découle de la définition de l'énergie potentielle.

La relation de contrainte en fonction de la densité d'énergie :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\partial U}{\partial e_{\alpha\beta}} ; \alpha, \beta = 1, 2, 3, \dots, 6 \quad (\text{II-36})$$

La densité d'énergie élastique dans le cas particulier d'un cristal de symétrie cubique est donnée par :

$$U = \frac{1}{2} C_{11} (e^2_{xx} + e^2_{yy} + e^2_{zz}) + \frac{1}{2} C_{44} (e^2_{yz} + e^2_{zx} + e^2_{zy}) + C_{12} (e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy}) \quad (\text{II-37})$$

Il ne peut y avoir d'autres termes quadratiques, c'est-à-dire que les termes

$$(e_{xx} e_{xy} + \dots), (e_{yz} e_{zx} + \dots), (e_{xx} e_{yz} + \dots) \quad (\text{II-38})$$

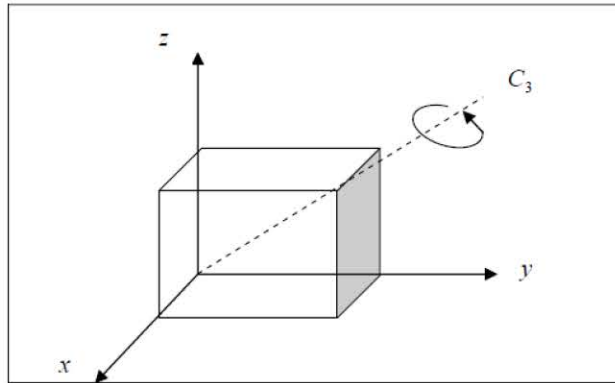


Figure II-7: Une rotation de $2\pi/3$ autour de l'axe numéroté 3 change $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$ [7].

Parmi les éléments de symétrie d'une structure cubique quatre axes de symétrie d'ordre 3, ces axes sont colinéaires aux directions [111] figure (II-7). L'effet d'une rotation de

$2\pi/3$ autour de ces 4 axes est d'échanger les axes suivant les règles :

$$x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x ; -x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow -x \tag{II-39}$$

$$x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow x ; -x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow -x.$$

En fonction de l'axe de rotation choisi, la densité de l'énergie U est évidemment un invariant dans ces rotations. On peut appliquer ce rotation par exemple a:

$$e^2_{xx} + e^2_{yy} + e^2_{zz} \rightarrow e^2_{yy} + e^2_{zz} + e^2_{xx} \tag{II-40}$$

Et aussi les deux autres termes de l'équation (II-37) se transforment de manière analogue, donc U est invariant dans les rotations considérées ici, mais chacun des termes d'expression (II-36) est une fonction impaire d'un ou plusieurs indices.

Parmi l'ensemble des rotations de (II-39) on peut trouver une rotation qui change le signe de ces termes parce qu'on a comme un exemple $e_{xx} = e_{x(-y)}$ Les termes (II-38) ne sont pas invariants dans les rotations requises et ne peuvent donc apparaître dans l'expression de la densité de l'énergie U .

On peut vérifier l'exactitude de l'équation (II-37) :

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial u}{\partial e_{ij}} \tag{II-41-a}$$

On calcule comme un exemple σ_{xx} :

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial}{\partial e_{xx}} \left[\frac{1}{2} C_{11} (e^2_{xx} + e^2_{yy} + e^2_{zz}) + \frac{1}{2} C_{44} (e^2_{yz} + e^2_{zx} + e^2_{zy}) + C_{12} (e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy}) \right] \tag{II-41-b}$$

$$\sigma_{xx} = C_{11} e_{xx} + C_{12} (e_{yy} + e_{zz}) \tag{II-41-c}$$

Après la comparaison entre le tenseur de contrainte dans la matrice (II-32) et la relation

(II-41-c) on obtient :

$$C_{12} = C_{21} \quad \text{et} \quad C_{14} = C_{15} = C_{16} = 0 \quad (\text{II-42})$$

De plus :

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial u}{\partial e_{ij}} \quad (\text{II-43-a})$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\partial}{\partial e_{xy}} \left[\frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{zy}^2) + C_{12} (e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy}) \right] \quad (\text{II-43-b})$$

$$\sigma_{xy} = C_{44} e_{xy} \quad (\text{II-43-c})$$

En comparant avec (II-32), nous obtenons :

$$C_{61} = C_{62} = C_{63} = C_{64} = C_{65} = 0 \quad ; \quad C_{66} = C_{44} \quad (\text{II-44})$$

A partir l'équation de la densité d'énergie le tenseur de la contrainte s'écrit à la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{II-45})$$

Pour un cristal cubique, les modules d'élasticité sont définis en fonction des constantes d'élasticité [7]:

$$C_{44} = -\frac{1}{S_{44}} \quad ; \quad C_{11} - C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1} \quad ; \quad C_{11} + 2C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1} \quad (\text{II-46})$$

II-5- Les méthodes de calcul des propriétés élastiques:

II-5-1- Le calcul des constantes élastiques:

L'ajustement des facteurs de forme, nous a permis de calculer la polarité α_p définie par Vogl [22]:

$$\alpha_p = -\frac{V_a(3)}{V_s(3)} \quad (\text{II-47})$$

Où $V_s(3)$ et $V_a(3)$ sont les facteurs de formes symétrique et antisymétrique à $G(111)$, respectivement. Plusieurs approches ont été envisagées pour calculer les constantes élastiques des semi-conducteurs.

Les constantes élastiques C_{11}, C_{12} sont calculées en utilisant les interactions covalentes et se chevauchent dans les composés de liaison tétraédrique et amélioré la description par Baranowski [23]:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \frac{\hbar^2}{m} \left[4.37(5 + \lambda)(1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} - 0.6075(1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (\text{II-48})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \frac{\hbar^2}{m} \left[4.37(3 - \lambda)(1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} + 0.6075(1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (\text{II-49})$$

d : il représente la distance entre les plus proches voisins :

$$d = \frac{\sqrt{3}}{4} a \quad (\text{II-50})$$

a : Le paramètre du réseau, qui est calculé par la relation (II-50) pour les structures zinc blende

La valeur de λ : $\lambda = 0.738$ [11].

La constante élastique C_{44} est obtenue avec le modèle de champ de force de la valence [24]:

$$C_{44} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (\text{II-51})$$

II-5-2-Le module de compressibilité:

Le module de compressibilité B est la constante de proportionnalité entre la pression hydrostatique p et la variation relative de volume.

Pour un cristal cubique isotrope, le module de compressibilité est lié aux constantes C_{ij} suivant l'équation [24]:

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{II-52})$$

II-5-3-Les constantes des forces:

Les constantes des forces α et β sont les paramètres de constante de forces d'élongation, et de recourbement respectivement. Les relations de α et β sont donné par Verma [24] comme suit :

$$\alpha = \frac{|A(Z_1 Z_2)^S|}{d^3} \quad (\text{II-53})$$

$$\beta = \frac{|V(Z_1 Z_2)^5|}{d^3} \quad (\text{II-54})$$

Où : A, S, B et V : sont des constantes donné par les valeurs suivantes :

$A=410$ et $S=0.2$

$V=17.6$ et $B=0.85$

Z_1Z_2 : sont les charges ioniques et cationiques, respectivement. Dans les semi-conducteurs (III-V) sa valeur est $Z_1Z_2 = 9$.

II-5-4-Le Module de cisaillement (G):

Module de cisaillement ou module de glissement ou encore module de coulomb G est une grandeur physique propre à chaque matériau .C'est la constante qui relie la contrainte de cisaillement et la déformation pour un matériau élastique isotrope. Le module de cisaillement définit par la relation suivante [25]:

$$G = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2} \quad (\text{II-55})$$

II-5-5-Le Module de Young (Y):

C'est la constante de proportionnalité entre la contrainte qu'un matériau subit et sa déformation unitaire, c'est une constante propre à chaque matériau. Il est donné comme suite [26] :

$$Y = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (\text{II-56})$$

Ce module dépend de : [7]

- L'énergie des liaisons entre atomes.
- La nature des forces élastiques de rappel.
- La structure du matériau (amorphe, cristallin).

II-5-6- Le coefficient de poisson :

Ce coefficient noté ν permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué. On définit le coefficient de Poisson comme étant :

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{II-57})$$

II-5-7- Le facteur d'anisotropie A :

Le facteur d'anisotropie (A) a une valeur critique (A=1) qui sépare les matériaux isotropiques où ($A < 1$) et anisotropiques où ($A > 1$) [27], est donné par la relation suivante [28].

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (\text{II-58})$$

II- 5-8-Le facteur d'ionicité f_i :

Le facteur d'ionicité est lié à la répartition de la charge entre les constituants et il est définit par Pauling comme une différence d'électronégativité entre les deux constituants d'un composé binaire [29]. Le calcul de facteur d'ionicité est défini par la relation suivante :

$$f_i = \left(1 - \left(1 - \alpha_p^2 \right)^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II-59})$$

II-5-9-Le paramètre de Kleinman ξ :

Pour le système cubique le paramètre de déformation interne ξ peut être aussi exprimé comme une combinaison des deux constantes élastiques C_{11} et C_{12} qui est donnée par [23, 24].

$$\xi = \frac{(C_{11} + 8C_{12})}{(7C_{11} + 2C_{12})} \quad (\text{II-60})$$

Références

- [1] V. Trinite, Thèse de Doctorat en physique, Ecole Polytechnique, France (2006).
- [2] K.A. Gschneidner Jr, A. Russell, A. Pecharsky, et al, *Nat. Mater.* **2**,587 (2003).
- [3] J. R. Barber, *Elasticity*, 2nd edition, (Kluwer Academic Publishers, New York) (2004). [4] .M. Benhamida, Thèse de doctorat, université de Sétif 1 Sétif (Algérie) (2014).
- [5]. R. E. Newnham, *Properties of Materials, Anisotropy, Symmetry, Structure*, (Oxford University Press) (2005).
- [6] L. Landau, E. Lifchitz, *théorie de l'élasticité*, Tom VII, Mir Moscou (1967).
- [7] C. Kittel, *physique de l'état solide*, Dunod, 7ème édition (1998).
- [8] D. Maillard, polycopies du cours vibrations et ondes, chapitre IX, université Paris Diderot, Paris7, (France) (2007).
- [9] L. Bendjaballah, Mémoire de Magister, Université de Constantine, (Algérie) (2010).
- [10] Daniel Royer, *Ondes élastiques dans les solides*. Masson (1996).
- [11] J. M. Baranowski, *J. Phys. C*,**17**, 6287 (1984).
- [12] H. Zouai, Mémoire de master, université de Tébessa, (Algérie) (2012).
- [13] A. S. Verma, B. K. Sarkar, V. K. Jindal, *Physica B*, **405**, 1737 (2010).
- [14] E. Dieulesaint, D. Royer. *Ondes élastiques dans les solides. Application au traitement du signal*. Ed. Masson, Paris **6**, 407 (1974).
- [15] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals*, (Clarendon, Oxford) (1972).
- [16] J. F. Nye, *Physical Properties of Cristal*, (Oxford University Press, Oxford) (1957)
- [17] N. Labгаа, Thèse de Doctorat en physique du solide, Université Ferhat Abbas-Sétif (2011).
- [18] P. Pavlov, A. Khokhlov. *Physique du solide*. Ed. Mir, Moscou, 416 (1989).
- [19] S. Adachi, *Physical properties of III-V semiconductor compounds* (John Wiley & Sons, New York) (1992).
- [20] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, (John Wiley & Sons, New York) (2005).
- [21] M. Grundmann, *The Physics of Semiconductors* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg) (2006).
- [22] P. Vogl, *J. Phys C*, **11**,251 (1978).
- [23] E. Schreiber, O.L.Anderson and N. Soga, "Elastic Constants and their Measurement". Mc Graw-Hill, New York (1973).
- [24] A. S. Verma, B. K. Sarkar, V. K. Jindal, *Physica B*, **405**, 1737 (2010).
- [25] M. Levinshtein, Rumyantsev and M. shur (EdS), *Hand-book Series on Semiconductors parameters*, Vol.2, World Scientificpbl. CO, Singapore (1999).
- [26] Z. Tian, Thèse de doctorat, Université de Martin- Luther, Halle-Wittenberg, (Germany) (2008).

- [27] A. Authier, International Tables for Crystallography, Volume D, Physical Properties of Crystal, First Edition (2003).
- [28] Paresh S. Vyas, Thèse de doctorat, Université de Sardar Patel (2012).
- [29] S. Yousfi, Mémoire de magister, Université de M'Sila, (Algérie) (2004).
- [30] W.A. Harrison, Electronic Structure and Properties of Solids, (Dover, New York) (1989).
- [31] L. Bing, L. R. Feng, Y. Yong, and Y. X. Dong, Chinese. Phys. B. **19**(7), 076201 (2010).

Chapitre III

Résultats et Discussions

Chapitre III

Résultats et Discussions

III -1- Introduction

Les semiconducteurs présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés. Ces matériaux sont principalement utilisés en microélectronique pour des circuits intégrés, dans les cellules photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes [1].

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée sur la figure III-1. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de la III^{ème} colonne, et l'autre des atomes de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev [2-5].

Le tableau III-1 regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés [6].

On peut obtenir un semiconducteur si la somme des électrons des deux espèces est égale à 8 électrons [7].

Tableau III-1 : représentation simplifiée du tableau périodique de Mendeleïev

III		IV		V	
5	10,8	6	12,01	7	14,01
B		C		N	
Bore		Carbone		Azote	
13	26,98	14	28,08	15	30,97
Al		Si		P	
Aluminium		Silicium		Phosphore	
31	69,72	32	72,61	33	74,92
Ga		Ge		As	
Gallium		Germanium		Arsenic	
49	114,82	50	118,71	51	121,25
In		Sn		Sb	
Indium		Etain		Antimoine	

Par exemple :

- Ga : Le nombre d'électron de valence est 3 électrons.
- Sb : Le nombre d'électron de valence est 5 électrons.

Donc : $Ga + Sb = GaSb$: est un semiconducteur car la somme des électrons des deux espèces (Ga et Sb) est égale à 08 électrons.

L'intérêt pratique des semiconducteurs III-V est considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne.

En général les alliages semiconducteurs ternaires sont caractérisés par la présence du coefficient stœchiométrique x .

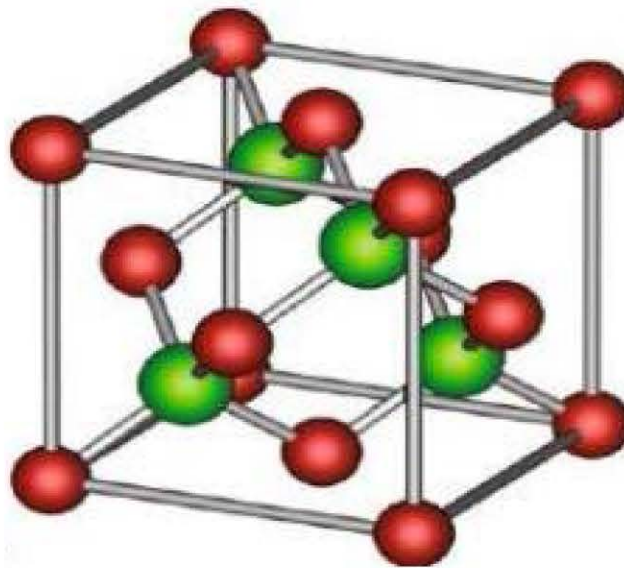


Figure III-1 : Réseau cristallin dans la structure zinc blende

III -2- Les avantages des semiconducteurs III-V [8]:

Les principaux avantages des semiconducteurs III-V sont les suivants :

- ❖ Leur propriété semi-isolant (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.
- ❖ Leur résistance aux radiations.
- ❖ Leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- ❖ Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- ❖ Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHz à plus de 100 GHz.

Plusieurs méthodes théoriques ont été développées pour l'étude des propriétés physiques et chimiques des matériaux. Cependant la méthode des pseudopotentiels empirique reste la méthode la plus simple qui offre les résultats les plus compatibles à l'expérience [9].

Dans nos calculs, nous avons utilisés la méthode des pseudopotentiels empirique local (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui introduit l'effet du désordre compositionnel et combinée avec le model des orbitales liées de Harrison.

Elle est utilisée pour étudier les propriétés élastiques telle que les constants élastiques, les modules compressibilité, de Young, de cisaillement ...etc, Ces propriétés sont influencées par la variation de la concentration 'x' de l'Aluminium.

III-3- L'approximation du cristal virtuel (VCA) :

Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques des alliages ternaires, tel que l'approche de potentiel cohérent (CPA), l'approche de la matrice t-moyenne (ATA) et l'approche de cristal virtuel VCA [10] que nous avons utilisé dans nos calculs.

L'approche du cristal virtuel VCA (Virtual-Crystal Approximation) considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique monoatomique (virtuel) avec un potentiel atomique moyen [11]. Dans la V.C.A on considère que les distorsions sont suffisamment faibles (théorie de perturbation du premier ordre). Pour préserver la structure de bande du cristal parfait, ce qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Ce modèle prévoit une variation linéaire des principaux paramètres dans l'alliage. En particulier, le potentiel cristallin est défini par interpolation linéaire entre ceux des composants constituant le cristal [12].

$$V(x) = xV_{AC} + (1-x)V_{BC} \quad (\text{III-1})$$

L'hamiltonien considéré dans la VCA est donné par :

$$H(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{III-2})$$

III-4- Approximation du cristal virtuel Améliorée (VCAA):

Le cristal ternaire $A_x B_{1-x} C$ est composé des molécules AC avec une fraction molaire x et des molécules AB avec une fraction (1-x). Ainsi, la propriété physique peut être représentée comme une simple interpolation analytique des propriétés de ses composés binaires AC et BC [13]. La VCA améliorée fait d'autres suppositions pour la dépendance de la concentration "x". Elle suppose que les sites du réseau sont occupés par des molécules virtuelles AC ou BC ayant l'énergie potentielle V_{VC} . La constante de réseau $a(x)$ de l'alliage ternaire sera donné par la loi de Vegard [14] :

$$a(x) = xa_{AC} + (1-x)a_{BC} \quad (\text{III.3})$$

Pour $Al_xGa_{1-x}Sb$:

$$a(x) = xa_{AlSb} + (1-x)a_{GaSb} \quad (\text{III.4})$$

Où a_{AC} : est la constante de réseau de composé AC.

a_{BC} : est la constante de réseau de composé BC.

Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel du au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système devient

$$V(r) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (\text{III-5})$$

$$V(r) = V_{VCA} - p(x(1-x))^{1/2} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{III-6})$$

V_{VCA} : potentiel périodique virtuel du cristal.

$V_{dés}$: potentiel non périodique, il est dû à l'effet du désordre du cristal.

p : le paramètre ajustable.

L'équation (III-6) peut être écrite sous une forme plus étendue

$$V(r) = xV_{AC}(r) + (1-x)V_{BC}(r) - p[x(1-x)]^{1/2} (V_{AC} - V_{BC}) \quad (\text{III-7})$$

Sous une forme plus condensée, en termes de séries de Fourier, V(r) devient [15,16] :

$$V(r) = \sum_G V(G) S(G) \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) \quad (\text{III-8})$$

Avec V(G) est le facteur de forme donné par [15] :

$$V(G) = xV_{AC}(G) + (1-x)V_{BC}(G) - p[x(1-x)]^{1/2} [V_{AC}(G) - V_{BC}(G)] \quad (\text{III-9})$$

$V_{AC}(G)$ et $V_{BC}(G)$ sont les facteurs de formes des composés AC et BC respectivement de l'alliage ternaire $A_xB_{1-x}C$.

Ces facteurs de formes ont été utilisés pour le calcul des constantes élastiques de l'alliage ternaire semiconducteur $Al_xGa_{1-x}Sb$ en faisant varier la valeur du paramètre p jusqu'à avoir un bon accord avec les valeurs expérimentales. La valeur de p dans notre étude est égal à (p = 0.098173) correspondant à un bowing optique expérimental (c=0.044) les facteurs de forme de cet alliage sont calculés selon l'expression :

$$V_{Al_xGa_{1-x}Sb} = xV_{AlSb}(G) + (1-x)V_{GaSb}(G) - p[x(1-x)]^{1/2} [V_{AlSb}(G) - V_{GaSb}(G)] \quad (\text{III-10})$$

Les facteurs de formes du pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques et aussi les paramètres du réseau des composés binaires semi-conducteurs *AlSb* et *GaSb* dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau III-2.

Tableau III-2: Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs *GaSb* et *AlSb* dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en ($^\circ A$).

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau a
	V_S (3)	V_S (8)	V_S (11)	V_A (3)	V_A (4)	V_A (11)	
<i>AlSb</i>	-0.233314	0.068246	0.02599	0.057	0.058960	0.016475	11.5946 (u.a)
							6.1355 ($^\circ A$)
<i>GaSb</i>	-0.195373	0.0005	0.045073	0.040776	0.03	0.000	11.5162 (u.a)
							6.09403 ($^\circ A$)

III-5-Les propriétés élastiques de l'alliage semiconducteur $Al_xGa_{1-x}Sb$

Les propriétés élastiques définies la capacité d'un matériau à subir les contraintes à la limite d'élasticité et regagner la forme initiale [17].

Des études expérimentales [18 ,19] et théoriques [21-22] ont été effectuées pour comprendre les propriétés élastiques de l'alliage ternaire semiconducteur $Al_xGa_{1-x}Sb$ qui est composé des binaires *AlSb* et *GaSb* ces deux binaires forment une bonne hétérostructure, car ils possèdent des paramètres de maille presque identique [23].

On peut utiliser les informations concernant les propriétés élastiques pour comprendre le type de liaison atomique, le module de compressibilité peut être aussi utilisé pour prédire les forces en absence d'imperfection.

III-5-1- Les constantes élastiques:

Les constantes élastiques C_{ij} sont des grandeurs macroscopiques reliant dans les solides homogènes, les contraintes aux déformations. On utilise l'approche de Baranowski pour calculer les constantes élastiques et voir l'effet de la concentration x de l'Aluminium [25].

Nos résultats concernent les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} pour les composés binaires *AlSb*, *GaSb* et leurs alliages ternaires $Al_xGa_{1-x}Sb$, pour les deux cas (VCA et $VCAA$) sont indiqués dans le tableau III-3 qui contient également les données expérimentales et théoriques disponibles pour la comparaison. On voit que nos valeurs calculées pour C_{11} , C_{12} sont en bon accord avec les résultats rapportés dans les Réfs [20, 21, 30,31], aussi il y'a un bon accord entre nos calculs pour C_{44} et ceux rapportés dans les Réfs [25-29, 30,32 ,33].

Tableau III-3: Les constants élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dyne/cm²) de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$.

Matériaux	Constants élastiques (10^{11} dyne/cm ²)									
	C_{11}			C_{12}			C_{44}			
	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres	
GaSb	9.43285	8,838 ^(a)	9,08 ^(c)	4.06035	4,027 ^(a)	3,91 ^(c)	3.81547	4,320 ^(a)	4,19 ^(c)	
		8.68 ^(b)	8,834 ^(d)		4.023 ^(b)	4,023 ^(d)		4,322 ^(d)		
$Al_{0,1}Ga_{0,9}Sb$	9.37599*	-	-	4.03652*	-	-	3.79222*	-	-	
	9.3837**			4.03965**			3.79541**			
$Al_{0,3}Ga_{0,7}Sb$	9.26467*	-	-	3.98983*	-	-	3.74673*	-	-	
	9.27593**			3.99441**			3.75139**			
$Al_{0,5}Ga_{0,5}Sb$	9.15649*	-	7.723 ⁽ⁿ⁾	3.94443*	-	3.33 ⁽ⁿ⁾	3.70253*	-	3.572 ⁽ⁿ⁾	
	9.16821**			3.94919**			3.70738**			
$Al_{0,7}Ga_{0,3}Sb$	9.05135*	-	-	3.90028*	-	-	3.65959*	-	-	
	9.06158**			3.90443**			3.66382**			
$Al_{0,9}Ga_{0,1}Sb$	8.94915*	-	-	3.85733*	-	-	3.61786*	-	-	
	8.95552**			3.85991**			3.62049**			
AlSb	8.89912	8.769 ^{(a),(e),(f)}	9.87 ⁽ⁱ⁾	3.83629	4.341 ^{(a),(e),(f)}	3.87 ⁽ⁱ⁾	3.59743	4.076 ^{(a),(e),(f)}	3.74 ⁽ⁱ⁾	
		8.94 ^(g)			4.43 ^(g)			4.16 ^(g)		4.20 ^(l)
		8.939 ^(h)			4.427 ^(h)			4.155 ^(h)		3.903 ^(m)
		8.9 ⁽ⁱ⁾			4.4 ⁽ⁱ⁾			4.2 ⁽ⁱ⁾		

* Nos calculs sans désordre.

** Nos calculs avec désordre.

^(a)Réf. [18], ^(b) Réf. [19], ^(c)Réf. [20], ^(d) Réf. [21], ⁽ⁿ⁾ Réf. [22], ^(e) Réf [25], ^(f)Réf. [26], ^(g) Réf. [27], ^(h) Réf. [28], ⁽ⁱ⁾ Réf. [29], ^(j) Réf. [30], ^(k) Réf. [31], ^(l) Réf. [32], ^(m) Réf. [33].

La figure III-2 représente la variation des constants élastiques à savoir C_{11} , C_{12} et C_{44} pour l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la fraction molaire x de l'Aluminium, On remarque que tous ces constants élastiques diminuent non linéairement avec l'augmentation de la composition x en allant de $GaSb$ où (x=0) vers $AlSb$ où (x=1) de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$.

Les courbes de la figure III-2 correspondent à des interpolations quadratiques de la forme suivante :

$$C_{ij} = a + bx + cx(1 - x) \tag{III-11}$$

c : est le paramètre de courbure.

Leurs expressions analytiques sont d'écrites comme suites:

Sans désordre :

$$C_{11} = 9,43278 - 0,57157x + 0,03798x^2 \tag{VCA} \tag{III - 12}$$

$$C_{12} = 4,06032 - 0,23955x + 0,01555x^2 \tag{VCA} \tag{III - 13}$$

$$C_{44} = 3,81544 - 0,23366x + 0,01568x^2 \quad (VCA) \quad (III -14)$$

Avec désordre :

$$C_{11} = 9,43465 - 0,52755x - 0,00713x^2 \quad (VCAA) \quad (III -15)$$

$$C_{12} = 4,06108 - 0,22167x - 0,00278x^2 \quad (VCAA) \quad (III -16)$$

$$C_{44} = 3,81621 - 0,21544x - 0,00299x^2 \quad (VCAA) \quad (III -17)$$

On peut noter que l'effet du désordre affecte faiblement les constants élastiques avec un changement des signes des paramètres de courbure, et il augmente légèrement ces constants élastiques dans tout l'intervalle [0,1] de la concentration x de l'Aluminium.

La figure III-3 illustre les variations des constants élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration x de l'Aluminium pour l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ avec et sans désordre, qualitativement ces constants élastiques montrent un comportement similaire. On note qu'ils présentent tous un comportement presque linéaire par rapport à la composition x avec différents taux de variation et sur le plan quantitatif on constate que le constant C_{11} est plus élevé que les constants C_{12} et C_{44} .

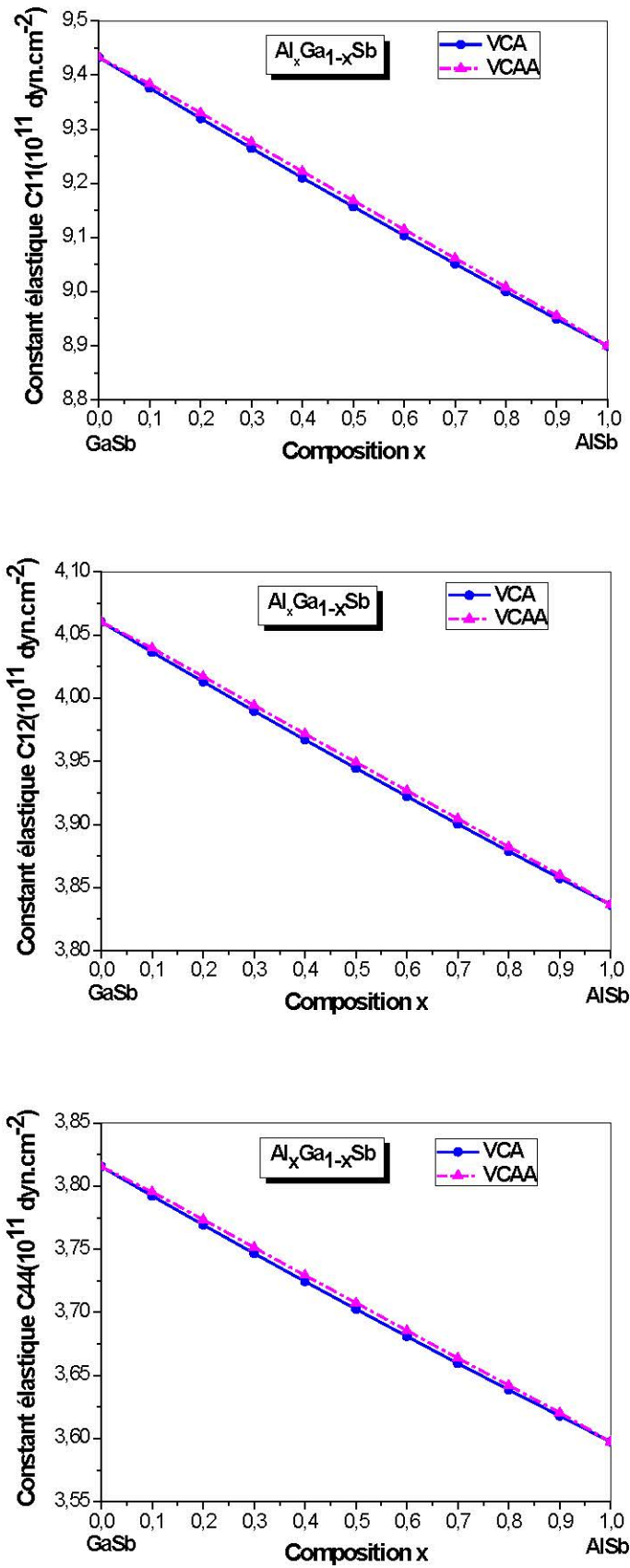


Figure III-2: Les variations des constants élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} en fonction de la concentration x de l'Aluminium: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage ternaire.

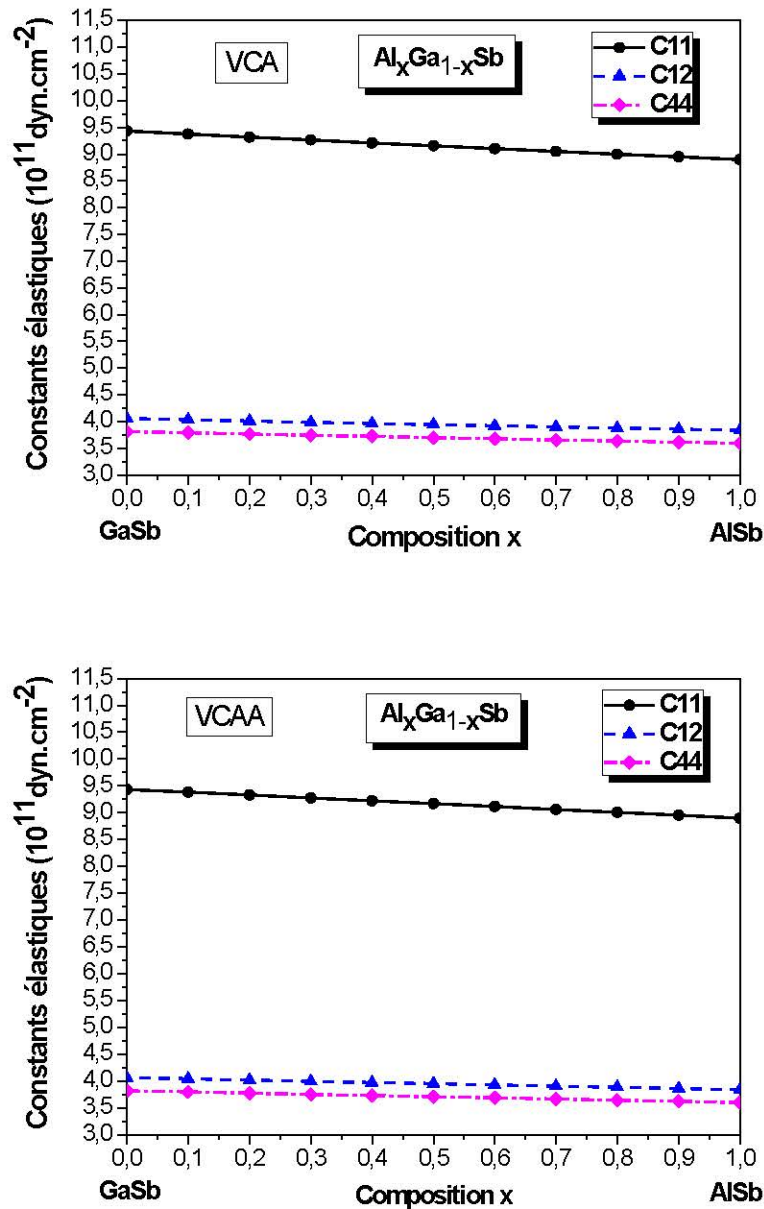


Figure III-3: Les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de concentration x de l'Aluminium de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$, avec et sans désordre.

III-5-2-Le module de compressibilité et les constantes de force :

Le module de compressibilité élastique B est défini comme étant le rapport du changement de la pression agissant sur un volume au changement de la fraction du volume (le facteur d'élasticité volumique). Il décrit la réponse du matériau à une pression uniforme.

Pour déterminer les valeurs du module de compressibilité B et les constantes de force α et β , de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en tenant et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nous avons appliqué les formules (II.52), (II.53) et (II.54).

Le tableau III-4 représente les valeurs calculées du module de compressibilité B et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en fonction de la concentration x d'Aluminium pour l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ ainsi que les données disponibles connues dans la littérature.

Généralement, l'accord entre nos résultats et les données connues sont raisonnablement bons.

Tableau III-4: Le module de compressibilité B en (10^{11} dyne/cm²) et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en (N/m) de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$.

Matériaux	B (10^{11} dyne/cm ²)			α (N/m)		β (N/m)	
	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
GaSb	5.8512	5.63 ^(a)	5.8 ^{(b),(c)} 5.7 ^(d)	34.5935854	34.19 ^(e) 32.08 ^(f) 34.42 ^{(g),(h)}	6.19415427	6.12 ^(e) 5.84 ^(f) 7.16 ^{(g),(h)}
Al _{0,1} Ga _{0,9} Sb	5.8163* 5.821***	-	-	34.526426	-	6.18212906	-
Al _{0,3} Ga _{0,7} Sb	5.7481* 5.7549***	-	-	34.3926280	-	6.15817185	-
Al _{0,5} Ga _{0,5} Sb	5.6818* 5.6889***	-	4.702 ⁽ⁱ⁾ 4.476 ^(j)	34.2595204	-	6.13433827	-
Al _{0,7} Ga _{0,3} Sb	5.6173* 5.6235**	-	-	34.1270988	-	6.11062752	-
Al _{0,9} Ga _{0,1} Sb	5.5546* 5.5585***	-	-	33.9953587	-	6.08703881	-
AlSb	5.5239	5.51 ^(k) 5.93 ^(l) 5.41 ^(m) 5.8 ⁽ⁿ⁾ 5.82 ^(a)	5.41 ^(o) 6.77 ^(p)	33.9297429	33.77 ^(q) 35.74 ^(r) 33.81 ^(s)	6.07528997	6.15 ^(q) 6.63 ^(r) 6.05 ^(s)

*Nos calculs sans désordre.

***Nos calculs avec désordre.

^(a)Réf. [18], ^(b) Réf. [34], ^(c)Réf. [35], ^(d) Réf. [36], ^(e) Réf [37], ^(f)Réf [38], ^(g)Réf. [39], ^(h) Réf. [40], ⁽ⁱ⁾ Réf. [41], ^(j) Réf. [42], ^(k) Réf. [27], ^(l) Réf. [43], ^(m) Réf. [44], ⁽ⁿ⁾ Réf. [45], ^(o) Réf. [46], ^(p) Réf. [47], ^(q) Réf. [48], ^(r) Réf. [49], ^(s) Réf. [50].

La figure III-4 représente la variation des constantes de force α et β en fonction de la concentration x de l'Aluminium de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$. Cette figure, nous montre une diminution presque linéaire et similaire de ces constantes de force avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium, et la constante de force d'élongation α est très élevée que celle de la constante de force de recourbement β sur tout l'intervalle allant de $x = 0$ jusqu'à $x = 1$, donc on constate qu'il y a une dilatation des liaisons.

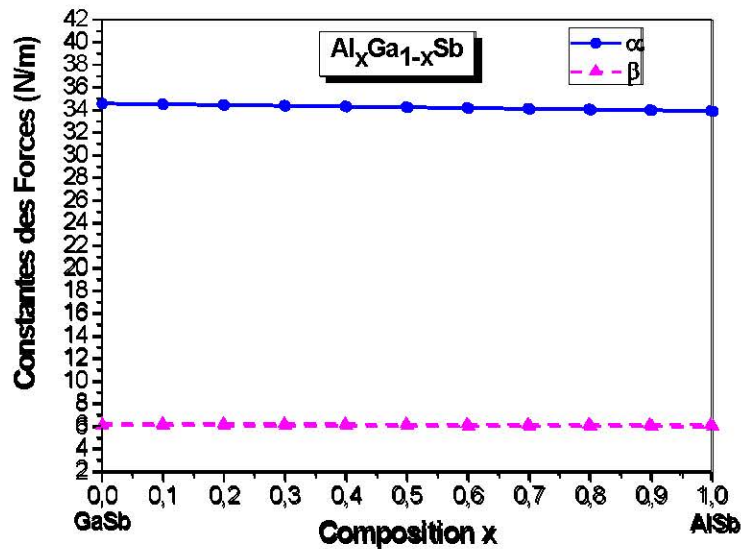


Figure III-4: La variation des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

La variation du module de compressibilité B obtenus pour l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ pour différentes concentrations (x) de l'Aluminium est représentée sur la figure III-5, notons que lorsqu'on varie x de $x=0$ ($GaSb$) à $x=1$ ($AlSb$), le module de compression diminue d'une façon monotone et non linéaire de $(5.8512 \text{ à } 5.5239)10^{11} \text{ dyne/cm}^2$.

Nous remarquons aussi que les valeurs du module de compression pour le composé binaire $AlSb$ est plus petit que celle du composé binaire $GaSb$. Comme B des matériaux cristallin donne la mesure de la rigidité, on peut en conclure que le composé $GaSb$ est plus rigide que celui de $AlSb$ cela veut dire que l'addition de l'Aluminium rend l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ moins rigide.

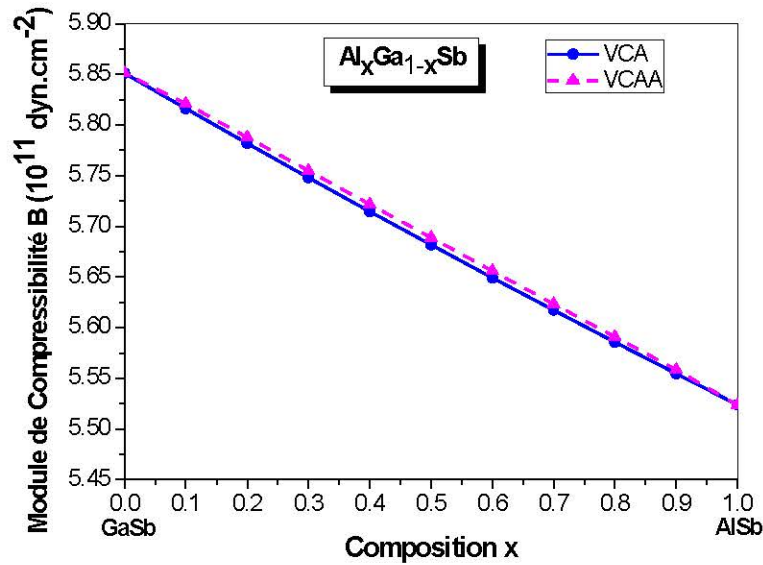


Figure III-5: La variation du module de compressibilité B avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

Généralement, dans les alliages ternaires, la dépendance du module de compressibilité B en fonction de la composition x est supposée adapter à une forme quadratique simple :

Sans désordre :

$$B = 5,85114 - 0,35025x + 0,02305x^2 \quad (VCA) \quad (III-18)$$

Avec désordre :

$$B = 5,85228 - 0,32364x - 0,00421x^2 \quad (VCAA) \quad (III-19)$$

D'après ces équations nous signalons une faible valeur de paramètre de courbure, on peut dire que l'effet du désordre affecte faiblement les paramètres de courbure qui sont égales à $c=0.02305$ dans le cas de VCA et $c=0.00421$ dans le cas de $VCAA$, Les valeurs de B calculées pour $GaSb$ ($5.8512 \cdot 10^{11} \text{ dyne/cm}^2$) et $AlSb$ ($5.5239 \cdot 10^{11} \text{ dyne/cm}^2$) sont en bon accord avec les valeurs expérimentales [18] (5.63 et 5.82) $10^{11} \text{ dyne/cm}^2$ respectivement et les valeurs théoriques [34-36,47-48]. Et l'effet du désordre sur le module de compressibilité B est presque négligeable.

III-5-3-Les modules de cisaillement G , de Young Y , le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A :

Les calculs des modules de cisaillement G , de Young Y , et le coefficient de Poisson ν ainsi que le facteur d'anisotropie A , sont basés sur les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} des alliages [33].

Les valeurs des modules de cisaillement G , de Young Y , le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A obtenues sont rassemblés dans le tableau III-5.

Tableau III-5: les modules de cisaillement (G), Young (Y) en (10^{11} dyne/cm²) le coefficient de Poisson (ν) et le facteur d'Anisotropie (A) de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$.

Matériaux	G (10^{11} dyne/cm ²)		Y (10^{11} dyne/cm ²)		ν		A	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
GaSb	2.6862	2.41 ^(a) 2.59 ^(b)	6.9892	6,44 ^(b) 6,32 ^(c)	0.3009184	0.301 ^(b) 0.283 ^(d)	0.7040421	0.557 ^(a)
$Al_{0,1}Ga_{0,9}Sb$	2.6697 ^{**} 2.672 ^{***}	-	6.9464 ^{**} 6.9523 ^{***}	-	0.30095186 ^{**} 0.30094206 ^{***}	-	0.70400257 ^{**} 0.70401415 ^{***}	-
$Al_{0,3}Ga_{0,7}Sb$	2.6374 ^{**} 2.6408 ^{***}	-	6.8627 ^{**} 6.8713 ^{***}	-	0.30101725 ^{**} 0.30100272 ^{***}	-	0.7039253 ^{**} 0.70394247 ^{***}	-
$Al_{0,5}Ga_{0,5}Sb$	2.606 ^{**} 2.6095 ^{***}	-	6.7813 ^{**} 6.7903 ^{***}	-	0.30108059 ^{**} 0.30106524 ^{***}	-	0.70385046 ^{**} 0.7038686 ^{***}	-
$Al_{0,7}Ga_{0,3}Sb$	2.5755 ^{**} 2.5786 ^{***}	-	6.7023 ^{**} 6.7101 ^{***}	-	0.30114187 ^{**} 0.30112826 ^{***}	-	0.70377807 ^{**} 0.70379414 ^{***}	-
$Al_{0,9}Ga_{0,1}Sb$	2.5459 ^{**} 2.5478 ^{***}	-	6.6255 ^{**} 6.6304 ^{***}	-	0.30120112 ^{**} 0.30119252 ^{***}	-	0.70370808 ^{**} 0.70371824 ^{***}	-
AlSb	2.5314	2.21 ^(a) 2.522 ^(f)	6.5879	6.563 ^(e) 6.36 ^(f) 10.58 ^(f)	0.30122999	0.301 ^(e) 0.237 ^(f) 0.266 ^(f)	0.70367397	0.543 ^(a)

^{**} Nos calculs sans désordre.

^{***} Nos calculs avec désordre.

^(a)Réf. [16], ^(b) Réf. [40], ^(c)Réf. [53], ^(d) Réf. [54], ^(e) Réf [55], ^(f)Réf [56].

Dans le tableau III-5 nous avons inséré les calculs obtenus des modules de cisaillement G et de Young Y en ($dyne/cm^2$), le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ avec d'autres calculs disponibles.

En faisant la comparaison entre les calculs obtenus avec d'autres résultats connus dans la littérature, nous pouvons dire que nos calculs sont d'une manière générale en accord avec d'autres travaux disponibles.

Nous avons constaté qu'il y a une augmentation de coefficient de Poisson ν par contre il y a une diminution des modules de cisaillement G et de Young Y , ainsi que le facteur d'anisotropie A avec l'augmentation de la fraction molaire x de l'Aluminium. Nous avons remarqué aussi que l'effet du

désordre fait décroître les valeurs de coefficient de Poisson ν par contre il fait augmenter les valeurs des modules de cisaillement G , de Young Y et le facteur d'anisotropie A .

Les variations des modules de cisaillement G et de Young Y en fonction de la concentration x de l'Aluminium avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$, sont représentés dans les figures III-6 et III-7. D'après ces figures, Nous observons clairement une diminution non linéaire de G et Y avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium dans l'intervalle $[0-1]$. Pour les deux cas VCA et VCAA de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ la variation des deux modules montrent un comportement similaire et l'effet du désordre est presque négligeable.

La variation de coefficient de Poisson ν en fonction de la concentration x de l'Aluminium avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ est montrée sur la figure III-8. On remarque que lorsque la concentration de l'Aluminium augmente de 0 à 1, le coefficient de Poisson ν augmente d'une façon monotone. On note aussi, que l'effet de désordre a une petite influence sur ν .

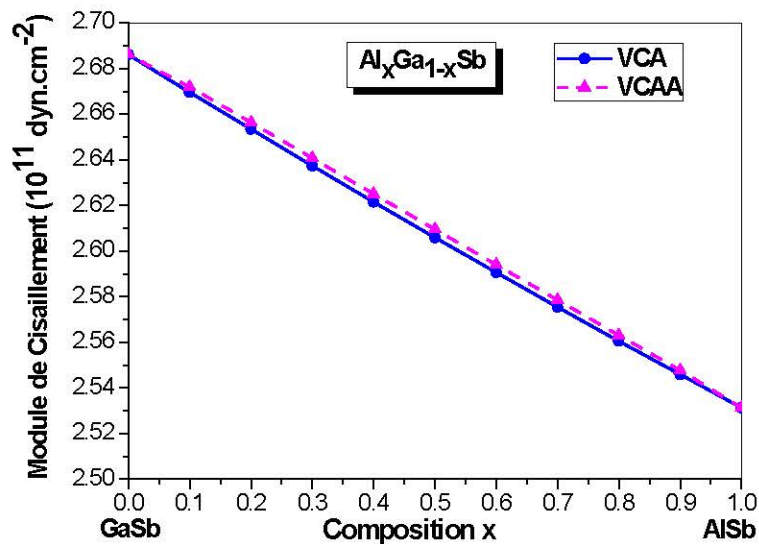


Figure III-6: La variation du module de cisaillement (G) en ($\text{dyne} / \text{cm}^2$), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

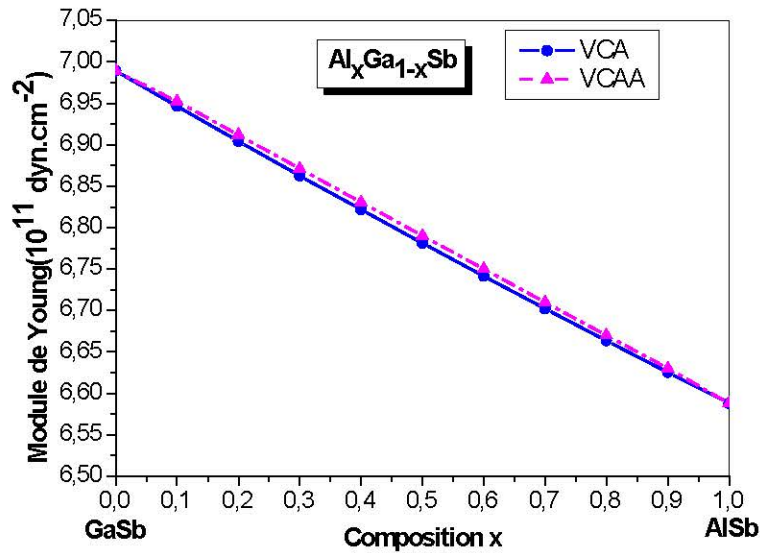


Figure III-7: La variation du module de Young (Y) en (dyne/cm^2), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

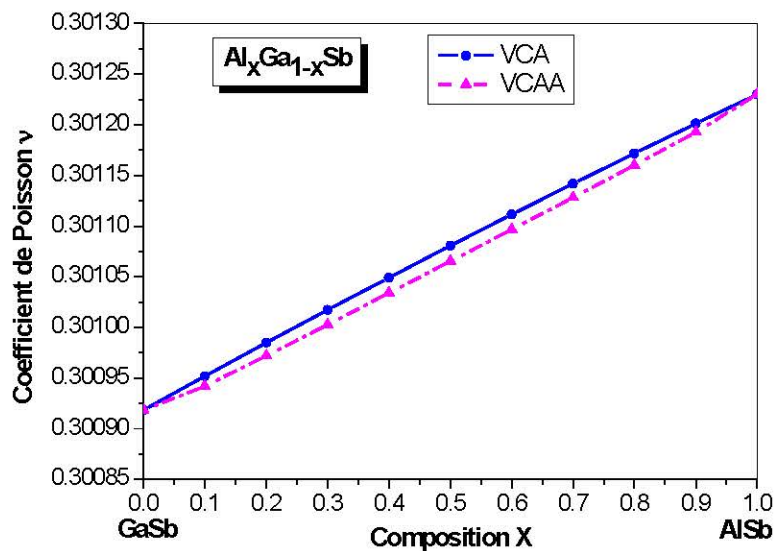


Figure III-8: La variation de coefficient de Poisson ν avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

La figure III-9 représente la variation du facteur d'anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium. On note qu'il ya une diminution non linéaire de facteur d'anisotropie avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium, on remarque aussi que l'effet du désordre a une petite influence et il fait augmenter le facteur d'anisotropie A .

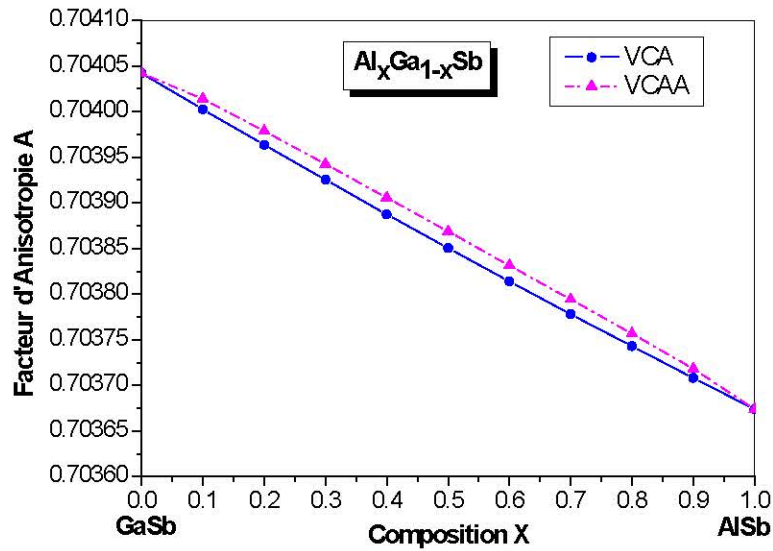


Figure III-9: La variation du facteur d'Anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$, en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

Les expressions analytiques des modules de cisaillement G et de Young Y sont d'écrites comme suites:

Avec désordre :

$$G = 2,6862 - 0,1659 x + 0,01112x^2 \quad (VCA) \quad (III - 20)$$

$$Y = 6,98914 - 0,43011x + 0,02894x^2 \quad (VCA) \quad (III - 21)$$

Sans désordre :

$$G = 2,68673 - 0,15274 x - 0,00234x^2 \quad (VCAA) \quad (III - 22)$$

$$Y = 6,99056 - 0,39638x - 0,00561x^2 \quad (VCAA) \quad (III - 23)$$

III-5-4-Le facteur de l'ionicité f_i et le paramètre de Kleinman ξ :

Le facteur de l'ionicité f_i est lié à la répartition de la charge entre les constituants et il est définit par Pauling comme une différence d'électronégativité entre les deux constituants d'un composé binaire [51].

Le calcul du facteur de l'ionicité exige la connaissance de la polarité donnée par la relation suivante [52]:

$$f_i = \left(1 - \left(1 - \alpha_p^2 \right)^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (III-24)$$

Nous consacrons cette partie à l'étude du Facteur de l'ionicité f_i et du paramètre de Kleinman ξ de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ dans sa phase zinc blende.

Le tableau III-6 résume les résultats trouvés. Nous constatons que nos calculs ne sont pas en accord avec les résultats disponibles [57-59] pour le Facteur d'ionicté f_i et en accord avec celle du paramètre de Kleinman ξ [60,61].

Le tableau III-6 résume les résultats trouvés concernant le Facteur d'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ . Nous constatons que nos calculs pour les composés binaires GaSb et AlSb sont en accord raisonnable avec les résultats disponibles.

Les figures III-9 et III-10 représentent les variations du facteur d'ionicté f_i et du paramètre de Kleinman ξ successivement avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

Comme il est montré dans les figures (III-9 et III-10), on remarque que l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ augmentent non linéairement avec l'augmentation de la concentration de l'Aluminium, on note aussi que l'effet de désordre fait diminuer les deux paramètres.

Tableau III-6: Facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$.

Matériaux	f_i		ξ	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres
GaSb	0.25420869	0.261 ^(a)	0.5652772	0.536 ^(e)
Al _{0,1} Ga _{0,9} Sb	0.25922937 ^{**}	-	0.56533703 ^{**}	-
	0.25777103 ^{***}	-	0.5653195 ^{***}	-
Al _{0,3} Ga _{0,7} Sb	0.26870825 ^{**}	-	0.56545397 ^{**}	-
	0.2666383 ^{***}	-	0.56542798 ^{***}	-
Al _{0,5} Ga _{0,5} Sb	0.27750427 ^{**}	-	0.56556725 ^{**}	-
	0.27540466 ^{***}	-	0.56553978 ^{***}	-
Al _{0,7} Ga _{0,3} Sb	0.28568826 ^{**}	-	0.56567686 ^{**}	-
	0.28389738 ^{***}	-	0.56565252 ^{***}	-
Al _{0,9} Ga _{0,1} Sb	0.29332165 ^{**}	-	0.56578285 ^{**}	-
	0.29222998 ^{***}	-	0.56576747 ^{***}	-
AlSb		0.250 ^(a)		0.649 ^(d)
	0.29694886	0.250 ^(b)	0.5658345	0.564 ^(e)
		0.230 ^(c)		

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

^(a)Réf. [57], ^(b) Réf. [58], ^(c)Réf. [59], ^(d) Réf. [60], ^(e) Réf [61].

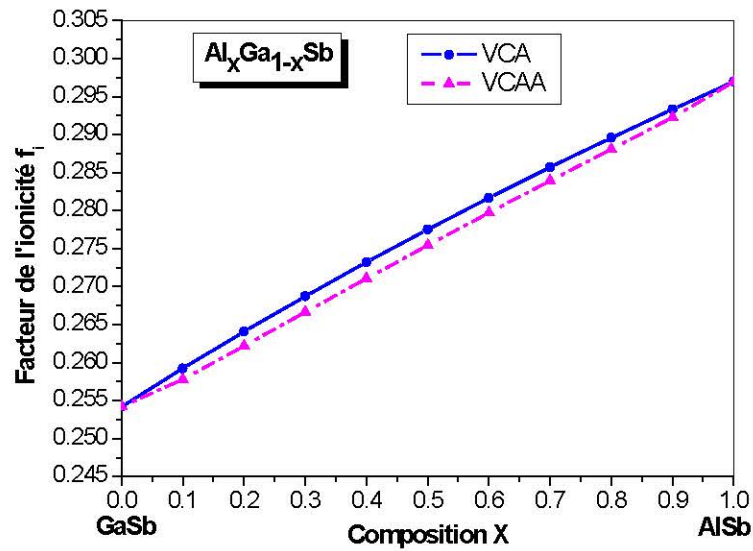


Figure III-10: La variation de facteur d'ionicité f_i avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

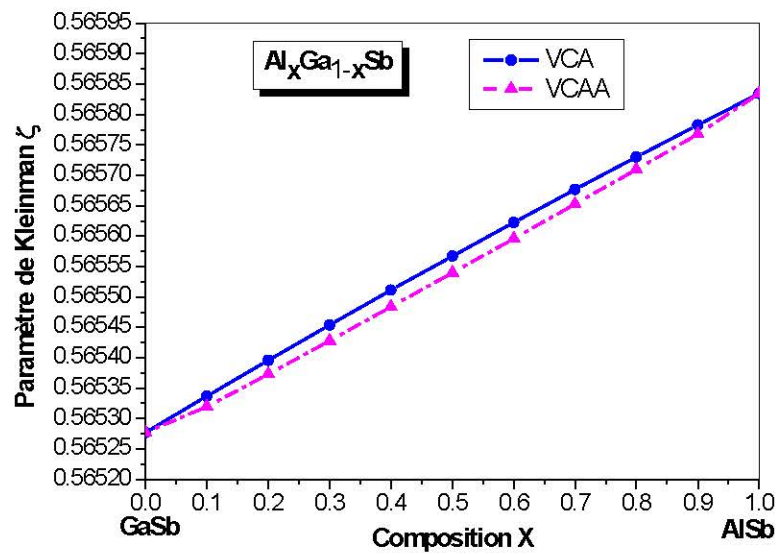


Figure III-11: La variation du facteur de Kleinman ξ avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

Références

- [1] K.S.A. Butcher et T.L. Tansley, *Superlattices and Microstructures* 38, 1(2005).
- [2] Gerald Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Les éditions de physique, Paris (1988).
- [3] Y.Yu. Peter, Manuel Cardona. *Fundamentals of semiconductors Physics and matériels* (properties. Springer (2010).
- [4] C.Kittel .*Introduction à la physique de l'état solide*, Dunod (1972).
- [5] J.S.Blakemore. *Semiconducting and other major properties of gallium arsenide*.J. Appl. phys.**53**,10 (1982).
- [6] N.Baghdadli, *Thèse de Magister. Université de Tlemcen (Algérie)* (2010).
- [7] K.Benatmane, *Thèse de Magister, Université de Batna (Algérie)* (2011).
- [8] J.Zimmermann, *Thèse de doctorat, université de l'île 1(France)* (1980).
- [9] S. Yousfi, *Mémoire de magister, Université de M'Sila, (Algérie)* (2004).
- [10] R H. Parmenter, *Phys. Rev.* **97**, 587 (1955).
- [11] J. Mycielsky and A. M. Witowski, *Phys. Stat. Sol. (b)* **134**, 675 (1986).
- [12] M. A. Monire, *Thèse de doctorat, Université de Mascara, (Algérie)* (2016).
- [13] J. E. Bernard, A. Zunger, *Phys. Rev. B* **36**, 3199 (1987).
- [14] L. Vegard, *Z. Phys.* **5**, 17 (1921).
- [15] F. Mezrag, *Mémoire de magister, Université de Msila, (Algérie)* (2003).
- [16] A. Bechiri, *Thèse de doctorat d'état, Université de Constantine (Algérie)* (2006).
- [17] P. Herve and L. K. J. Vandamme, *J. Appl. Phys.* **77**, 5476 (1995).
- [18] S. Adachi, "Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors", John Wiley & Sons Ltd, (2005).
- [19] T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, *J. Phys. Condense. Matter* **8**, 3111 (1996).
- [20] N. Bouarissa, *Mat. Chem. Phys.* **100**, 41 (2006).
- [21] P. S. Vyas, P. N. Gajjar, B. Y. Thakore, A. R. Jani, *Physica. B* **406**, 4412 (2011).
- [22] P. S. Vyas, *Thèse de doctorat, université de Sardar Patel, Gujarat, India* (2012).
- [23] Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, *J.Appl. Phys*, Vol. **89**, N°11,1 June (2001).
- [24] J.M.Baranowski, *J.Phys. C*, **17**, 6287, (1984).
- [25] O. Madelung, *Semiconductor Data Handbook (from CDROM) third Ed*, Springer (2004).
- [26] S. Kasap, P. Capper, "Spring Hand book of electronic and photonic materials». Spring science, Inc (2017).
- [27] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Freeman, New York (1980).
- [28] Marvin J- Weber, "Hand book of optical Materials ",CRC Press LLC (2003).

- [29] S. Q. Wang, H. Q. Ye, Phys. Status Solidi B **240**, 45 (2003).
- [30] Jiajin Tan, Ying Li, Guangfu Ji, Computational Materials Science, **58**, 243 (2012).
- [31] J. Piprek, "Semiconductor Optoelectronic Devices". Elsevier Science (2003).
- [32] R.R. Reddy, K. Rama Gopal, K. Narasimhulu, L. Siva Sankara Reddy, K. Raghavendra Kumar, G. Balakrishnaiah, M. Ravi Kumar, J. Alloy. Comp. **473**, 28 (2009).
- [33] G. Gokoglu, J. Alloy. Comp. **478**, 653 (2009).
- [34] V. Kumar, G. M. Prasad, A. R. Chetal and D. Chandra, J. Phys. Chem. Solids. **40**, 503 (1996).
- [35] M. L. Cohen, Phys. Rev., **B 32**, 7988 (1985).
- [36] T. Soma, J. Phys. C: Solid State Phys. **11**, 2669 (1978).
- [37] V. Kumar, J. Phys. Chem. Solids. **61**, 91(2000).
- [38] H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **24**, 325 (1989).
- [39] H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **20**, 773 (1985).
- [40] F. Ben Salem, Mémoire de Magister, Université de M'Sila, Algérie (2004).
- [41] Sarkar, D. Sen, S. Halidar, D. Roy, Modern Phys. Lett. B **12**, 639 (1998).
- [42] I. Nagy, J. Phys. C **19**, 481(1986).
- [43] S. Muramatsu, M. Kitamura, J. Appl. Phys, **73**, 4270 (1993).
- [44] H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **23**, 97 (1988);
H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **24**, 815 (1989);
H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **18**, 665 (1983);
H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **22**, 99 (1987);
H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **22**, 271(1987);
H. Neumann, Cryst. Res. Technol. **23**, 531(1988);
H. Neumann, Phys. Stat. Sol (a). **96**, k121 (1986).
- [45] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.V.R. Rao, Infrared Phys, Vol.**34**, No.1, 95 (1993).
- [46] Jiajin Tan, Ying Li, Guangfu Ji, Computational Materials Science. **58**, 243 (2012).
- [47] R.R. Reddy, K. Rama Gopal, K. Narasimhulu, L. Siva Sankara Reddy, K. Raghavendra Kumar, G. Balakrishnaiah, M. Ravi Kumar, Journal of Alloys and Compounds, **28**,473 (2009).
- [48] V. Kumar, J. Phys. Chem. Solids, **61**, 91 (2000).
- [49] H. Neumann, Cryst. Res. Technol, **20**, 773 (1985).
H. Neumann, Cryst. Res. Technol, **24**, 325 (1989).
- [50] A. S. Verma, Physics Letters A. **372**, 7196 (2008).
- [51] M. W. Barsoum, T. El-Raghi, W.D. poter, H. Wang, S. chakra borty, J. Appl. Phys. **88**, 6313 (2000).
- [52] W. A. Harrison, S. Ciraci, Phys. Rev. B, **10**, 1516 (1974).

- [53] A. Ratilal JIVANI and A. Ramniklal JANI. Turk J. Phys. **36**, 215 (2012).
- [54] B. Farid, V. Heine, G. E. Engel and I. J. Robertson, Phys. Rev. **B 48**, 11602 (1993).
- [55] Paresh S. Vyas, Thèse de doctorat, université de Sardar Patel, India (2012).
- [56] A. R. Jivani, Thèse de doctorat, université de Sardar Patel, India (2010).
- [57] S. Adachi, Properties of Semiconductor alloys Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, John Wiley & Sons Ltd (2009).
- [58] J. C. Phillips, Bonds and Bands in semiconductors, Academic Press, New York (1973).
- [59] A. Garcia and M. L. Cohen, Phys. Rev B. **47**, 4221 (1993).
- [60] R. M. Martin, Phys. Rev B. **1**, 4005(1970).
- [61] K. T. Faber and K. J. Malloy, the Mechanical Properties of Semiconductors (1992).

Conclusion générale

Conclusion générale:

Le présent travail est une investigation théorique des propriétés élastiques des composés binaires *GaSb* et *AlSb* et leurs alliages ternaires semiconducteurs $Al_xGa_{1-x}Sb$ cristallisant dans la structure Zinc-blende.

La méthode de calcul utilisée est celle du pseudopotentiel empirique local (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui inclue l'effet de désordre compositionnel comme un potentiel effectif, et combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM).

Nous avons calculé les constants élastiques (C_{11}, C_{12} et C_{44}), le module de compressibilité B , le module de cisaillement G , le module de Young Y , le coefficient de poisson ν , le facteur d'anisotropie A , l'ionicité f_i , le paramètre de Kleinman ξ , ainsi que les constantes de force : d'élongation α et de recourbement β , pour les composés binaires *GaSb* et *AlSb* et leurs alliages ternaires, ce qui a permis d'analyser le comportement mécanique de ces matériaux.

La dépendance de la concentration x de l'Aluminium sur les propriétés élastiques des alliages ternaires $Al_xGa_{1-x}Sb$ a été étudiée sur toute la gamme de la composition $[0-1]$.

Une attention particulière a été accentuée sur l'effet du désordre sur les variations de ces paramètres élastiques.

Les résultats que nous avons obtenus nous ont permis de tirer les conclusions suivantes :

- Les constants élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} , les modules de compressibilité B , de cisaillement G , de young Y et le facteur d'anisotropie diminuent non linéairement avec l'augmentation de la fraction molaire « x » de l'Aluminium.
- qualitativement les constants élastiques montrent un comportement similaire mais sur le plan quantitatif on constate que le constant C_{11} est plus élevé que les constants C_{12} et C_{44} .
- Le coefficient de poisson ν , Le facteur de l'ionicité f_i et le paramètre de Kleinman ξ augmentent non linéairement avec l'augmentation de la concentration de l'Aluminium.
- Les constantes de force α et β diminuent presque linéairement avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium, et la constante de force d'élongation α est très élevée que celle de la constante de force de recourbement β sur tout l'intervalle allant de $x = 0$ jusqu'à $x = 1$.
- L'effet du désordre affecte faiblement les constants élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} , les modules de compressibilité B , de cisaillement G , de young Y mais il a une petite influence sur le facteur d'anisotropie A , les modules de cisaillement G et de Young Y . cet effet fait décroître les

valeurs de coefficient de Poisson ν , par contre il fait augmenter les valeurs des modules de cisaillement G , de Young Y et le facteur d'anisotropie A .

En générale, nos résultats sont en accord raisonnable avec les ressources disponibles des données expérimentales et théoriques. Pour les quantités physiques des matériaux d'intérêt lorsque les données ne sont pas disponibles dans la littérature, nos résultats sont des prévisions et peuvent servir de références pour les futurs travaux.