



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de 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 des matériaux

Thème:

**Etude de l'effet de Magnésium sur les propriétés
électroniques des alliages ternaires à base de Tellure**

Présenté par:

Zineb Lazizi et Imane Azzeddine

Devant le jury:

Abdelkader Hafdallah	MCA	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Hichem Farh	MCA	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le lundi 29 / 06 / 2020 à 14^h:00



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de 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 des matériaux

Thème:

Etude de l'effet de Magnésium sur les propriétés
électroniques des alliages ternaires à base de Tellure

Présenté par:

Zineb Lazizi et Imane Azzeddine

Devant le jury:

Abdelkader Hafdallah	MCA	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Hichem Farh	MCA	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenu le lundi 29 / 06 / 2020 à 14^h:00



Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat
(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)

Nous soussignons

Nom, prénom: Lazizi Zineb & Azzeddine Imane

N° de carte d'étudiant: (1) 34038610/2015 (2) 34021501/2014

Régulièrement inscrits (es) en **Master** au **Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2019/2020**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: Physique des matériaux

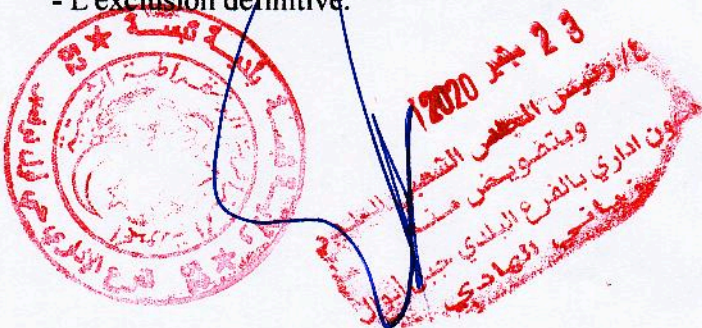
Intitulé du mémoire: Etude de l'effet de Magnésium sur les propriétés électroniques
des alliages ternaires à base de Tellure

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusion définitive.



Fait à Tébessa, le: 23 septembre 2020

Signature des étudiants (es):

(1): Zineb (2): Imane



Sommaire

Sommaire

Sommaire.	
Remerciement.	
Dédicace.	
.الملخص	
Résumé.	
Abstract.	
Liste des tableaux.....	i
Liste des figures.....	ii
Liste des symboles.....	iii
❖ Introduction générale.....	1

Chapitre I

Les méthodes de calculs des structures de bandes

I.1.Introduction.....	4
I.2.L'hamiltonien exact du cristal.....	4
I.3. L'équation de Schrödinger.....	4
I.4. Approximations de base.....	5
I.4.1. Approximation de Born-Oppenheimer.....	5
I.4.2. Approximation Hartree-Fock.....	6
I.5. Les théories de calcul élémentaires.....	6
I.5.1.La théorie de l'électron libre.....	6
I.5.2.La théorie de l'électron presque libre.....	7
I.5.3. La théorie des liaisons fortes.....	10
I. 6. Les méthodes de calcul des structures des bandes.....	11
I. 6. 1. La méthode cellulaire	11
I.6.2.Méthodes des ondes planes.....	12
I.6.3. Méthode des ondes planes augmentées (A.P.W).....	12
I.6.4. La méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W).....	14
I.6.5. Méthode de Kohn-Korinng-Rostoker (K. K. R.).....	14
I.6.6. La méthode multi-bandes (K. P).....	15
I.6.7. La méthode des pseudopotentiels (P. M).....	16
❖ Références	16

Chapitre II

La méthode du pseudopotentiel

II.1. Introduction.....	19
II.2. Qu'est-ce qu'un pseudopotentiel.....	19
II.3. La méthode du pseudopotentiel.....	19
II.4. Formalisme mathématique de la méthode.....	20
II.5. Caractéristique du pseudopotentiel.....	22
II.6. Les modèles des pseudopotentiels.....	22
II.6.1. Le modèle local.....	23
II.6.1.a. Le premier modèle.....	23
II.6.1.b. Le deuxième modèle (modèle d'Aschcroft).....	23
II.6.1.c. Le troisième modèle (Appelé modèle Heine et Abarenkov).....	23
II.6.2. Le modèle non locale.....	24
II.6.2.a. La fonction de Heine-Abarenkov.....	24
II.6.2.b. La fonction de Gauss.....	24
II.6.2.c. La fonction d'Aschcroft.....	24
II.7. La méthode empirique du pseudopotentiel	25
II.8. La méthode de calcul du (E.P.M).....	26
II-9. Théorie des alliages semi-conducteurs.....	28
II-9-1- L'approximation du cristal virtuel (V.C.A).....	28
II.9. 2. L'approximation du cristal virtuel amélioré (V. C. A. A).....	29
❖ Références	30

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1. Introduction	32
III.2. Etude des propriétés électroniques.....	32
III.3. Etude des gaps énergétiques de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$	34
III.4. Etude des structures de bandes électroniques.....	46
III.4.1. Structures de bandes électroniques des composés binaires.....	46
III.4.2. Effet du désordre sur les structures de bandes électroniques.....	48
III.4.3. Effet de la concentration sur les structures de bandes	48
❖ Références.....	51
❖ Conclusion générale.....	53

Remerciements

*En commençant, il faut que nous remercions le **Dieu**, car il est nécessaire pour la gloire du souvenir et la grande autorité sur toutes ses bénédictions ; Ce qui est apparu d'eux et ce qui est du ventre et sur la grâce de la connaissance et le haut degré qu'il m'a offert.*

*Nous dédions notre mémoire de master à celui qui **Dieu** a conféré la sérénité, la sincérité dans le travail, un travail unique et une organisation bien organisée dans la conduite des affaires, de notre Professeur est absolument notre préféré **Prof. Abderrachid Bechiri** qui nous a classé l'esprit spirituel avec sa bonne direction et son accompagnement par ses idées scientifiques pour accomplir notre travail.*

Il a fait des efforts énormes incapable de la langue pour sa description et l'exactitude de sa revue pour chaque grande et petite pour la réussite de ce travail et l'obtention du degré de perfection.

*Assez pour nous, c'est une grande fierté qu'il était notre encadreur ; puisse **Dieu** le protéger de tous mal et le nourrir avec son grand soin et sa perpétuation comme symbole de précision, de sérieux, de rigueur, de persévérance et de perfection dans le travail.*

*Nous exprimons nos sincères remerciements au **Dr. Abdelkader Hafdallah**, MCA à l'Université de Tébessa, d'avoir accepté de présider le Jury de ce mémoire. Nous remercions sincèrement **Dr. Hichem Farh**, MCA à l'université de Tébessa, d'avoir accepté d'examiner ce travail.*

Nous remercions également tous nos enseignants pour leur générosité et la grande patience dont ils ont fait preuve malgré leur charge de travail académique et professionnelle.

Nos sincères remerciements vont à toutes les personnes qui nous ont aidés et soutenus de près ou de loin.



Zineb & Imane

Dédicace

J'offre mon travail à mon **cher père**, qui m'a instruit et m'a remonté le moral. Il m'a aidé financièrement et moralement tout au long de mes études et m'a soutenu psychologiquement, c'était la lumière de mon chemin. J'espère que Dieu le sauvera de tous les soucis du monde, le protégera pour moi ainsi le récompensera pour tout ce qui est bon.

Je dédie mon Travail et le résultat de ma fatigue à **ma chère maman**, qui m'a toujours accueilli avec le sourire et qui m'offre des bonnes prières pour atteindre les plus hauts rangs à la source de la tendresse pour m'accompagner durant toutes les années. Plus précieuse que la lumière de mes yeux, je prie Dieu pour protéger sa santé, ainsi que son bien-être et sa longévité.

Je n'oublie pas ma sœur, **Ritedj**, cette forte passion. Elle est ma joie et mon plaisir. Oh mon Dieu, aussi pur que son cœur, fais d'elle la plus heureuse de ta création, et bonne chance dans sa carrière étude.

À mon héros du football, mon cher frère **Aissa**, je demande à Dieu de réaliser tous ses souhaits et aspirations à l'avenir. Et bonne chance dans ses études.

Je veux dire au monde que j'ai le meilleur petit frère du monde, dans chaque galaxie, plutôt dans l'univers entier. Mon frère **Mohammad Habib Allah**, l'esprit d'humour et l'esprit de joie, je demande à Dieu de le protéger de tout ce qui est mauvais.

À mon binôme **Imane** et sa famille.

Je dédie ce travail pour mon **Professeur Fella Benmakhlouf** et ma deuxième mère que Dieu à élevée et distingue de toutes les bonnes qualités, notamment la distinction, l'altesse et la personnalité honnête.

De plus, j'offre mon travail, à celui qui était à mes côtés et qui m'a souhaité bonne chance, J'espère que Dieu lui accorde le succès dans toutes ses affaires et le préservera ainsi que le récompensera de tout le bien.



Zineb Lazizi



Dédicace

Je dédie le présent mémoire:

À ma très chère mère

Quoi que je fasse ou que je dise, je ne saurai point te remercier comme il se doit. Ton affection me couvre, ta bienveillance me guide et ta présence à mes côtés a toujours été ma source de force pour affronter les différents obstacles.

À mon très cher père

Mon exemple éternel, mon soutien moral et source de joie et de bonheur, celui qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir.

À mes belles sœurs : Nadia, Soulaf, Radia, Ahlam, Nawal et leurs maris et leurs enfants.

Puisse Dieu vous donne santé, bonheur et réussite dans la vie.

À toutes mes amies.

*À mon binôme **Zineb** et sa famille.*

À toute la promotion du master "physique des matériaux" 2019/2020.

*Une dédicace spéciale au **Professeur Abderrachid Bechiri**, je voudrais lui exprimer ma gratitude pour le temps et la patience qu'il a consacrée à nous aider à améliorer et à compléter ce mémoire.*

Imane Azzeddine





ملخص

ملخص :

الهدف من هذا البحث هو دراسة الخواص الإلكترونية لسبائك أشباه الموصلات الثلاثية $Mg_x Zn_{1-x} Te$ كالفواصل الطاقية E_{Γ}^L ، E_{Γ}^X ، E_{Γ}^F و بنيات عصابات الطاقة الإلكترونية للتراكيب الثنائية $MgTe$ و $ZnTe$ وتلك الخاصة بالسبائك الثلاثية $Mg_x Zn_{1-x} Te$ بالإضافة إلى فصل

الطاقي ضد المتناظر $E_{(2-1)v}^X$ و عرض عصابة التكافؤ $E_{(4-1)v}^{\Gamma}$.

تركيز اهتمام خاص على تأثير العشوائية وتأثير التركيب الستوكيومترى للمغنيسيوم على هذه الخواص . لإجراء هذه الدراسة، إستخدمنا طريقة شبه الكمون التجريبية E.P.M المقترنة بالتقريب البلورة الافتراضية V.C.A مع و بدون تأثير العشوائية ؛ هذا النوع من طرق الحساب، بسيط ويضمن نتائج سريعة وموثوقة إلى حد ما.

بشكل عام ، التوافق بين نتائجنا للخواص الإلكترونية والنتائج التجريبية والنظرية المتوفرة مرضية.

الكلمات المفتاحية: طريقة شبه الكمون التجريبية (EPM)، تقريب البلورة الافتراضية (VCA)، عصابات الطاقة الإلكترونية، $MgTe$ ، $ZnTe$.



Résumé

Résumé

L'objectif de ce travail de recherche est d'étudier quelques propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$, à savoir : les gaps énergétiques $E_T^F, E_T^X, E_T^L, E_X^X, E_L^L$ les structures de bandes électroniques des composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$ et celles de les alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$ ainsi que le gap énergétique antisymétrique $E_{(2-1)v}^X$ et la largeur des bandes de valences $E_{(4-1)v}^F$ y ont été calculés.

Une attention très particulière a été accentuée sur l'effet du désordre et l'influence de la composition stœchiométrique du magnésium sur ces propriétés.

Pour effectuer cette étude, nous avons utilisé la méthode de pseudo-potential empirique E.P.M associée à l'approximation de cristal virtuel V.C.A avec et sans désordre ; Ce type de méthode de calcul est simple et assure des résultats rapides et plutôt fiables.

De manière générale, la concordance entre nos résultats pour les propriétés électroniques et les résultats expérimentaux et théoriques disponibles est tout à fait satisfaisante.

Mots clé : Méthode de pseudopotential empirique (EPM), Approximation de cristal virtuel (VCA), Structure de bande électronique, ZnTe, MgTe.



Abstract

Abstract

The objective of this research work is to study some electronic properties of ternary semiconductor alloys, such as: the energetic gaps $E_T^F, E_T^X, E_T^L, E_X^X, E_L^L$, the electronic band structures of binary compounds ZnTe et MgTe and ternary alloys $Mg_xZn_{1-x}Te$ as well as the antisymmetric energy gap $E_{(2-1)v}^X$ and the valence band width $E_{(4-1)v}^F$ have been calculated.

Special attention was paid to the effect of disorder and the influence of the stoichiometric composition of magnesium on these properties.

To carry out this study, we used the empirical pseudopotential method E.P.M. associated with V.C.A. virtual crystal approximation with and without disorder; this type of calculation method is simple and ensures fast and rather reliable results.

In general, the agreement between our results for the electronic properties and the available experimental and theoretical results is quite satisfactory.

Keyword: *Empirical pseudopotential method (EPM), Virtual crystal approximation (VCA), Electronic band structure, ZnTe, MgTe.*



Liste des tableaux

Liste des tableaux

Tableau N°	Titre	Page
III-1	Les facteurs de forme symétriques (V_s) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs ZnTe et MgTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en (A°).	34
III-2	Les gaps énergétiques aux points Γ , X et L de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$	35
III-3	La variation du gap antisymétrique $E_{(2-1)v}^X$ et l'ionicté des composés binaires ZnTe et MgTe	44
III-4	La largeur de la bande de valence $E_{(1-4)v}^\Gamma$ au point Γ de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$	45



Liste des figures

Liste des figures

Figure N°	Titre	Page
I-1	Une bande d'énergie interdite d'amplitude $2V_g$ existe à la frontière de la zone.	9
I-2	Le potentiel « muffin tin ».	13
II-1	Le potentiel d'interactions entre deux atomes en fonction de la distance r	22
II-2	Les modèles du pseudopotentiel non local.	25
II-3	L'organigramme d'E.P.M	27
III-1	La variation du gap d'énergie E_T^F en fonction de la concentration "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	36
III-2	La variation du gap d'énergie E_T^L en fonction de la concentration "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	37
III-3	La variation du gap d'énergie E_T^X en fonction de la concentration "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	39
III-4	La variation du gap d'énergie E_X^X en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	40
III-5	La variation du gap d'énergie E_L^L en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	40
III-6	Les gaps d'énergies direct et indirects en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ calculés sans tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.	42
III-7	Les gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.	42
III-8	La variation du gap antisymétrique d'énergie $E_{(2-1)v}^X$ en fonction de la composition "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	43
III-9	La variation de la largeur de bandes de valence $E_{(4-1)v}^F$ en fonction de la composition x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel..	45
III-10	La structure de bande électronique du composé binaire $ZnTe$	46
III-11	La structure de bande électronique du composé binaire $MgTe$	47
III-12	La structure de bande électronique de l'alliage ternaire $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$	48
III-13	L'effet de la concentration x de Magnésium sur les structures de bandes de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$	50



Liste des symboles

Liste des Symboles

Symboles	Sens physique
E_n	L'énergie cinétique des noyaux.
E_e	L'énergie cinétique des électrons
V_{nn}	L'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.
V_{ne}	L'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.
V_{ee}	L'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.
E	L'énergie totale du système
H	L'hamiltonien exact du cristal
Ψ	La fonction d'onde du système.
Ψ_e	La fonction d'onde électronique.
$V(r)$	Le potentiel moyen du cristal.
$\Psi_k(r)$	La fonction d'onde progressive.
$U(r)$	Exprimant la perturbation
$U_k(r)$	La fonction périodique dans le réseau
C	Est une constante de normalisation.
E_α	L'énergie de l'atome isolé.
Ψ_α	La fonction d'onde correspondant à l'énergie de l'atome isolé..
$\Psi_\alpha(r-l)$	La fonction d'onde de l'électron appartenant au l ^{ème} atome.
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$	Sont les harmoniques sphériques.
$\chi_l(r)$	Sont les fonctions radiales qui satisfaisant l'équation de Schrödinger.
Ψ_k	La fonction d'ondes planes orthogonalités.
ϕ_k^v	Est la pseudofonction d'onde.
ϕ_k^c	Les états atomiques occupés du cœur.
\hbar	Constante réduite de Planck.
V_R	Est le potentiel répulsif (positif).
V_C	Est le potentiel attractif (négatif) du cœur.
V_P	Est le pseudopotentiel faible.
Z	La valence atomique.
r_c	Le rayon du cœur ionique.
$A_I(E)$	La constante de la dépendance du Pseudopotentiel en énergie des états du cœur.
\vec{R}	Est un vecteur du réseau direct.

$\vec{\tau}$	Est un vecteur de la translation réseau direct.
$V_a(G)$	Le facteur de forme.
$S(G)$	Les états atomiques occupés du cœur.
N_a	Le nombre d'atome de base.
n	L'indice de la bande.
$V_p(r)$	Est le pseudopotentiel du cristal.
V_{VCA}	Le potentiel périodique du cristal virtuel.
$V_{dés}$	Le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel.
$V_L(r)$	Est la partie locale du pseudopotentiel.
$V_{NL}(r)$	Est la partie non locale du pseudopotentiel.
E_{exp}^{ij}	Les énergies observées expérimentalement.
E_{cal}^{ij}	Les énergies calculées.
C	Le paramètre de courbure du gap d'énergie.
V_S	Le facteur de forme symétrique.
V_A	Le facteur de forme antisymétrique.
$E_{(2-1)v}^X$	Le gap d'énergie antisymétrique entre la première et la deuxième bande de valence.
$E_{(1-4)v}^\Gamma$	La largeur de la bande de valence entre la première et la quatrième bande de valence.



Introduction générale

Introduction générale :

En 1833, l'histoire de la physique des semi-conducteurs a été commencée par le Dr. Michael Faraday [1]; elle a été d'un grand intérêt notamment depuis la réalisation des premiers dispositifs électroniques dans les années 1950 [2] où a été fondée la première compagnie au monde à proposer des diodes et des transistors sur le marché grâce à Herbert Mataré et exactement cela en 1951.

Semi-conducteur désigne un matériau qui possède les caractéristiques électriques d'un isolant ; Ce qui signifie que la conductivité électrique de ces matériaux est intermédiaire entre celle des métaux et celle des isolants [3].

De façon générale, on entend par semi-conducteur un isolant dont la bande interdite est suffisamment faible pour que l'excitation thermique permette à un certain nombre d'électrons de peupler la bande de conduction [4].

Les semi-conducteurs à large bande II-VI sont des émetteurs efficaces dans le domaine spectral bleu-UV [5] grâce à leurs propriétés intéressantes, ils pourraient trouver des applications dans les dispositifs électroniques électro-optique et acoustique [6].

On s'intéresse actuellement aux composés II-VI en raison de leur grande largeur de bande et de leurs applications potentielles dans les dispositifs optoélectroniques ; ainsi que pour les dispositifs émettant de la lumière à courte longueur d'onde [7] et comme capteurs infrarouges [8].

Ces semi-conducteurs sont particulièrement importants pour permettre aux dispositifs à large bande interdite de fonctionner à des températures beaucoup plus élevées, de l'ordre de 300°C. Cette caractéristique les rend très attrayants pour les applications militaires, et permet également à ces dispositifs de fonctionner à des niveaux de puissance beaucoup plus élevés dans des conditions normales. De plus, la plupart de ces matériaux à large bande interdite ont également une densité de champ électrique critique beaucoup plus élevée [9].

Lors de cette recherche, on a étudié des alliages ternaires semi-conducteurs de type II-VI de la forme $A_xB_{1-x}C$. Nous avons choisi les alliages $Mg_xZn_{1-x}Te$ des composés binaires ZnTe et MgTe sur la base de ses propriétés (structurelles, électroniques et optiques) [10].

Expérimentalement, il a été constaté que ces deux composés MgTe et ZnTe présentent des bandes interdites directes à température ambiante de 3,5eV et 2,4eV respectivement ; Ce qui en fait d'excellents candidats pour les cellules solaires à couches minces ou à jonctions multiples à faible coût et à haut rendement [11].

La structure électronique du MgTe, le ZnTe, a des applications très importantes pour les dispositifs d'éclairage à semi-conducteurs et les cellules solaires. De plus, cette structure est utilisée pour prévoir les bandes interdites dans les systèmes des alliages ternaires, qui peuvent être directement comparées à l'expérience [11].

Les semi-conducteurs II-IV à base de MgTe ont attiré l'attention sur leur importance dans la fabrication des dispositifs optoélectroniques [12]. Ils pourraient présenter de multiples phases cristallographiques telles que des états cubiques et hexagonaux [10] et possèdent également plusieurs propriétés extraordinaires qui les rendent susceptibles d'être utilisés dans diverses applications [13].

Le ZnTe est utilisé pour la préparation des guides d'ondes lumineuses ainsi que pour la production de lasers à hétéro-structure à large bande [13] de même que pour la fabrication de dispositifs d'émission de lumière fiables et anciens utilisant des substrats en ZnTe [14].

Des études expérimentales sur les propriétés du ZnTe ont démontré son potentiel dans divers domaines où il peut être utilisé en électronique, en optique, tels que divers dispositifs microélectroniques et dispositifs luminescents dans le visible et le proche UV, la diode émettrice de lumière verte [15], les mémoires optiques à haute densité, les conducteurs transparents et les photodétecteurs [16, 17].

Il peut aussi être appliqué dans la transition de phase structurale à haute pression, les propriétés élastiques, etc [13].

Les alliages $Mg_xZn_{1-x}Te$ sont utilisés dans la fabrication des dispositifs optoélectroniques commerciaux à longue durée de vie de même que pour le confinement quantique et la fabrication des guides d'ondes [7]; et possèdent également des propriétés électriques et photo-luminescentes [12].

Ce sont des alliages à large bande interdite avec une structure de blende de zinc. Ce matériau est bien adapté à une bonne utilisation dans les diodes électroluminescentes (DEL) vertes et bleues [12].

Il est bien connu que les spectres de vibration des cristaux mixtes ternaires varient entre les deux limites extrêmes d'un mode et de deux modes de comportement. Dans le cas des phonons optiques en $Mg_xZn_{1-x}Te$, le double mode a été mis en évidence dans les spectres Raman [18].

Le but de notre travail est l'étude des propriétés électroniques de l'alliage ternaire. Nous avons basé nos calculs sur la méthode du pseudo-potentiel empirique E.P.M qui inclut l'effet du désordre en introduisant un potentiel effectif du désordre dans l'approximation du cristal virtuel VCA.

Ce travail de recherche est organisé en trois chapitres qui sont:

- Le premier chapitre présente l'étude de quelques méthodes de calcul des structures des bandes.
- Le deuxième chapitre étudie en détail la méthode du pseudo-potentiel empirique E.P.M.

- Le troisième chapitre a pour objet d'interpréter les résultats obtenus au cours de cette recherche ainsi que de les comparer avec certains résultats des travaux théoriques et expérimentaux disponibles.

En plus aux chapitres, on a ajouté une introduction générale et une conclusion générale à notre travail.

Références :

- [1] <http://lastethese.free.fr/node91.html>.
- [2] A. Berghouth, thèse de doctorat, Université de Paul Verlain-Metz, (France), 2007.
- [3] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Semi-conducteur>.
- [4] N. Baghdadli, Thèse de doctorat, Université Abou Bakr Belkid - Tlemcen, (Algérie), 2013.
- [5] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [6] P. K. Yadawa, Communications in Applied Sciences J. Phys. **1**(2013) 47.
- [7] Z. Charifi, F. ElHaj Hassan, H. Baaziz, Sh. Khosravizadeh, S. J. Hashemifar , H. Akbarzadeh, Condens Matter J. Phys.**17**(2005) 7077.
- [8] R. Vogelgesang, A. J. Mayur, M. Dean Sciacca, Eunsoo Oh, I. Miotkowski, A. K. Ramdas, S. Rodriguez, Raman Spectroscopy J. Phys. **27**(1996)239.
- [9] https://fr.qwe.wiki/wiki/Wide-bandgap_semiconductor.
- [10] J.O. Akinlami, M.O. Omeike , A.J. Akindiilete , Semiconductor physics J. Phys.**22**(2019)5.
- [11] J. Yang, S. Chen, W. Yin, X. G. Gong , Physical Review J. Phys . **B 79** (2009) 245202.
- [12] A. Belhachemi, H. Abid, Y. Al-Douri, M. Sehil, A. Bouhemadou , M. Ameri, Chinese J. Phys. **55** (2017) 1018.
- [13] U. Sarkar, B. Debnath, M. Debbarma, D. Ghosh, S. Chanda, R. Bhattacharjee, S. Chattopadhyaya, Materials Chemistry and Physics J.Phys. **230** (2019) 54.
- [14] J.H. Chang, M.W. Cho, H. Makino, K. Shim, H. Rabitz, T. Yao, Crystal Growth J. Phys. **214/215** (2000) 373.
- [15] W. A. Syed, S. Ahmed, M. S. Saleem, N. A. Shah, Chalcogenide Letters, **12** (2015) 215.
- [16] D. Lee, J. Zucker, M. D. Divino, R. F. Austin, R. D. Feldman, K. L. Jones et A.M. Johnson, Appl. Phys. Lett, **59** (1991)1867.
- [17] S. Valette, G. Labrunie, J.C. Deutsch, J. Lizet, Appl. Opt., **16** (1977) 1289.
- [18] C.Yoon, B.Kim, D. Cha, Y.Kim, S.Chung, J.Ko, C.Kim, H.Park and W.Kim , Solid State Communications J. Phys.**106** (1998) 481.



Chapitre I

Méthodes de calculs des structures des bandes

I.1.Introduction:

Dans les corps solides, on peut interpréter plusieurs phénomènes physiques à partir de l'étude des structures de bandes. Celles-ci peuvent être obtenues en prenant en compte l'étude des systèmes électrons-noyaux et en tenant compte de toutes les interactions [1].

Il est impossible de résoudre les équations générales, mais un modèle simplifié peut toujours être adapté pour obtenir des solutions approximatives [2].

Généralement ; les méthodes de calcul peuvent être divisées en trois catégories :

- ✓ Empiriques : et dans lesquels ; on utilise des données expérimentales pour déterminer les valeurs de certains paramètres inconnus (le potentiel) qui donneront un bon accord entre la théorie et l'expérience [1].
- ✓ Semi-empiriques: où les paramètres atomiques et les résultats expérimentaux sont utilisés pour déterminer les structures de bandes [1].
- ✓ Méthodes de calcul du premier principe: selon cette méthode, seules les constantes atomiques sont utilisées comme paramètres pour la solution de l'équation de Schrödinger [1].

Ce chapitre traite d'une manière générale les différentes méthodes de calcul des structures de bandes [2].

I.2.L'hamiltonien exact du cristal:

L'hamiltonien exact du cristal (non relativiste) est le résultat de la présence des forces électrostatiques d'interaction et de répulsion ou d'attraction selon la charge des particules (ions, électrons). L'hamiltonien du cristal s'écrit comme suit [3-9]:

$$H = E_n + E_e + V_{nn} + V_{ne} + V_{ee} \quad (I-1)$$

E_n : est l'énergie cinétique des noyaux.

E_e : est l'énergie cinétique des électrons.

V_{nn} : est l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

V_{ne} : est l'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.

V_{ee} : est l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

I.3. L'équation de Schrödinger:

Un système cristallin est constitué de deux types de particules les noyaux et les électrons [2]. Toutes les informations d'un système sont regroupées dans la fonction d'onde, laquelle

est régie par l'équation stationnaire de Schrödinger qui est indépendante du moment où l'état d'un système est représenté. Cette équation s'écrit [3,10-13,15]:

$$H\psi = E\psi \quad (I-2)$$

$$H = \left[- \sum_i^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I^A \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2 + \sum_{i,I} \frac{Z_i e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i<j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \right] \quad (I-3)$$

On remplace l'équation (I-3) dans (I-2) on trouve [4-10]:

$$H\psi = \left[- \sum_i^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I^A \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2 + \sum_{i,I} \frac{Z_i e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i<j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \right] \psi = E\psi \quad (I-4)$$

ψ : La fonction d'onde du système.

E: L'énergie totale du système.

I.4. Approximations de base :

L'équation dynamique de Schrödinger pour un système de n électrons s'écrit :

$$H(r_1, \dots, r_n) \psi(r_1, \dots, r_n) = E\psi(r_1, \dots, r_n) \quad (I-5)$$

Il est impossible de trouver une solution générale à l'équation de Schrödinger ; en raison du nombre extrêmement élevé de variables (électrons-noyaux), Pour simplifier le problème, quelques approximations sont adoptées [1].

I.4.1. Approximation de Born-Oppenheimer :

Cette approximation adiabatique de Born-Oppenheimer considère que les noyaux sont immobiles car la position instantanée des noyaux ne peut pas être influencée par le mouvement des électrons [2] du fait de sa séparation du mouvement du noyau. Comme la masse des électrons est négligeable par rapport à la masse des noyaux, les mouvements des électrons sont plus rapides ; les noyaux sont donc considérés comme fixes, l'énergie cinétique des noyaux devient nulle.

Selon cette hypothèse, l'équation de Schrödinger est simplifiée en une fonction d'onde électronique (ψ_e) avec un hamiltonien dû uniquement aux électrons par [1,14-15]:

$$H_e = E_e + V_{ee} + V_{ne} \quad (I-6)$$

En raison de la complexité des interactions électron-électron, cette approximation est insuffisante pour résoudre l'équation de Schrödinger [14].

I.4.2. Approximation Hartree-Fock :

La complexité de l'équation de Schrödinger n'admet pas de solutions analytiques, le problème de sa résolution se réduit à celui du comportement des électrons et ce grâce à l'approximation de Born-Oppenheimer [11].

Cette approximation ramène le problème à N corps au problème à un seul électron. L'hamiltonien peut être écrit comme une somme des hamiltoniens en décrivant un seul électron [16-19].

$$H = H_e = \sum_i H_i \quad (I-7)$$

Ou:

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(r) \quad (I-8)$$

$V(r)$: le potentiel moyen du cristal possédant la périodicité du réseau. Il contient le potentiel périodique due aux ions et les effets dus aux interactions de l'électron avec les autres électrons [20].

I.5. Les théories de calcul élémentaires:**I.5.1. La théorie de l'électron libre :**

En physique du solide, c'est le modèle de l'électron libre qui sert à étudier le comportement des électrons de valence dans la structure cristalline d'un solide métallique [21] qui constitue le point de départ de la physique de l'état solide et qui démontre les propriétés physiques importantes des métaux, en particulier des alcalis. Dans ceux-ci, les cations n'occupent qu'une petite partie du volume du cristal (environ 15 %), les électrons de valence sont électriquement conducteurs et sont appelés électrons de conduction, et leurs fonctions d'onde sont très étendues. [1].

Lorsque l'électron est libre :

- Ne perçoit aucune influence de la part des autres électrons environnants.
- Tous les niveaux d'énergie lui sont permis ; ces niveaux forment une bande continue.
- Les électrons les moins liés aux atomes du métal se déplacent librement dans tout le volume.

Voilà pourquoi le potentiel d'interaction, dans l'équation de Schrödinger, est nul.

Lors de cette approximation, les interactions entre les électrons à conduction libre et les cations sont négligées. L'énergie totale ne comprend que l'énergie cinétique, l'énergie potentielle est négligée. L'étude du modèle de Sommerfeld permet d'écrire l'équation de Schrödinger d'une particule sous la forme [1]:

$$H\psi = E\psi \quad (I-9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = E\psi \quad (\text{I-10})$$

Les fonctions d'onde satisfaisant à l'équation de Schrödinger pour une particule libre et à la condition de périodicité ont la forme d'une onde progressive [1].

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \quad (\text{I-11})$$

Dans le modèle des électrons libres les valeurs permises pour l'énergie sont distribuées de façon continue [1]:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (\text{I-12})$$

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (\text{I-13})$$

Ce modèle à électrons libres très simple est tout à fait adapté pour expliquer, en particulier pour les métaux normaux, un ensemble de faits expérimentaux. En tant qu'applications peut citer :

- ✓ La chaleur spécifique électronique.
- ✓ Le paramagnétisme de Pauli.
- ✓ Les conductivités électriques (loi d'Ohm) et thermiques des métaux ainsi que le pouvoir thermoélectrique des métaux, l'émission thermoionique, l'émission de champ ...

Mais avec ce modèle, il n'est pas possible d'expliquer pourquoi certains solides sont des semi-conducteurs ou des isolants. Ce point est l'un de ses plus grands défauts [1].

I.5.2. La théorie de l'électron presque libre:

On considère que dans le modèle de l'électron presque libre (N.F.E.M.), l'énergie d'attraction de l'électron avec le champ potentiel du réseau cristallin est beaucoup plus faible que l'énergie cinétique de l'électron. [18,22-23].

Selon ce modèle, les électrons de valence qui sont presque libres et qui forment le gaz d'électrons de conduction, baigneront donc dans un potentiel périodique cristallin très faible. Dans ce cas, le champ périodique est considéré comme une perturbation [1]. On peut donc écrire l'hamiltonien comme suit :

$$H = H_0 + U(\mathbf{r}) \quad (\text{I-14})$$

Sous la forme de l'Hamiltonien d'un système « non perturbé », et d'une « perturbation »

$$H = T + U(\mathbf{r}) \quad (\text{I-15})$$

$T = H_0$ Étant l'hamiltonien d'un système libre (non perturbé) et $U(\mathbf{r})$ la perturbation.

$U(\mathbf{r})$: exprimant la perturbation.

L'utilisation de ce modèle d'électrons libres légèrement perturbés par le potentiel cristallin permet de calculer de manière simple de nombreux aspects de la structure des métaux polyvalents [1].

Ils vont se déplacer dans l'ensemble du réseau comme des électrons libres. Ainsi, leurs fonctions vibratoires seront proches de celles des ondes planes $\exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$.

En conséquence, la fonction de Bloch associant la fonction $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ périodique dans le réseau cristallin nous sera d'une grande utilité.

L'application de la théorie des perturbations du premier ordre à un électron se déplaçant dans un champ périodique tridimensionnel permet d'obtenir la fonction d'onde non perturbée d'un l'électron est [1] :

$$\psi_{\mathbf{k}} = C \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{I-16})$$

C: est une constante de normalisation.

\mathbf{k} : est donné par :

$$\mathbf{k} = \frac{g_1}{L_1} \mathbf{b}_1 + \frac{g_2}{L_2} \mathbf{b}_2 + \frac{g_3}{L_3} \mathbf{b}_3 \quad (\text{I-17})$$

Satisfaisant aux limites cycliques [1].

L'équation d'onde [1] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E \psi \quad (\text{I-18})$$

Ou :

$$H = \frac{P^2}{2m} \quad (\text{I-19})$$

$$P = -\hbar^2 \Delta \quad (\text{I-20})$$

Satisfait à la condition :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{g_1}{L_1} \right)^2 + \left(\frac{g_2}{L_2} \right)^2 + \left(\frac{g_3}{L_3} \right)^2 \right] \quad (\text{I-21})$$

Si v est le volume du solide, il s'ensuit que la fonction normalisée ψ s'écrit [1]:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{v}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{I-22})$$

Nous savons que la correction $E^{(1)}$ au premier ordre est donnée par l'équation séculaire [1]:

$$|V_{gg'} - E^{(1)}\delta_{gg'}| \tag{I-23}$$

Si les éléments non diagonaux du déterminant de l'équation séculaire sont nuls, $E^{(1)}$ est alors l'énergie potentielle moyenne du cristal soit [1]:

$$E^{(1)} = \frac{1}{V} \int v(r) dr = \langle V \rangle \tag{I-24}$$

Le potentiel en un point quelconque de la maille peut être considéré comme étant la somme des contributions $v(r - R_j)$ des atomes individuels [1].

$$v(r) = \sum_{j=1}^1 v(r - R_j) \tag{I-25}$$

Le potentiel cristallin est égal à la somme des potentiels atomiques. La difficulté rencontrée dans cette approximation réside dans la résolution de l'équation séculaire qui détermine les structures de bandes $E_n(k)$ et les fonctions propres de l'Hamiltonien [1].

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \tag{I-26}$$

En utilisant la théorie des perturbations des états dégénérés k et $k + g$ on trouve l'énergie à la frontière $\frac{\pi}{a}$. Si k est exactement à la frontière $k^2 = (k + g)^2$; l'équation se réduit à [1]:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm V_g \tag{I-27}$$

Une bande d'énergie interdite d'amplitude $2V_g$ existe à la frontière de la zone (Figure (I-1)) [1].

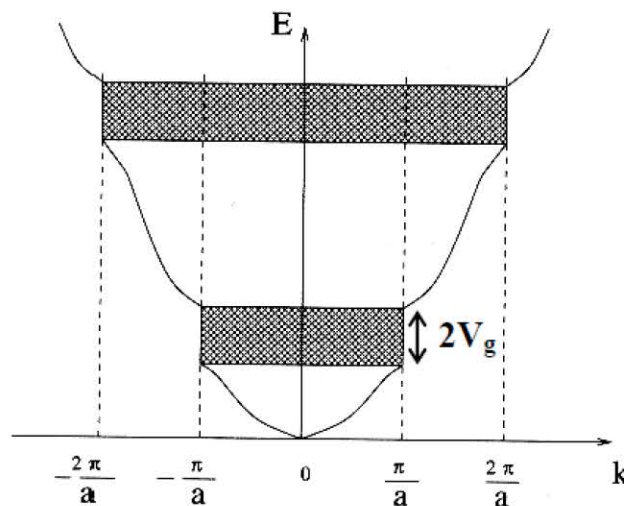


Figure (I-1) : Bande d'énergie interdite à la frontière de la zone de Brillouin [1]

L'application de ce modèle concerne principalement les métaux qui présentent le plus souvent des structures cristallines compactes : cubique centré, cubique centré faces et hexagonal compact. Les alcalis, en particulier, ont tous la structure cubique centrée. Cependant, la réussite inespérée de la méthode des électrons quasi libres pour le spectre d'énergie des métaux normaux suggère qu'il suffit de calculer ce spectre à partir d'un "pseudo potentiel" qui est faible par rapport au potentiel du cristal [1].

I.5.3. La théorie des liaisons fortes:

Elle est largement utilisée pour le calcul des états d'impuretés [24], et les états électroniques des solides [25]. Celle-ci suppose que l'énergie d'interaction de l'électron avec le noyau est supérieure à son énergie cinétique [26]

Dans ce cas on prend l'état d'un électron dans un atome isolé comme approximation d'ordre zéro. Soit H_0 l'hamiltonien d'un atome isolée [2]:

$$H_\alpha = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_\alpha(r) \quad (\text{I-28})$$

$V_\alpha(r)$ Étant l'énergie potentielle de l'électron d'un atome isolé [2].

L'équation de Schrödinger correspondante sera donnée par [2]:

$$H_\alpha \psi_\alpha = E_\alpha \psi_\alpha \quad (\text{I-29})$$

E_α : L'énergie de l'atome isolé.

ψ_α : Fonction d'onde correspondant à cette énergie.

Dans cette approche, la fonction d'onde du cristal s'écrit [2] :

$$\psi^0(r) = \sum_1 C_1 \psi_\alpha(r-l) \quad (\text{I-30})$$

Où :

$\psi_\alpha(r-l)$: Est la fonction d'onde de l'électron appartenant au l^{ième} atome.

$\psi^0(r)$ doit satisfaire aux conditions de translation [2]:

$$\psi_\alpha(r-l) = e^{ikr} \psi^0(r) \quad (\text{I-31})$$

C_1 : est de la forme suivante :

$$C_1 = e^{ikl} \quad (\text{I-32})$$

Ceci permet d'écrire l'expression suivante :

$$\psi^0(r) = \sum_1 e^{ikl} \psi_\alpha(r-l) \quad (\text{I-33})$$

Il est possible de négliger les interactions entre les atomes [2]. On utilise cette théorie pour expliquer la formation de la liaison covalente dans de nombreuses molécules [27].

I. 6. Les méthodes de calculs des structures de bandes :

I. 6. 1. La méthode cellulaire :

Wigner et Seitz introduisent cette méthode pour calculer les structures de bandes électroniques où était la première utilisation [28]

C'est ainsi que la cellule de Wigner-Seitz est défini comme le petit volume générant les plans médians reliant les proches voisins du réseau direct. D'autre part, la méthode cellulaire consiste à diviser le maillage élémentaire en cellules contenant chacune un seul atome. Le potentiel de chaque cellule est sphérique et symétrique [1].

Cette approche considère que si les conditions de Bloch sont respectées tels que [8]:

$$\psi(r + R) = \exp(ik.R) \psi(r) \quad (I-34)$$

$$\psi(r) = \exp(-ik.R) \psi(r + R) \quad (I-35)$$

$$n(r)\Delta\psi(r) = -\exp(-ik.R)n(r + R).\Delta.\psi(r + R) \quad (I-36)$$

Avec : r et $(r+R)$ sont deux points de la même surface de la cellule et n est le vecteur normal à la surface.

En effet, ces relations fournissent une très bonne solution de l'équation de Schrödinger dans une cellule unitaire qui peut être déterminée pour toute cellule primitive [8].

En première approximation, dans cette méthode, il faut remplacer le potentiel $V(r)$ de la cellule unitaire par un potentiel sphérique $U(r)$ et le choisir comme potentiel d'un seul ion original, en ignorant la contribution des ions voisins [29].

La solution complète de l'équation de Schrödinger est de la forme suivante [29]:

$$\Psi_{lm}(r) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (I-37)$$

Où :

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$: Sont les harmoniques sphériques

$\chi_l(r)$: Sont les fonctions radiales qui satisfaisant l'équation de Schrödinger suivante :

$$\ddot{\chi}_l(r) + \frac{2}{r} \dot{\chi}_l(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l(r) = 0 \quad (I-38)$$

$\Psi_{lm}(r)$ est aussi solution de l'équation de Schrödinger dans n'importe quelle combinaison linéaire.

$$\psi(r) = \sum_{lm} A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (I-39)$$

On détermine le spectre $E(k)$ pour k fixe ; À partir de calculer l'énergie E par l'utilisation des conditions aux limites donnant un système d'équation en A_{lm} en annulant le déterminant du système [30-31].

Une cellule de Wigner-Seitz, comme toute cellule primitive, ce dernier du réseau réciproque dans l'espace des impulsions est appelée la zone de Brillouin [32].

I.6.2. Méthodes des ondes planes:

Cette méthode constitue la clé de voûte d'un ensemble de méthodes dites à ondes planes, telles que la méthode des ondes planes orthogonalisées et la méthode des ondes planes augmentées.

La résolution de l'équation de Schrödinger $H\psi = E\psi$, en tenant compte de la périodicité du réseau cristallin, exige le choix d'une forme particulière de la fonction d'onde établie par Bloch.

$$\psi_k(r) = u_k(r) \exp(ikr) \quad (I-40)$$

La relation de dispersion $E_n(k)$ est calculée à l'aide de l'équation séculaire où la connaissance de l'expression décrivant le potentiel cristallin $V(r)$ est nécessaire [2] ce qui est considérée comme un potentiel périodique qui peut être écrit sous la forme de la série de Fourier [8,23].

$$V(r) = \sum_G V(r) \exp(iGr) \quad (I-41)$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r) \psi(r) = E(k) \psi(r) \quad (I-42)$$

I.6.3. Méthode des ondes planes augmentées (A.P.W) :

En 1937 Slater a proposé de développer La méthode des ondes planes augmentées ou APW (en anglais : Augmented Plane Wave) [33-34] pour surmonter le problème des conditions limites [2] qu'impose le théorème de Bloch. Le cristal est orienté comme une combinaison d'ondes planes dans la région interstitielle et d'ondes atomiques dans l'atome (dans la région du cœur ionique) [1].

Ces ondes planes augmentées sont définies par:

$$\psi_k(r) = \Theta(r - r_i) e^{ik \cdot r} + \sum_{l,m} \Theta(r_i - r) \psi_{lm}^a \quad (I-43)$$

Où :

$\Theta(x)$: est une fonction unité en marche d'escalier introduisant soit une onde plane pour $r > r_i$, soit une fonction d'onde atomique pour $r < r_i$.

$$\Theta(r - r_0) = \begin{cases} 1 & \text{pour } r > r_0 \\ 0 & \text{pour } r < r_0 \end{cases} \quad (\text{I-44})$$

Celle-ci, qui fut inspirée par la méthode cellulaire de Wigner Sietz, implique que, le solide étant formé d'un ensemble d'atomes, chaque atome contient un noyau sphérique de rayon r_0 , régi par un potentiel sphérique et une région interstitielle où le potentiel est constant (égal à zéro). La forme de ce potentiel est donnée comme suite [18]:

$$V(r) = \begin{cases} V(|r - R|) & \text{si } |r - R| < r_0 \quad \text{Région du coeur} \\ 0 & \text{si } |r - R| > r_0 \quad \text{Région interstitielle} \end{cases} \quad (\text{I-45})$$

Ce type de potentiel est appelé le potentiel de muffin-tin (nid d'abeilles) ; pour cette forme de potentiel (*Figure (I-2)*) la fonction d'onde s'écrit d'une façon équivalente [8] :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_k(r) &= E \psi_k(r) && \text{pour } |r - R| < r_0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_k(r) + U(|r - R|) &= E \psi_k(r) && \text{pour } |r - R| > r_0 \end{aligned} \quad (\text{I-46})$$

Cette méthode est utilisée pour les métaux [1].

Potentiel de muffin-tin tracé le long d'une rangée d'ions qui est constant (nul) dans les régions interstitielles et représente un ion isolé dans chaque région de coeur [18].

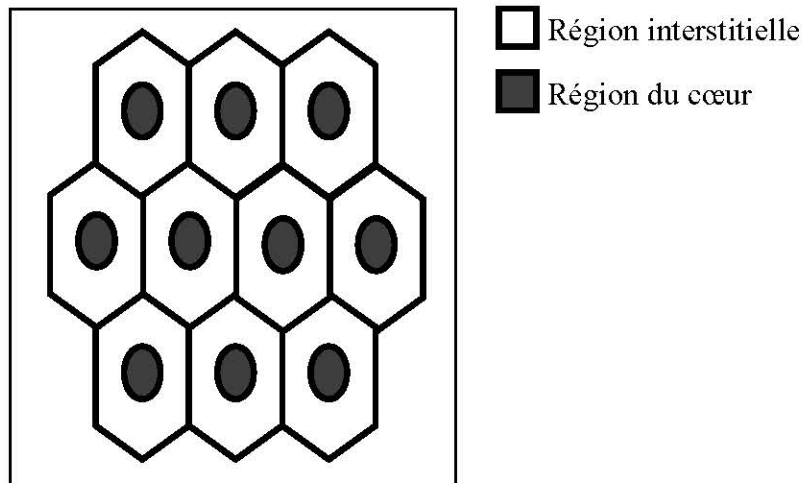


Figure (I-2) : Le potentiel (muffin tin) [2]

I.6.4. La méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W):

En 1940 Herring a proposé la méthode O.P.W (Orthogonalized Plane Waves), qui repose sur l'idée que les états électroniques dans le cristal sont fondamentalement les états d'électrons libres, plus ou moins perturbés par la nature périodique du cristal. Ensuite, les fonctions d'onde des électrons dans le cristal sont développées sur la base des fonctions d'onde des électrons libres, c'est-à-dire des ondes planes dans l'espace entre les ions [2]. Cela pose des problèmes importants.

Herring a pu simplifier cette difficulté en calculant les états propres et les fonctions d'ondes du cœur par la méthode des liaisons fortes (T.B.M) [35-36]; d'où les ondes planes orthogonalisées qui satisfaisant aux conditions de Bloch sont :

$$\psi_k(r) = \exp(ikr) + \sum_c b_c \Phi_k^c(r) \quad (I-47)$$

C : définit le cœur.

$$\int dr \Phi_k^c(r) \psi_k(r) = 0 \quad (I-48)$$

$$b_c = - \int dr \Phi_k^c(r) \exp(ikr) \quad (I-49)$$

ψ_k satisfait la condition de Bloch donc on peut chercher les états propres de l'équation de Schrödinger comme une combinaison linéaire d'ondes planes orthogonalisées (O.P.W).

$$\psi(r) = \sum_k c_k \psi_k(r) \quad (I-50)$$

Les coefficients C_k sont calculés à partir de conditions de Bloch alors que les énergies E_k sont obtenues en utilisant la méthode variationnelle [37].

Depuis sa formulation, elle est devenue une des méthodes les plus utilisées pour [2]:

- calculer les bandes de valence et de conduction et elle a un grand succès à l'étude des métaux mono (poly) valents (propriétés atomiques, spectre de phonons, etc. ...).
- la détermination des structures de bandes des semi-conducteurs, des isolants et des métaux [1]

Les coefficients utilisés dans cette méthode O.P.W pour assurer la propagation des ondes orthogonales avec des conditions aux états du cœur pour construire des potentiels orthogonaux car son effet est de repousser les électrons de valence du cœur [38].

I.6.5. Méthode de Kohn-Korinng-Rostoker (K. K. R.) :

Cette méthode suit la même approche que la méthode APW ; ce qui les différencie, c'est que dans la méthode APW, les fonctions d'essai sont continues à la limite de la sphère atomique, alors que dans la méthode KKR, elles sont discontinues à cette limite [2].

On a considéré un système dont l'hamiltonien H est indépendant du temps. Pour simplifier, on suppose que le spectre H est discret et non dégénéré. La valeur moyenne de l'opérateur H pris pour un état $|\psi\rangle$ est égale à [1]:

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (I-51)$$

Et comme E_0 correspond à l'effet fondamental, l'équation devient :

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_n |C_n|^2 E_n}{\sum_n |C_n|^2} \geq E_0 \quad (I-52)$$

Avec :

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n \quad (I-53)$$

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi\rangle \quad (I-54)$$

Donc, quelle que soit la fonction $|\psi\rangle$, ce qu'on appelle la fonction d'essai, on a toujours une limite inférieure qui est égale dans le meilleur des cas à la valeur de l'énergie du système dans son état fondamental [1].

Le principe de la méthode est donc choisir une fonction d'essai dépendante d'un ou plusieurs paramètres que l'on ajuste de façon à ce que l'énergie obtenue soit minimale. Le choix d'un état $|\psi\rangle$ peut être pris comme une combinaison linéaire de plusieurs autres états [1].

$$|\psi\rangle = \sum_n \lambda_n X_n \quad (I-55)$$

En minimisant l'équation (II-49), nous obtiendrons un système de n équations à n inconnues qui sont les λ_i . Ce système n'admet des racines non nulles que si le déterminant est nul.

La plus petite des racines (elles sont toutes réelles) correspond à l'énergie la plus proche de l'état fondamental pour ce système.

Les fonctions d'ondes $X_i(\mathbf{r})$ sont prises quelques fois comme des orbitales atomiques qui tiennent compte des symétries du problème [1].

I.6.6. La méthode multi-bandes (K. P) :

Cette approche est l'approximation de la masse effective, également connue sous le nom de description des bandes d'énergie dans les semi-conducteurs [8].

Seitz a d'abord appliqué cette méthode pour trouver les masses efficaces, puis Shockley l'a développée pour le calcul des bandes dégénérées. Dresslhaus, Kip et Kittel et Kane ont montré que la méthode k.p peut être considérée comme une méthode empirique en raison de l'effet de l'interaction spin-orbite. Le principe de la méthode est le suivant [1]:

Soit l'équation de Schrödinger :

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right\} \Phi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = E \Phi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) \quad (\text{I-56})$$

Les fonctions d'ondes de l'équation de Schrödinger sont de la forme de Bloch [1]:

$$\Phi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{n}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{I-57})$$

Où :

n : désigne l'indice de la bande.

k : le vecteur d'onde.

I.6.7. La méthode des pseudopotentiels (P. M) :

À partir de 1940, la théorie du pseudopotentiel a été développée par Herring, qui a montré que le cœur n'a aucun effet sur les électrons de valence [1]. C'est à dire les états électroniques de cœur soient insensibles à la configuration électronique voisine ; donc seul les électrons de valence qui meuvent dans un potentiel périodique [39].

Cette méthode est utilisée pour calculer les énergies $E_n(\mathbf{k})$ et d'autres propriétés des semiconducteurs [8].

Nous allons voir au prochain chapitre cette méthode, qui est la plus utilisée dans les calculs, sous une forme d'explication plus détaillée.

Références :

- [1] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [2] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [3] W. Kara Mohamed, thèse de doctorat, Université Mohamed khider-Biskra, (Algérie), 2012.
- [4] D. Trari, mémoire de magister, Université Abou Bekr Belkaid-Tlemcen, (Algérie), 2010.
- [5] Y. Chibane, thèse de doctorat, Université Mohamed Boudiaf-Oran, (Algérie), 2011.

- [6] A. Takhtoukh, thèse de doctorat, Université Paul Verlaine-Metz, (France), 2007.
- [7] L. Hannachi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie), 2010.
- [8] S. Bacha, thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba, (Algérie), 2014.
- [9] M. Boukhtouta, thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba, (Algérie), 2016.
- [10] Kh. Daoud, thèse de doctorat, Ferhat Abbas–Setif, (Algérie), 2012.
- [11] N. Richard, Actinides et terres rares sous pression : Approche pseudopotentiel, Ed. Rapport, France, 2002.
- [12] M. Benhamida, thèse de doctorat, Université de Setif 1, (Algérie), 2014.
- [13] S. Mamoun, thèse de doctorat, Université de Lorraine, (France), 2013.
- [14] S. Bouras, thèse de doctorat, Université Ferhat Abbas-Setif, (Algérie), 2015.
- [15] I. Abdellaoui, mémoire de magister, Université Abou Bekr Belkaid-Tlemcen, (Algérie), 2011.
- [16] H. Stanzel, T. Reisinger, K. Wolf, M. Kastner, B. Halnand, W. Gbhardt, Stat. Sol (b) J. Phys. **187** (1995) 303.
- [17] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan and R. Van. Overstraeten, J. App and références cited therein J. Phys, **87** (2000) 965.
- [18] N. W. Aschroft and N. D. Mermin, Solid. Stat. Physic, Ed. Holt, Benchart and Winston philadelphia, 1976.
- [19] R. Mouici, mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie), 2012.
- [20] F. Barka, mémoire de magister, Univercité de M’sila, (Algerie), (2004).
- [21] https://fr.wikipedia.org/wiki/Mod_electron_libre.
- [22] H. Mathieu, «Physique des Semiconducteurs et des Composants électronique », 4 Ed. Masson, 1998.
- [23] P. Kiréev, « La Physique des semiconducteurs », Ed. Mir, Moscou, 1975.
- [24] M. M. Diarra, thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille, (France), 2009.
- [25] G. Böhan, K. Unger, Physic State Solid (b) J. Phys. 216 (1999) 961.
- [26] C. Kittel, «Physique de l’état solide», Ed. Dunod université ,1983.
- [27] https://fr.wikipedia.org/wiki/Théorie_de_la_liaison_de_valence.
- [28] M. Sigrist, Solid State Theory, ed (2014).
- [29] B. Bradji, D. Djabbari, mémoire de master de physique, Université deTebessa,(Algérie), 2018.
- [30] N. Y. Aouina, mémoire de magister, Université de M’sila, (Algérie), 2003.
- [31] S. Yousfi, mémoire de magister, Université de M’Sila, (Algérie), 2004.
-

- [32] https://fr.qwe.wiki/wiki/Wigner_Seitz_cell.
- [33] J. C. Slater, J.Phys .Rev. **51**(1937) 846.
- [34] R. M. Martin, Electronic Structure, Cambridge university press (2004).
- [35] M. T. Yin and M. L. Cohen, Phy. Rev. B **26** (1982) 5668.
- [36] S. Froyen and M. L.Cohen, Solid state commun, J. Phys. **43** (1998) 447.
- [37] E. Elbaz, Mécanique quantique, ed. Hermann, 1985.
- [38] L. Abdelali, mémoire de magister, Université Djilali Liabes Sidi Bel-Abbes (Algérie), 2009.
- [39] D. Carabet, approche mono électronique, Ed. Aussois ,2006.

Chapitre II

Méthode du pseudopotentiel

II.1.Introduction:

Dernièrement, une nouvelle technique de calcul plus rapide et plus précis a été trouvée par les chercheurs qui permettent de calculer rapidement les propriétés de nombreux solides. Cette technique est nommée « Méthode de pseudopotentiel » [1].

Le principe de base de cette dernière est d'obtenir les états de valence d'un système (atome, molécule, cristal) sans calculer les états du cœur qui ne sont pas nécessaires à la description des propriétés physiques qui suppose que les états électroniques des électrons du cœur sont insensibles à la configuration électronique voisine [2].

II.2. Qu'est-ce qu'un pseudopotentiel ?

C'est un ensemble de méthodes qui visent la substitution du potentiel d'interaction coulombien du noyau et les effets des électrons dits « de cœur », fortement liés, par un potentiel effectif interagissant uniquement avec les électrons dits « de valence » [3].

II.3.La méthode du pseudo-potentiel :

En 1934 Fermi introduisit la méthode pseudopotentiel pour étudier les états atomiques des couches minces [4]. Alors « Hellman » proposa que cette méthode puisse être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des métaux alcalins.

En 1959 l'utilisation de cette méthode fut généralisée grâce à « Philips et Kleiman » qui s'est basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W) [5 ,6].

La formulation de la méthode (O.P.W) en termes de la méthode du pseudopotentiel a en effet permis de développer des méthodes approchées où le pseudopotentiel est traité comme une perturbation [7]. La théorie du pseudopotentiel a débuté comme une extension de la méthode des (OPW) [8]. Mise à part la possibilité qu'elle fournit de raffiner les calculs, et c'est là que réside la relation entre les deux méthodes [9].

La méthode du pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies et d'autres propriétés des semiconducteurs [9].

Elle est encore utilisée pour étudier les propriétés structurelles, les propriétés calculées de l'état fondamental, telles que la constante de réseau d'équilibre, le module de masse et l'énergie cohésive, sont en bon accord avec l'expérience [10].

Un pseudopotentiel peut être généré spécifiquement utilisé pour un système donné (cas des pseudo-potentiels empiriques) ou pour un ensemble de systèmes (moléculaires ou solides) afin d'en décrire les différentes propriétés physiques. Dans tous les cas, la description du « cœur » du pseudopotentiel est inchangée [3].

La méthode pseudopotentiel montre 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, voilà où réside l'avantage de cette méthode [11].

II.4. Formalisme mathématique de la méthode :

Au sein d'un atome ou bien d'un solide, la fonction d'onde des électrons de valence doit être orthogonale à celle du cœur.

C'est dans cette région que la fonction d'onde oscille rapidement (*Figure (II-1)*) ; Voilà pourquoi la fonction d'onde exacte pour un électron de valence est une combinaison linéaire d'ondes planes orthogonalisées [6, 12].

Comme dans la méthode O.P.W la fonction ψ est donnée par la somme d'onde planes ϕ_k^v et des états atomiques occupés du cœur ϕ_k^c :

$$\psi_k(r) = \phi_k^v(r) + \sum b_c \phi_k^c(r) \quad (\text{II-1})$$

$$b_c = \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \quad (\text{II-2})$$

$$\psi_k = \phi_k^v - \sum_c \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \phi_k^c \quad (\text{II-3})$$

La fonction d'onde ψ_k doit être orthogonale aux états du cœur ϕ_k^c [13]:

$$\langle \phi_k^c | \psi_k \rangle = 0 \quad (\text{II-4})$$

ψ_k Fonction d'ondes planes orthogonalisées (O.P.W). (est une combinaison linéaire).

ϕ_k^v Est la pseudofonction d'onde.

ϕ_k^c Les états atomiques occupés du cœur.

À partir de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi_k = E_k \psi_k \quad (\text{II-5})$$

En utilisant l'expression (II-3) et (II-5), nous pouvons démontrer que :

$$H\phi_k^v - H \sum_c \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \phi_k^c = E_k \phi_k^v - E \sum_c \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \phi_k^c \quad (\text{II-6})$$

On sait que :

$$H\phi_k^c = E_k^c \phi_k^c \quad (\text{II-7})$$

Donc :

$$H\phi_k^v + E_k^c \sum_c \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \phi_k^c = E_k \left[\phi_k^v + E_k^c \sum_c \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \phi_k^c \right] \quad (\text{II-8})$$

$$H\phi_k^v + \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \phi_k^c = E_k \phi_k^v \quad (\text{II-9})$$

Avec :

$$V(r)\phi_k^v = \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \phi_k^c | \phi_k^v \rangle \phi_k^c \quad (\text{II-10})$$

On peut écrire l'équation (II-9) d'une façon condensé :

$$(H + V_R)\phi_k^v = E_k \phi_k^v \quad (\text{II-11})$$

Où H est égal :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_C \quad (\text{II-12})$$

À partir des deux relations (II-11) et (II-12), nous pouvons écrire l'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_C + V_R \right] \phi_k^v = E_k \phi_k^v \quad (\text{II-13})$$

Où P est égal :

$$P = -\hbar^2 \Delta \quad (\text{II-14})$$

Et de là H est égal :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_C + V_R \quad (\text{II-15})$$

En remplace l'équation (II-14) dans l'équation (II-13) pour trouver :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_C + V_R \right] \phi_k^v = E_k \phi_k^v \quad (\text{II-16})$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \right] \phi_k^v = E_K \phi_k^v \quad (\text{II-17})$$

On pose : $V_P = V_C + V_R$: représente le pseudopotentiel car c'est la somme d'un potentiel attractif V_C et V_R un potentiel répulsif et devient faiblement attractif dans la région du cœur faiblement répulsif dans la région des électrons de valence [14].

Dans l'équation de Schrödinger on peut considères le pseudopotentiel comme perturbation [15].

V_C : Est le potentiel attractif (négatif) du cœur.

V_R : Est le potentiel répulsif (positif).

V_P : Est le pseudopotentiel faible.

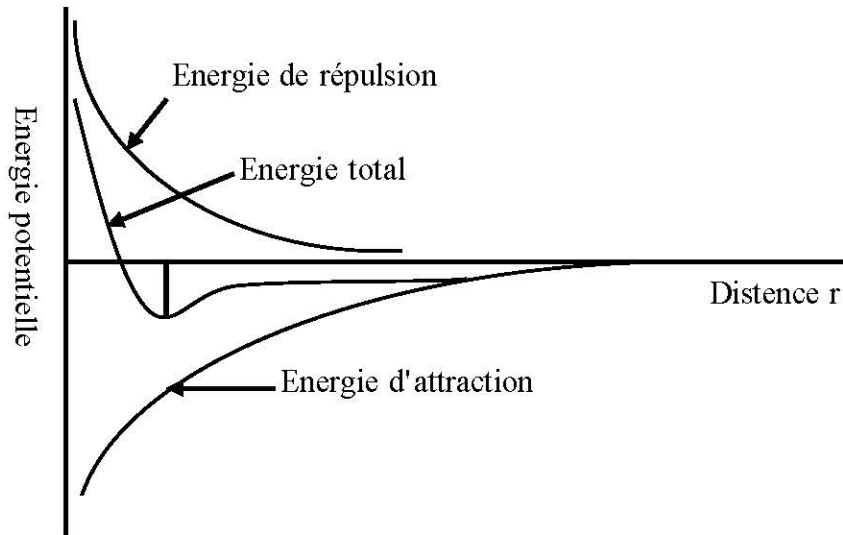


Figure (II-1): Le potentiel d'interactions entre deux atomes en fonction de la distance r [5].

II.5. Caractéristique du pseudopotentiel :

L'opérateur pseudopotentiel V_{ps} qui n'a pas d'expression locale $V_{ps}(r)$, pour le connaître et l'introduire dans les calculs, il suffit de disposer de ses éléments matriciels déterminés sur une base complète de fonctions [16].

$$\psi V_r \psi = \sum_c (E_v + E_v) \left| \int dr \psi^* \psi \right|^2 \quad (\text{II-18})$$

Etant donné que E_v est légèrement supérieure à E_c , donc V_r est toujours positif ainsi $V_{ps} = V_c + V_r$ est très faible d'où l'utilisation de la théorie des électrons presque libres pour le calcul des niveaux de valences.

Lorsque l'effet du cœur est négligé, le pseudopotentiel devient local et dépend explicitement de la position r , il peut être le suivant [17]:

$$V_r = V(r, r_0) = \sum_c (E_v - E_c) |\phi_c(r)\rangle \langle \phi_c(r)| \phi_v(r)\rangle \quad (\text{II-19})$$

Où la fonction ϕ dépend de r .

Si on tient compte de l'effet du cœur, le potentiel devient non local [18].

II.6. Les modèles des pseudopotentiels :

Le principe du pseudopotentiel est principalement basé sur des modèles expérimentaux et les capacités sont utilisées pour "améliorer" les propriétés constatées des semi-conducteurs et de leurs alliages, pour ensuite calculer la structure de bande d'un solide [11, 13].

Selon cette technique, on remplace les potentiels exercés par les noyaux de base et les électrons par un potentiel effectif qui ne s'applique qu'aux électrons de valence [19].

II.6.1. Le modèle local :

Le modèle le plus simple consiste en un potentiel local basé sur la variable r , à cet effet plusieurs formes de potentiel ont été proposées afin de définir les fonctions propres et les valeurs de l'équation de Schrödinger [16].

Il existe trois types de modèle local, qui sont :

II.6.1.a. Le premier modèle:

Celui-ci est formé par un potentiel de Coulomb à large spectre et un potentiel stable dans la région centrale.

Dans ce cas, le modèle probable sera [13]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ -\frac{Z_e}{r_c} & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

Où :

Z : la valence atomique.

r_c : Le potentiel utilisé pour ajuster les données atomique.

II.6.1.b. Le deuxième modèle (modèle d'Aschkroft) :

Le modèle d'Aschkroft suggère que le potentiel est toujours similaire et souvent utilisé, ce qu'on appelle aussi "the empty core potential " [6] étant le potentiel des cœurs inoccupés présenté sous la forme suivante [16, 20]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ 0 & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-21})$$

II.6.1.c. Le troisième modèle (Appelé modèle Heine et Abarenkov) :

Ce modèle introduit plus de flexibilité pour «fitter » les données atomiques [13] en utilisant un potentiel A considéré comme constant dans la région du cœur, dans ce cas la forme du potentiel sera [21]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ A & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-22})$$

II.6.2. Le modèle non local :

Depuis 1976, cette approche a été introduite pour corriger la dépendance énergétique du potentiel répulsif. Elle vise à pallier les insuffisances de l'approche précédente [5].

Le potentiel répulsif dépend de r et de l'énergie E , et cette non-localité peut être corrigée par la dépendance de ce potentiel à l'énergie sous forme de constantes différentes pour chaque état quantique [13].

Pour inclure la dépendance énergétique, on peut remplacer la constante A par ; ainsi le pseudopotentiel non-local peut s'écrire [5,21]:

$$V_p = V_{NL}(r,E) = \sum_I A_I(E) F(r) P_I \quad (\text{II-23})$$

$A_I(E)$: est appelée énergie des états profonds, c'est la constante de la dépendance du Pseudopotentiel en énergie des états du cœur [20].

P_I : est l'opérateur de projection de la 1^{ère} composante des moments angulaires [20].

$F(r)$: est la fonction qui représente l'effet de l'état du cœur elle a plusieurs formes telle que la forme Gaussienne, Heine -Abarenkov, et la forme d'Ashcroft [20].

II.6.2.a. La fonction de Heine-Abarenkov :

Cette fonction très simple exprime l'effet du cœur avec une certaine pondération unitaire [17]. Sa forme est carrée, elle est illustrée dans (*Figure II-2-a*) avec l'expression suivante [16]:

$$F(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r \geq r_c \\ 1 & \text{si } r < r_c \end{cases} \quad (\text{II-24})$$

Avec r_c le rayon du cœur ionique

II.6.2.b. La fonction de Gauss :

C'est une fonction plus réaliste, car ses résultats sont proches et conformes aux résultats expérimentaux [5]. Cette forme gaussienne tient compte de l'effet du cœur [17].

La forme gaussienne illustrée dans (*Figure II-2-b*) se donne par l'expression suivante :

$$F(r) = \exp\left(\frac{-r^2}{r_c^2}\right) \quad (\text{II-25})$$

II.6.2.c. La fonction d'Ashcroft :

On utilise ici la forme carrée pour la fonction $f(r)$, en raison de sa simplicité, sa précision et sa large application[16,22-23], l'effet du cœur est pris en compte dans une fenêtre unitaire pour $r < r_c$ et plus en s'éloigne plus l'effet est atténué jusqu'à l'annulation comme le montre sur la (*Figure II-2-c*) [16].

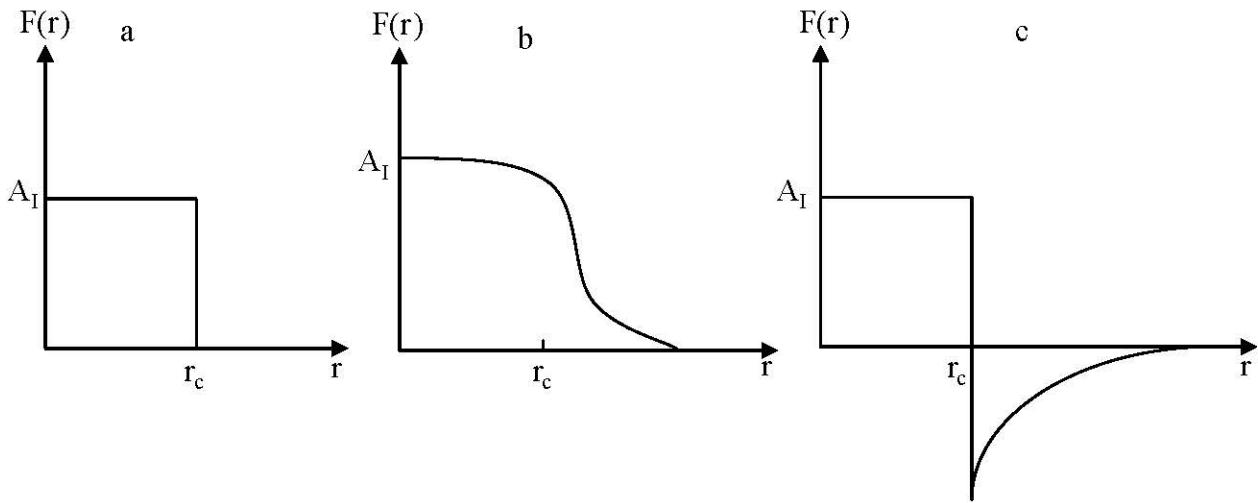


Figure (II-2) : Les modèles du pseudo-potentiel non local.

II.7. La méthode empirique du pseudopotentiel:

Il existe un outil important dans les calculs de la structure des bandes électroniques [24] qui a été appliqué avec succès aux semi-conducteurs de structure diamant et zinc-blende [25] ce qui est appelé une méthode empirique de pseudopotentiel.

L'utilisation de cette méthode permet de déterminer les facteurs de forme et les données expérimentales, telles que l'analyse par rayons X des paramètres des cristaux, la réflexion et l'absorption des cristaux [5].

Le problème de l'ajustement des facteurs de forme expérimentaux $V(G)$ au pseudopotentiel $V_p(r)$, qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques, est résolu par la méthode empirique du pseudopotentiel (E.P.M.), qui est défini par l'expression [22, 26,11]:

$$V_p(r) = \sum_{R,\tau} V_a(r - R - \tau) \tag{II-26}$$

R: est un vecteur du réseau direct.

τ : est un vecteur de la translation réseau direct.

Si en développe le potentiel dans le réseau réciproque, il aura la forme suivante:

$$V_p(r) = \sum_G S(G)V_a(G)\exp(iGr) \tag{II-27}$$

$V_a(G)$: Le facteur de forme.

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iGr) \tag{II-28}$$

$S(G)$: Le facteur de structure.

N_a : Le nombre d'atome de base.

La fonction d'onde $\psi_{n,k}(\mathbf{r})$ et les valeurs des bandes d'énergie $E_n(\mathbf{k})$ sont les solutions de l'équation [27]:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} V_p(\mathbf{r}) \right] \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n,k}(\mathbf{k}) \quad (\text{II-29})$$

n: L'indice de la bande.

Les facteurs de forme des structures étudiées sont donnés comme suit [17] :

$$V(\mathbf{G}) = V^S(\mathbf{G}) \cos(\mathbf{G}\mathbf{r}) + iV^A(\mathbf{G}) \sin(\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{II-30})$$

$$V^S(\mathbf{G}) = \frac{1}{2} [V_A(\mathbf{G}) + V_B(\mathbf{G})] \quad (\text{II-31})$$

$$V^A(\mathbf{G}) = \frac{1}{2} [V_A(\mathbf{G}) - V_B(\mathbf{G})] \quad (\text{II-32})$$

$$\tau = \pm \frac{1}{8} (1,1,1) \mathbf{a} \quad (\text{II-33})$$

Ou : a est le paramètre du réseau.

Le processus de calcul de l'EPM est effectué sur la base du choisi des facteurs de forme $V(\mathbf{G})$ à la structure dont le paramètre de réseau doit être connu.

La résolution de l'équation de Schrödinger donne les valeurs propres $E(\mathbf{k})$ de l'énergie et les pseudofonctions d'ondes $\psi_{n,k}$.

Les résultats ($E(\mathbf{k})$) sont comparés avec ceux de l'expérience. Avec la répétition du processus, jusqu'à l'obtention d'un bon accord. Avec les $E(\mathbf{k})$ et les $\psi_{n,k}$, on peut déduire les gaps, les densités de charge etc. qui seront comparés à l'expérience, en cas de désaccord, les facteurs de forme sont modifiés et le processus se répète jusqu'à la convergence [5, 10,16, 17,28-31,32-36].

II.8. La méthode de calcul du (E.P.M):

Le procédé de calcul de la méthode du pseudopotentiel empirique est comme suit :

- ✓ Choisir les facteurs de forme $V(\mathbf{G})$.
- ✓ Remplacer $V(\mathbf{G})$ dans la relation du pseudopotentiel qui inclut le facteur de structure.
- ✓ Résoudre l'équation de Schrödinger pour obtenir les pseudofonctions d'onde et les valeurs propres des énergies.
- ✓ Comparer la valeur propre d'énergie avec l'expérience.
- ✓ Si les valeurs propres d'énergie sont en bon accord avec l'expérience, arrêter les calculs.
- ✓ Sinon altérer les calculs et choisir d'autres valeurs de $V(\mathbf{G})$.

La procédure de calcul de la méthode (E.P.M) est illustrée dans le diagramme suivant :

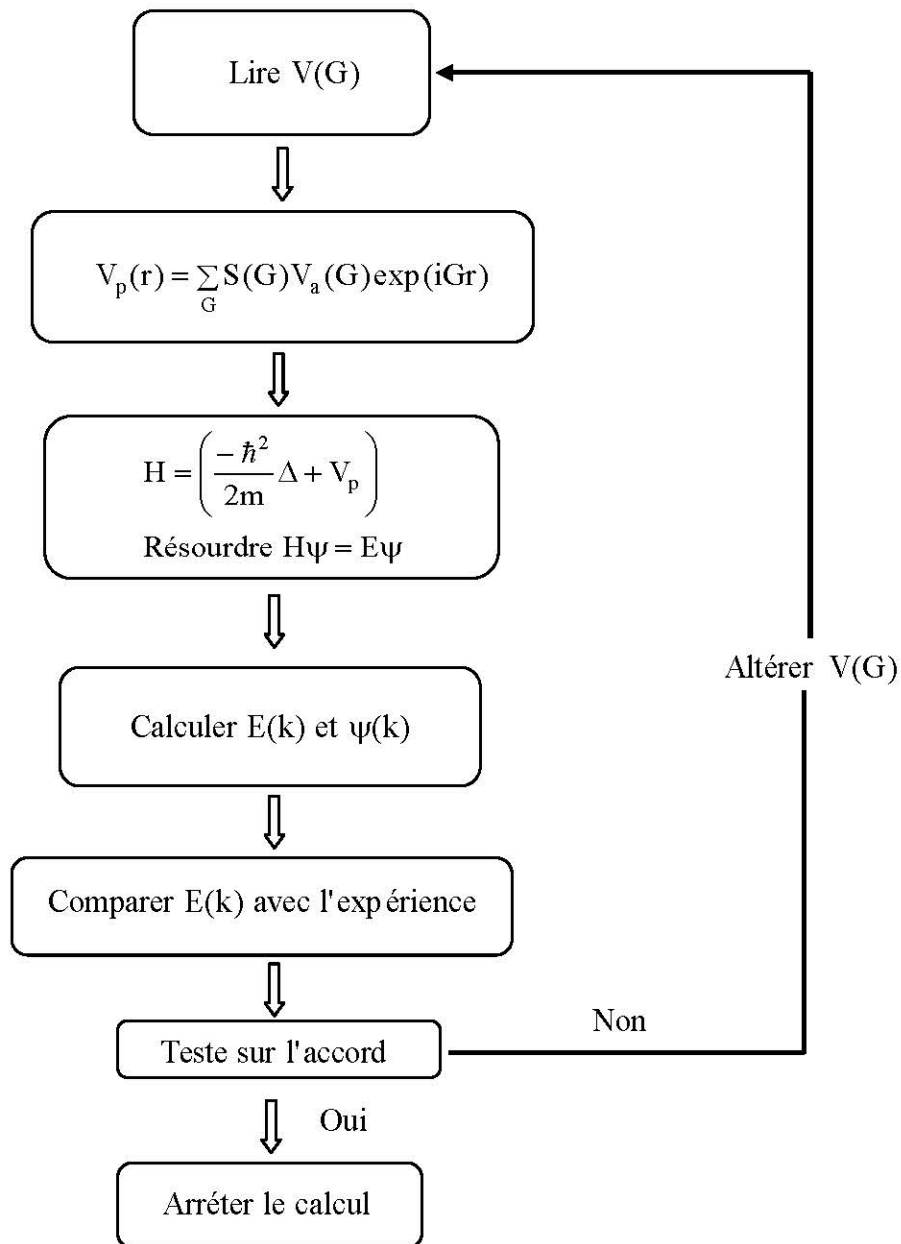


Figure (II-3) : L'organigramme d'E.P.M

II-9. Théorie des alliages semi-conducteurs :

En science des matériaux, on utilise beaucoup les alliages ternaires de semi-conducteurs pour leurs structures de bande et surtout pour la variation de leurs gaps énergétiques en fonction de la composition [8].

En ce qui concerne l'étude des propriétés physiques (électroniques, optiques, structurales, etc.), plusieurs approches théoriques ont été développées, parmi lesquelles : l'approximation virtuelle des cristaux (V.C.A), l'approximation virtuelle améliorée des cristaux (V.C.A.A) [24].

Pour l'approche E.P.M couplé avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) est la plus simple, ce qui nous donne de bons résultats cohérents avec l'expérience [24].

Le gap énergétique calculé par l'approche E.P.M couplé avec la V.C.A donne un paramètre de courbure déviant d'une valeur importante de celle fournie par l'expérience, ceci est dû au fait d'avoir négligé l'effet du désordre ; Pour y remédier, on ajoute un terme correctif à l'hamiltonien appelé potentiel du désordre [8].

II-9-1- L'approximation du cristal virtuel (V.C.A):

Afin d'obtenir une approximation du cristal virtuel, il faut considérer que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Cela permet de préserver la structure de bande du cristal parfait.

En général, les distorsions sont considérées comme suffisamment faibles (théorie des perturbations du premier ordre). [37].

Le cristal ternaire est $A_xB_{1-x}C$ composé des molécules AC avec une fraction molaire x et des molécules BC avec une fraction $(1-x)$. Ainsi, la propriété physique $V(x)$ peut être représentée comme une simple interpolation analytique des propriétés de ses composés binaires AC et BC [37]. La valeur moyenne de la propriété physique V étant [8]:

$$V(x) = xV_{AC} + (1-x)V_{BC} \quad (\text{I-34})$$

Pour l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$:

$$V(x) = xV_{MgTe} + (1-x)V_{ZnTe} \quad (\text{II-35})$$

Afin d'établir le calcul de la structure de la bande, il est nécessaire de construire le potentiel de l'alliage en fonction de la composition, en tenant compte de l'effet du désordre [5].

L'hamiltonien considéré dans la VCA est donné par :

$$H(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{II-36})$$

II.9. 2. L'approximation du cristal virtuel amélioré (V. C. A. A) :

On ajoute un potentiel du désordre compositionnel au potentiel périodique du cristal, L'hamiltonien total du cristal par l'approche E.P.M combiné avec la V.C.A en tenant compte du désordre V.C.A.A est donné par [16]:

$$V_p(\mathbf{r}) = V_{VCA}(\mathbf{r}) + V_{dés}(\mathbf{r}) \quad (\text{II-37})$$

$$V_{dés} = -p [x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (\text{II-38})$$

Où

p: Est le paramètre d'ajustement.

$V_p(\mathbf{r})$: Est le pseudopotentiel du cristal.

V_{VCA} : Le potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}$: Le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel.

$$V_p(\mathbf{r}) = V_{VCA} - p [x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (\text{II-39})$$

L'équation (II-39) peut être écrite sous une forme plus étendue :

$$V_p(\mathbf{r}) = xV_{AC}(\mathbf{r}) + (1-x)V_{BC}(\mathbf{r}) - p [x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{AC}(\mathbf{r}) - V_{BC}(\mathbf{r})] \quad (\text{II-40})$$

Sous une forme plus condensée, en termes de séries de Fourier, $V_p(\mathbf{r})$ devient [16] :

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_G S(\mathbf{G}) V_a(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{II-41})$$

Avec $V(\mathbf{G})$ est le facteur de forme donné par :

$$V(\mathbf{G}) = xV_{AC}(\mathbf{G}) + (1-x)V_{BC}(\mathbf{G}) - p [x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{AC}(\mathbf{G}) - V_{BC}(\mathbf{G})] \quad (\text{II-42})$$

$V_{AC}(\mathbf{G})$ et $V_{BC}(\mathbf{G})$ 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 gaps d'énergie de l'alliage ternaire semi-conducteur $Mg_xZn_{1-x}Te$ en faisant varier la valeur du paramètre p jusqu'à avoir un bon accord avec les valeurs expérimentales. Les facteurs de forme de cet alliage sont calculés selon l'expression suivante [38]:

$$V(\mathbf{G}) = xV_{MgTe}(\mathbf{G}) + (1-x)V_{ZnTe}(\mathbf{G}) - p [x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{MgTe}(\mathbf{G}) - V_{ZnTe}(\mathbf{G})] \quad (\text{II-43})$$

Références :

- [1] B. Bertrand, mémoire de master de physique, université Claude Bernard Lyon 1, (France), 2010.
- [2] U. Von Barth, C.D. Gelatt, Phys. Rev. B **21** (1980) 2222.
- [3] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Pseudo-potentiel>.
- [4] E. Fermi, Nuovo Cimento, J. Phys. **11** (1934)157.
- [5] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [6] J. C. Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. **116** (1959) 287.
- [7] F. Gautier, Les principes de calcul de structure de bande et la notation de pseudopotentiel, journal de Physique, Colloque **C 3** (1967) 5.
- [8] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [9] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Physique des solides, EDP Sciences, Paris (France) 2002.
- [10] S. Bouras, thèse de doctorat, Université Ferhat Abbas-Setif, (Algérie), 2015.
- [11] L. Hannachi, thèse de doctorat, Université de Setif, (Algérie), 2010.
- [12] S. Zerroug, thèse de doctorat, Université de Sétif, (Algérie), 2012.
- [13] R. Mouici, mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie), 2012.
- [14] N. Bouarissa, Mater. Chem. J. Phys. **72** (2001) 387.
- [15] H. Zenasni, mémoire de magister, Université de Tlemcen, (Algérie), 2008.
- [16] S. Bacha, thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba, (Algérie), 2014.
- [17] W. Kara Mohamed, thèse de doctorat, Université Mohamed khider-Biskra, (Algérie), 2012.
- [18] G. Böhan, K. Unger, Physics State Solide (b), J. Phys. **216** (1999) 961.
- [19] J. Dura, thèse de doctorat, Université Aix-Marseille, (France), 2012.
- [20] A. Oualdine, mémoire de magister, Université Mohamed Boudiaf-Oran, (Algérie), 2010.
- [21] V. Heine, I. Abarankov, Phil. Mag. J. Phys. **9** (1964) 451.
- [22] H. Aourag, " pseudopotential method theory and practice", Winter College on Computational condensed matter physics, University of Sidi Bel-Abbes (1995).
- [23] N. W. Ashcroft, Phys. Lett, J. Phys. **23** (1966) 48.
- [24] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer Series in Solid-State Science, Berlin (1988).
- [25] S. Bounab, mémoire de magister, Université de Constantine, (Algérie), (2002).
- [26] J. Chelikowsky, M.L. Cohen, J. Phys. Rev. B **14** (1976) 552.
- [27] N. Hamidane, mémoire de master, Université de Tébessa, (Algérie), 2015.
- [28] D. Trari, mémoire de magister, Université Abou Bekr Belkaid-Tlemcen, (Algérie), 2010.
- [29] Y. Chibane, thèse de doctorat, Université Mohamed Boudiaf-Oran, (Algérie), 2011.

- [30] A. Takhtoukh, thèse de doctorat, Université Paul Verlaine-Metz, (France), 2007.
- [31] F. Barka, mémoire de magister, Université de M'sila, (Algérie), (2004).
- [32] M. Boukhtouta, thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba, (Algérie), 2016.
- [33] Kh. Daoud, thèse de doctorat, Ferhat Abbas–Setif, (Algérie), 2012.
- [34] N. Richard, Actinides et terres rares sous pression : Approche pseudopotentiel, Ed. Rapport, France, 2002.
- [35] M. Benhamida, thèse de doctorat, Université de Setif, (Algérie), 2014.
- [36] S. Mamoun, thèse de doctorat, Université de Lorraine, (France), 2013.
- [37] M. A. Monir, thèse de doctorat, Université de Mascara (Algérie), 2016.
- [38] B. Bradji, D.Djabbari, mémoire de master de physique, Université de Tebessa,(Algérie),2018.

Chapitre III

Résultats et discussions

Résultats et discussions

III.1. Introduction :

Les alliages semi-conducteurs fournissent des moyens naturels d'accorder l'importance de gap interdit afin d'optimiser et élargir les applications des dispositifs semi-conducteurs [1].

On sait que le gap d'énergie est l'un des paramètres les plus importants des dispositifs car elle est fortement liée à la longueur d'onde de fonctionnement des dispositifs optoélectroniques. Par conséquent, la dépendance du gap d'énergie fondamental à la composition de l'alliage est particulièrement importante [2].

Les composés semi-conducteurs II-VI à large bande interdite sont des matériaux d'un intérêt particulier en raison de leurs propriétés magnifiques les plus attrayants notamment pour les dispositifs optoélectroniques de haute performance tels que les diodes électroluminescentes organiques et les diodes laser fonctionnant dans la région spectrale bleue ou ultraviolette. et la forte ionicité de ces composés en fait de bons candidats pour un couplage électro-optique et électromécanique élevé [3, 4].

Le $Mg_xZn_{1-x}Te$ est un alliage de Tellure de Zinc (ZnTe) et de Tellure de Magnésium (MgTe). Sa structure est zinc-blende [5].

Dans ce chapitre, on va étudier les propriétés électroniques à savoir (les gaps énergétiques, les structures de bandes électroniques,...) de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, et leurs variations en fonction de la concentration "x" de Magnésium.

III.2. Etude des propriétés électroniques:

Étant donné le développement de la technologie, d'information et d'industrie. Les semi-conducteurs des composés II-IV ont fait l'objet de spéculations et d'extrapolations [6], notamment en raison de leurs propriétés attractives dans les dispositifs électroniques, électro-optiques et acoustiques [7].

Pour étudier les propriétés physiques et chimiques des alliages semi-conducteurs, beaucoup de chercheurs ont développé plusieurs méthodes théoriques. Cependant, la méthode des pseudopotentiels empiriques reste la plus simple qui offre les résultats les plus compatibles à l'expérience [8]. Alors, les calculs sont principalement basés sur cette méthode (EPM) avec l'utilisation de l'approximation du cristal virtuel (VCA) améliorée [9] qui introduit l'effet du désordre compositionnel, comme un potentiel effectif. Elle est utilisée pour étudier les propriétés électroniques, à savoir : les gaps énergétiques, la structure de bandes électronique, ... etc. [10].

Le pseudopotentiel empirique du cristal est défini comme étant une superposition linéaire des potentiels atomiques [1, 11-13] qui sont modifiés pour obtenir de bons ajustements aux gaps expérimentaux directs et indirects [14].

Le pseudopotentiel est de la forme suivante [14]:

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) + V_{NL}(\mathbf{r}) \quad (\text{III-1})$$

Où :

$V_L(\mathbf{r})$: est la partie locale du pseudopotentiel.

$V_{NL}(\mathbf{r})$: est la partie non locale du pseudopotentiel.

Dans nos calculs on a omis les parties non locales et on a considéré les composants de Fourier $V_L(\mathbf{r})$ comme des paramètres du pseudopotentiel [1].

$$V_p(\vec{\mathbf{r}}) = V_L(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\vec{\mathbf{G}}} V(\vec{\mathbf{G}}) S(\vec{\mathbf{G}}) e^{i\vec{\mathbf{G}}\vec{\mathbf{r}}} \quad (\text{III-2})$$

Où:

$S(\vec{\mathbf{G}})$ et $V(\vec{\mathbf{G}})$ sont les facteurs de structure et les facteurs de forme.

La nature empirique de la méthode pseudopotentielle consiste à ajuster les facteurs de forme pour obtenir l'accord le plus proche des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs expérimentales disponibles [15].

Ces facteurs de forme, initialement issus de la théorie, sont ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés dont les paramètres sont optimisés selon un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée [16] du gap entre les niveaux d'énergie définis par [1]:

$$\delta = \left[\sum_{i,j} \frac{(\Delta E_{i,j})^2}{m-n} \right]^{1/2} \quad (\text{III-3})$$

δ : doit être minimal.

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{\text{exp}}^{ij} - E_{\text{cal}}^{ij} \quad (\text{III-4})$$

E_{exp}^{ij} et E_{cal}^{ij} sont, respectivement, les énergies mesurées et celles calculées entre le $i^{\text{ème}}$ état au vecteur d'onde ($k = k_i$) et le $j^{\text{ème}}$ état au vecteur d'onde ($k = k_j$) dans les m paires choisis (i, j), n étant le nombre des paramètres du pseudopotentiel empirique [17].

Les valeurs de départ des facteurs de forme sont améliorées de manière itérative jusqu'à minimiser le $\delta = 10^{-6}$ dans nos calculs [1].

Des études expérimentales et théoriques récentes sur plusieurs alliages de semi-conducteurs indiquent que VCA est rompue lorsque la différence entre les propriétés électroniques des atomes constitutifs dépasse une certaine valeur critique. Toutefois, la VCA avec et sans désordre de la composition est utilisée pour l'étude des propriétés physiques des alliages ternaires [15,18].

Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ainsi que les paramètres de réseau des composés semi-conducteurs binaires ZnTe et MgTe dans la phase zinc blende sont montrés dans le tableau (III-1).

Tableau (III-1) : Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs ZnTe et MgTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en ($Å^\circ$).

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau a
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
ZnTe	-0.2889	0.0	0.05143	0.016334	0.1422	-0.1261	11.5343 (u. a)
							6.1037 ($Å^\circ$)
MgTe	-0.3302	0.2038	-0.0285	0.2085	0.0	0.03194	11.9998 (u. a)
							6.350 ($Å^\circ$)

$Mg_xZn_{1-x}Te$: est composé des binaires MgTe et ZnTe.

Les paramètres du réseau de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ varient de 6.1037 ($Å^\circ$) pour le ZnTe à 6.350 ($Å^\circ$) pour le MgTe.

III.3. Etude des gaps énergétiques de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$:

Le gap est la largeur de la bande interdite, qui est l'intervalle d'énergie entre l'état d'énergie le plus élevé de la bande de valence et l'état d'énergie le plus bas de la bande de conduction. Il y a deux types de gap d'énergie, le gap direct et le gap indirect.

Dans cette partie, à travers notre observation de la dépendance de la composition des gaps d'énergie pour les composés binaires MgTe, ZnTe de la famille II-VI et leurs alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$, on désigne gap direct E_T^Γ (pris comme étant la transition $(\Gamma_C - \Gamma_V)$) et gap indirects E_T^X (pris comme étant la transition $(X_C - \Gamma_V)$) et E_T^L (pris comme étant la transition $(X_C - \Gamma_V)$).

Dans nos calculs les gaps d'énergies aux points Γ , X et L de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ pour les composés binaires MgTe et ZnTe pour la concentration Mg : $x = [0-1]$ avec et sans désordre compositionnel sont présenter dans le tableau (III-2) suivant:

Tableau (III-2): Les gaps énergétiques aux points Γ , X et L de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$

Composé	Gaps d'énergie (eV)					
	E_{Γ}^{Γ}		E_{Γ}^X		E_{Γ}^L	
	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.
ZnTe	2.38, 2.57 ^{a, b}	2.39087	3.05 ^{a, b}	3.05203	3.07 ^{a, b} 2.38 ^c	2.68198
Mg _{0.1} Zn _{0.9} Te	-	2.491747 [*] 2.387336 ^{**}	-	3.016746 [*] 3.053256 ^{**}	-	2.758793 [*] 2.6793 ^{**}
Mg _{0.3} Zn _{0.7} Te	-	2.693501 [*] 2.534011 ^{**}	-	2.946198 [*] 3.001967 ^{**}	-	2.912399 [*] 2.790971 ^{**}
Mg _{0.5} Zn _{0.5} Te	-	2.895255 [*] 2.721237 ^{**}	-	2.87565 [*] 2.936499 ^{**}	-	3.066005 [*] 2.933516 ^{**}
Mg _{0.7} Zn _{0.3} Te	-	3.097009 [*] 2.937519 ^{**}	-	2.805102 [*] 2.860871 ^{**}	-	3.219611 [*] 3.098183 ^{**}
Mg _{0.9} Zn _{0.1} Te	-	3.298763 [*] 3.194352 ^{**}	-	2.734554 [*] 2.771064 ^{**}	-	3.373217 [*] 3.293724 ^{**}
MgTe	3.4 ^a	3.39964	2.5 ^a	2.69928	-	3.45002

* : Nos calculs sans désordre.

** : Nos calculs avec désordre.

(a):Ref [19].

(b):Ref [4].

(c):Ref [20].

En utilisant nos facteurs de forme, on a trouvé que les résultats obtenus à partir des gaps d'énergies E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X et E_{Γ}^L calculés pour les composés binaires MgTe et ZnTe, sont en bon accord avec les autres valeurs disponibles indiquées dans *le tableau (III-2)*.

On constate également que: Avec l'augmentation de la concentration "x" de Magnésium avec et sans désordre compositionnel; les valeurs des gaps d'énergie E_{Γ}^{Γ} et E_{Γ}^L de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ augmentent; Par contre le gap E_{Γ}^X diminue.

Les variations des gaps d'énergie E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X , E_{Γ}^L , E_X^X , E_L^L de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration "x" de Magnésium, à partir de ZnTe (x=0) jusqu'à MgTe (x=1) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel sont illustrées dans *les figures ((III-1) (III5))*

D'après les figures, on peut dire que les courbes des quatre gaps énergétiques (gaps directs E_T^Γ , E_X^X , E_L^L et gap indirect E_T^L) sont presque similaires.

Les interpolations quadratiques de ces courbes sont ajustées selon les fonctions analytiques de la forme suivante:

$$E = a + bx + cx^2 \quad (\text{III-5})$$

Où :

c: est le paramètre de courbure du gap d'énergie.

L'unité du gap d'énergie est (eV).

La Figure (III-1) illustre la variation du gap d'énergie E_T^Γ en fonction de la composition x de Magnésium en allant de x=0 (ZnTe) à x=1 (MgTe).

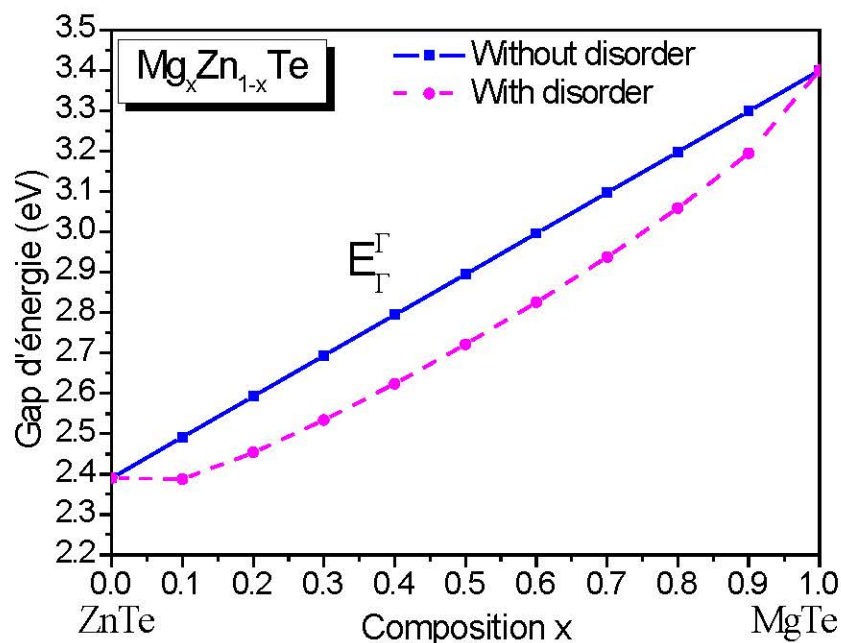


Figure (III-1): la variation du gap E_T^Γ en fonction de la concentration "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

À travers la Figure (III-1) ; On observe que :

Lorsqu'on augmente la concentration x de Magnésium en allant de x=0 (ZnTe) jusqu'à x=1 (MgTe), le gap d'énergie direct E_T^Γ augmente aussi de la valeur 2.4 eV pour le composé binaire ZnTe à la valeur 3.4 eV pour le composé binaire MgTe. Cette augmentation est presque linéaire si on néglige l'effet de désordre, et elle est non linéaire lorsqu'on prend en compte cet effet.

L'effet de désordre est clair et on ne peut pas le négliger.

➤ Les expressions analytiques pour gap direct E_T^Γ sont comme suites :

$$E_T^L(\text{eV}) = 2.39087 + 1.00877 x - 3.3306691 \times 10^{-16} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-6})$$

$$E_T^L(\text{eV}) = 2.3712561 + 0.33877 x + 0.67 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-7})$$

À partir de l'équation (III-6) et (III-7), on note que :

- ✓ Lorsque l'effet du désordre compositionnel n'est pas pris en compte ($p = 0$) en utilisant la (VCA) le bowing (le paramètre de courbure) est égale à ($c = -3.3306691 \times 10^{-16} \text{ eV}$). Ce dernier est négatif et plus petit ce qu'il est en désaccord avec la valeur expérimentale du paramètre de courbure optique qui est égale à ($0,67 \text{ eV}$).
- ✓ Quand on prit en compte l'effet du désordre compositionnel ($p \neq 0$) en utilisant la (VCA améliorée) dans le potentiel total du cristal, la valeur calculée du paramètre de courbure optique devient (0.67 eV), pour une valeur du paramètre ajustable égale à ($p = 0.34501031$). Cette valeur obtenue est en très bon accord avec le paramètre de courbure expérimentale ($c = 0.67 \text{ eV}$).

La variation du gap d'énergie E_T^L en fonction de la composition x de Magnésium en allant de 0 à 1 est illustrée dans la Figure (III-2).

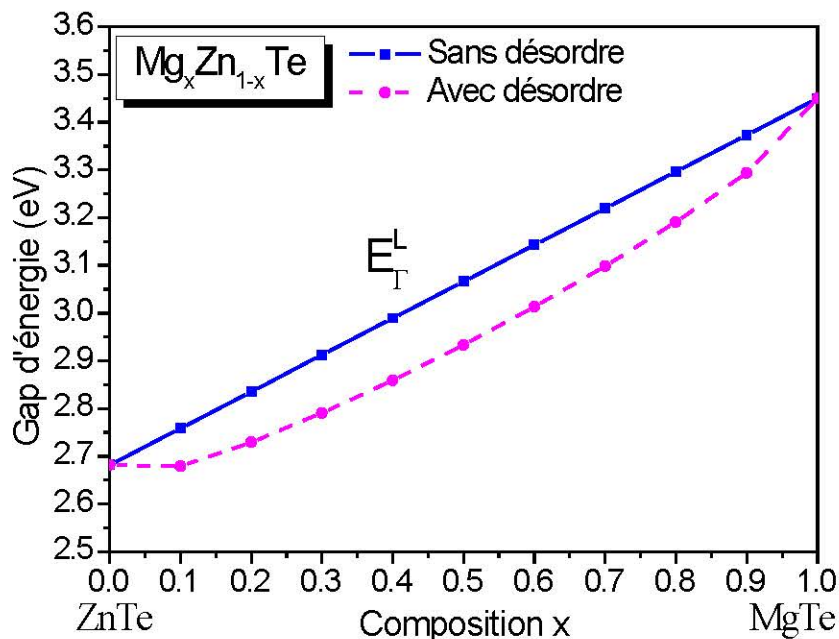


Figure (III-2): la variation du gap E_T^L en fonction de la concentration "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Selon la Figure (III-2) ; On constate que :

En augmentant la concentration x de Magnésium en allant de $x=0$ (ZnTe) jusqu'à $x=1$ (MgTe), le gap d'énergie indirect E_T^L augmente aussi, de la valeur 2.68 eV pour le composé binaire

ZnTe à la valeur 3,45 eV pour le composé binaire MgTe. Cette augmentation est presque linéaire si on néglige l'effet de désordre, et elle est non linéaire lorsqu'on prend en compte cet effet.

L'effet de désordre est clair et on ne peut pas le négliger.

- Les expressions analytiques pour le gap indirect E_T^L sont comme suit :

$$E_T^L(\text{eV}) = 2.68199 + 0.76803 x - 7.7715612 \times 10^{-16} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-8})$$

$$E_T^L(\text{eV}) = 2.6670569 + 0.2579236 x + 0.5101064 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-9})$$

Dans les équations (III-8) et (III-9), on remarque que :

- ✓ Le paramètre de courbure est égale à ($c = -7.7715612 \times 10^{-16} \text{ eV}$), si on néglige l'effet du désordre compositionnel (VCA) ; Ce dernier est très petit et négatif.
- ✓ Si on prend en compte de l'effet du désordre (VCAA), le paramètre de courbure est égale à ($c = 0.5101064 \text{ eV}$) ; Ce dernier devient positif.

La variation du gap d'énergie E_T^X en fonction de la composition x de Magnésium en allant de 0 à 1 est illustrée dans la Figure (III-3).

D'après la Figure (III-3), on observe que :

Le gap d'énergie indirect E_T^X diminue avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium en allant de la concentration $x=0$ (ZnTe) à la valeur (3.05eV) jusqu'à $x=1$ (MgTe) à la valeur (2.68eV). Cette diminution est presque linéaire si on néglige l'effet de désordre, et elle est non linéaire lorsqu'on prend en compte cet effet.

L'effet de désordre est clair et on ne peut pas le négliger.

- Les expressions analytiques pour le gap indirect E_T^X sont comme suit :

$$E_T^X(\text{eV}) = 3.05202 - 0.35274 x + 5.5511151 \times 10^{-17} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-10})$$

$$E_T^X(\text{eV}) = 3.0588785 - 0.1184589 x - 0.2342811 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-11})$$

Dans les équations (III-10) et (III-11), on constate que :

- ✓ Lorsqu'on néglige l'effet du désordre compositionnel (dans le cas VCA) le paramètre de courbure est égale à ($c = 5.5511151 \times 10^{-17} \text{ eV}$) ; il est très petit.
- ✓ Lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre (dans le cas VCAA), le paramètre de courbure est égale à ($c = -0.2342811 \text{ eV}$) ; Ce dernier est négatif et faible.

La variation des gaps d'énergies E_X^X et E_T^L en fonction de la composition x de Magnésium en allant de 0 à 1 sont illustrées dans les Figures (III-4) et (III-5).

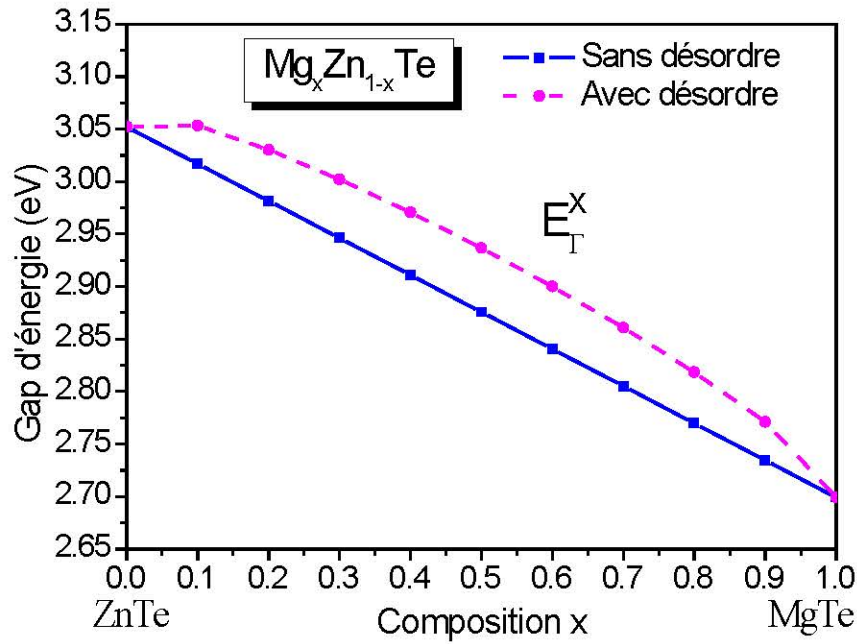


Figure (III-3): la variation du gap E_T^X en fonction de la concentration “x” de Magnésium de l’alliage ternaire $Mg_x Zn_{1-x} Te$ avec et sans tenir compte de l’effet du désordre compositionnel.

On peut noter que:

Quand la concentration de Magnésium augmente en allant de $x=0$ (ZnTe) jusqu’à $x=1$ (MgTe), le gap d’énergie direct E_x^X augmente de la valeur 4.19 eV pour le composé binaire ZnTe à la valeur 4,65 eV pour le composé binaire MgTe. Même observation pour le gap d’énergie direct E_L^L augmente aussi de la valeur 3.15 eV pour le composé binaire ZnTe à la valeur 4.3 eV pour le composé binaire MgTe.

Cette augmentation est presque linéaire si on néglige l’effet de désordre, et elle est non linéaire lorsqu’on prend en compte cet effet.

L’effet de désordre est clair et on ne peut pas le négligé.

➤ Les expressions analytiques pour les gaps d’énergies E_x^X et E_L^L sont comme suites :

$$E_x^X(\text{eV}) = 4.19322 + 0.47872 x + 2.0539126 \times 10^{-15} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-12})$$

$$E_x^X(\text{eV}) = 4.1839121 + 0.1607661 x + 0.3179539 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-13})$$

$$E_L^L(\text{eV}) = 3.14504 + 1.17971 x - 2.220446 \times 10^{-16} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-14})$$

$$E_L^L(\text{eV}) = 3.1221024 + 0.3961759 x + 0.7835341 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-15})$$

Dans les équations (III-12) et (III-13), on remarque que :

- ✓ Si on néglige l'effet du désordre (VCA) le paramètre de courbure est égale à ($c = 2.0539126 \times 10^{-15} \text{ ev}$) ; Ce dernier est très petit.
- ✓ Si on prend en compte l'effet du désordre (dans le cas VCAA), le paramètres de courbure est égale à ($c = 0.3179539 \text{ ev}$) ; Ce dernier est positif, mais il est très faible.

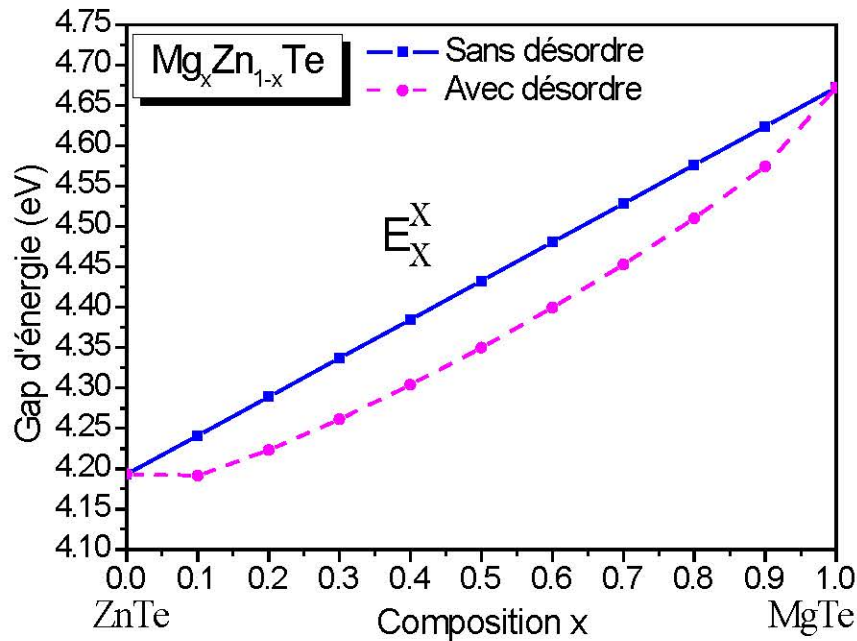


Figure (III-4) : la variation du gap d'énergie E_X^X en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

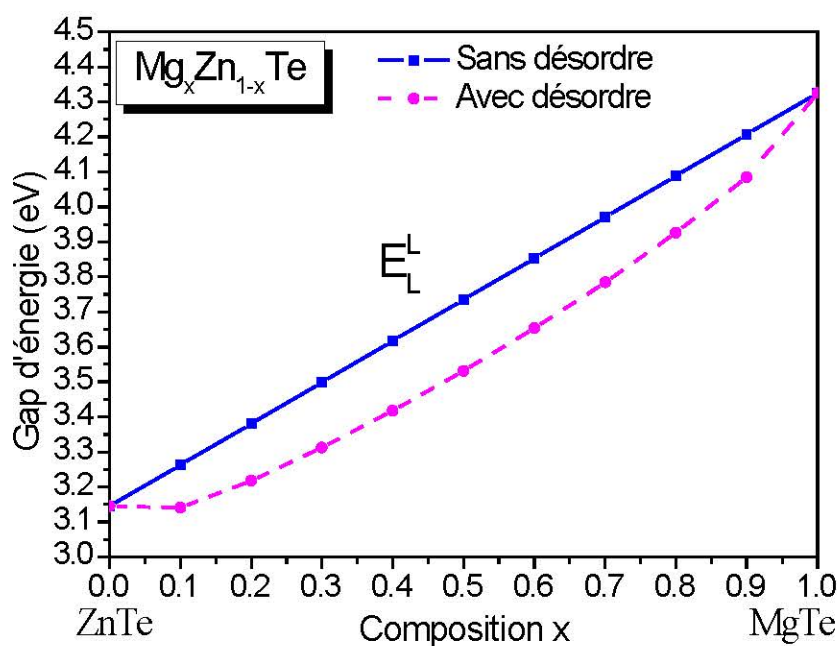


Figure (III-5) : la variation du gap d'énergie E_g^L en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Dans les équations (III-14) et (III-15), on constate que :

- ✓ En cas où on néglige l'effet du désordre compositionnel (VCA); le paramètre de courbure est égale à ($c = -2.220446 \times 10^{-16}$ ev) ; Ce nombre est très faible et négatif.

Si on tient compte de l'effet du désordre (VCAA), le paramètres de courbure est égale à ($c = 0.7835341$ ev) ; Ce dernier devient positif et considérable.

Nos résultats ont montré que, si on néglige le potentiel du désordre ($p = 0$), c'est-à-dire qu'en utilisant le potentiel de l'alliage calculé par la VCA, la méthode EPM ne donne pas les valeurs exactes du bowing (les paramètres de courbures) [1]; mais si on prend en considération l'effet de désordre (c'est-à-dire qu'en utilisant le potentiel de l'alliage calculé par la VCAA) on obtient des valeurs plus proches aux valeurs expérimentales.

- La variation des gaps d'énergies direct et indirects E_T^I , E_T^X et E_T^L en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ sans désordre compositionnel (VCA) et avec désordre compositionnel (VCAA) sont illustrées dans les figures (III-6) et (III-7).

D'après ces figures (III-6) et (III-7) ; on constate que:

Lorsqu'on augmente la concentration x de Magnésium de $x=0$ (ZnTe) jusqu'à $x=1$ (MgTe) :

- Les gaps énergétiques E_T^I (le gap direct) et E_T^L (gap indirect) augmentent de façon presque linéaire, tandis que E_T^X (gap indirect) diminue de la même façon.
- Il y a un point d'intersection à une concentration ($x=0.49$) de Magnésium sans désordre (VCA), qui représente la transition du gap direct E_T^I vers le gap indirect E_T^X . On peut dire que l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ a un gap direct E_T^I pour l'intervalle de la concentration x de Magnésium entre [0, 0.49]. Par contre pour l'intervalle de la concentration x de Magnésium entre [0.49, 1], il devient un semi-conducteur à gap indirect E_T^X .
- Ce point d'intersection augmente à la concentration ($x=0.65$) de Magnésium avec désordre (VCAA), c.à.d une transition du gap direct E_T^I vers le gap indirect E_T^X . on peut conclure que l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ a un gap direct E_T^I dans l'intervalle de la concentration x de Magnésium entre [0, 0.65]. À l'inverse pour l'intervalle de la concentration x de Magnésium entre [0.65, 1], il devient un semi-conducteur à gap indirect E_T^X .

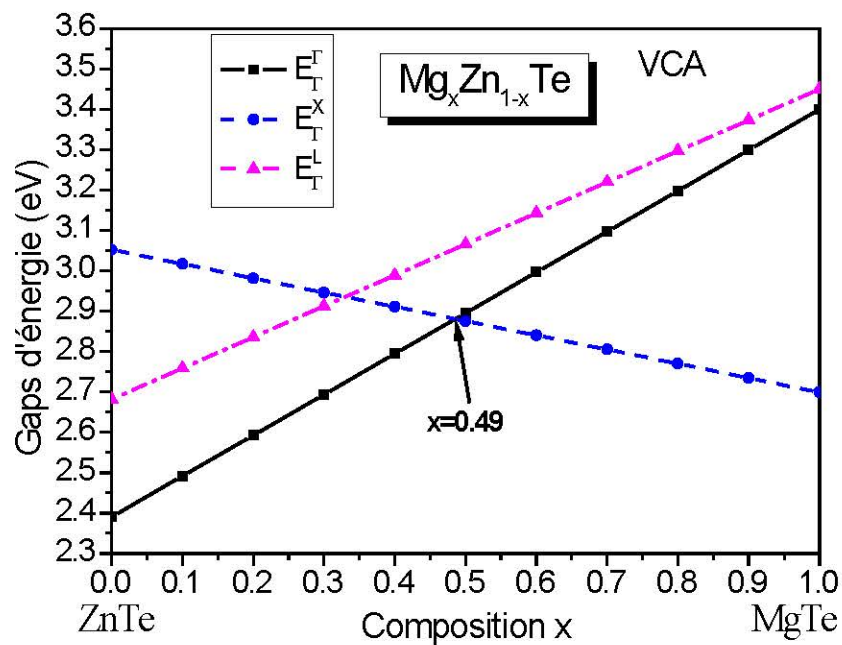


Figure (III-6): gaps d'énergies direct et indirects en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ calculés sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

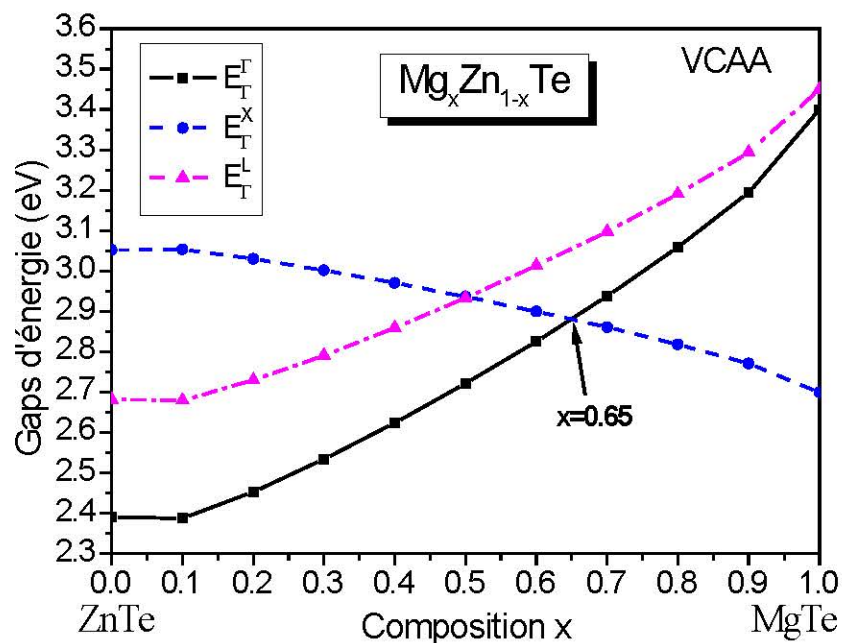


Figure (III-7): gaps d'énergies directes et indirects en fonction de la concentration "x" de Magnésium dans l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.

La Figure (III-8) représente la variation du gap antisymétrique d'énergie $E_{(2-1)v}^x$ en fonction de la composition "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Ce gap se situe entre la première et la deuxième bande de valence.

Ce gap est relié à la différence des potentiels des cations et des anions. Ce gap «antisymétrique» a été proposé comme une mesure qualitative de l'ionicté de ces alliages, ce qui confirme la proposition de *Chelikowsky et al.* [21] et affirme les résultats trouvés par *Bouarissa et al.* [22].

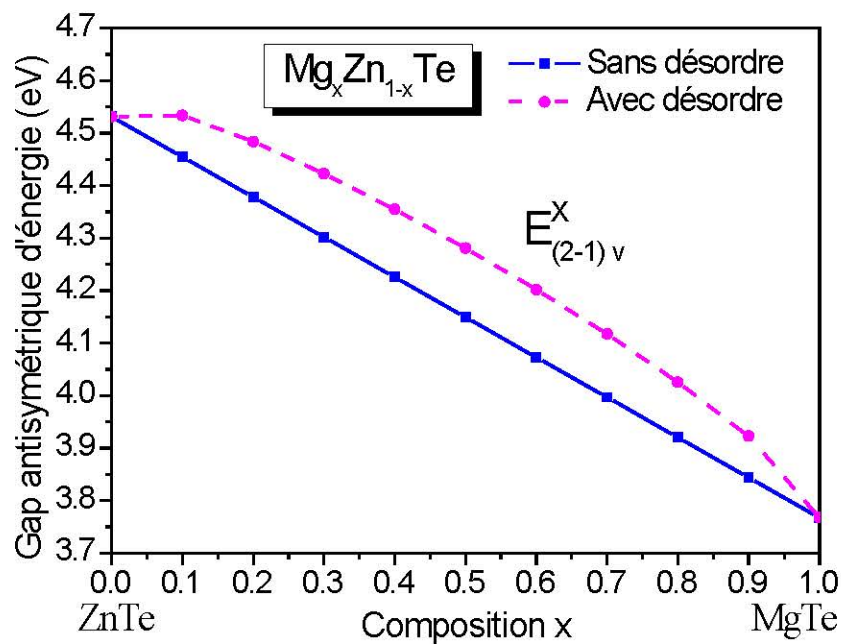


Figure (III-8): la variation du gap antisymétrique d'énergie $E_{(2-1)v}^x$ en fonction de la composition "x" de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

- ✓ On constate que, lorsqu'on augmente la concentration x de Magnésium en allant de $x=0$ (ZnTe) jusqu'à $x=1$ (MgTe), le gap d'énergie antisymétrique $E_{(2-1)v}^x$ diminue de la valeur 4.53091 eV pour le composé binaire ZnTe à la valeur 3.76742 eV pour le composé binaire MgTe. Cette diminution est presque linéaire lorsqu'on ne prend pas en compte l'effet de désordre, et elle est non linéaire si on prend en compte cet effet.
- ✓ L'effet de désordre est clair et on ne peut pas le négliger.

Les expressions analytiques de gap antisymétrique d'énergie $E_{(2-1)v}^x$ de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans désordre sont:

$$E_{(2-1)v}^x(\text{eV}) = 4.53091 - 0.76349x - 3.3306691 \times 10^{-16}x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-15})$$

$$E_{(2-1)v}^X(\text{eV}) = 4.5457548 - 0.2563989 x - 0.5070911 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-16})$$

- ❖ La variation du gap antisymétrique $E_{(2-1)v}^X$ de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ au point de haute symétrie "X", avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel et l'ionicté des composés binaires ZnTe et MgTe sont illustrées dans le tableau (III-3).

Tableau (III.3): La variation du gap antisymétrique $E_{(2-1)v}^X$ et l'ionicté des composés binaires MgTe et ZnTe

Matériaux	Energie $E_{(2-1)v}^X$ (eV)	Ionicté
ZnTe	4.53091	0.609 ^a
Mg _{0.1} Zn _{0.9} Te	4.454561 ^{**} 4.533585 ^{***}	—
Mg _{0.3} Zn _{0.7} Te	4.301863 ^{**} 4.422574 ^{***}	—
Mg _{0.5} Zn _{0.5} Te	4.149165 ^{**} 4.280871 ^{***}	—
Mg _{0.7} Zn _{0.3} Te	3.996467 ^{**} 4.117178 ^{***}	—
Mg _{0.9} Zn _{0.1} Te	3.843769 ^{**} 3.922793 ^{***}	—
MgTe	3.76742	0.525 ^b 0.554 ^c

* Nos calculs sans désordre

** Nos calculs avec désordre

(a): Ref [19].

(b): Ref [23].

(c): Ref [24].

Les valeurs du gap antisymétrique des composés binaires ZnTe et MgTe sont: (4.53091 eV) et (3.76742 eV) respectivement. Ce gap antisymétrique diminue avec l'augmentation de la concentration "x" de Magnésium; ce qui signifie une diminution de l'ionicté de l'alliage $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ avec l'augmentation de la concentration "x" de Magnésium. Donc le ZnTe est plus ionique que le MgTe. On peut voir aussi que l'effet de désordre augmente le gap antisymétrique, ce qui implique que l'effet de désordre augmente également l'ionicté de l'alliage.

la figure (III-9) illustre la variation du gap $E_{(1-4)v}^\Gamma$ de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ au point de haute symétrie "Γ", avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Ce gap est la largeur de bande entre la première et la quatrième bande de valence.

On peut constater que la largeur de la bande de valence diminue avec l'augmentation de la concentration du Magnésium (tableau III-4). Cette diminution est linéaire lorsqu'on néglige l'effet du désordre et non linéaire en prenant compte de l'effet du désordre, suggérant une décroissance du caractère covalent et l'apparition du caractère ionique. Généralement, cet effet est dû aux fortes

hybridations entre les plus proches orbitales s, p sous l'effet de la composition stœchiométrique x de Magnésium. Cela est en accord avec les travaux de Bouarissa [25-27].

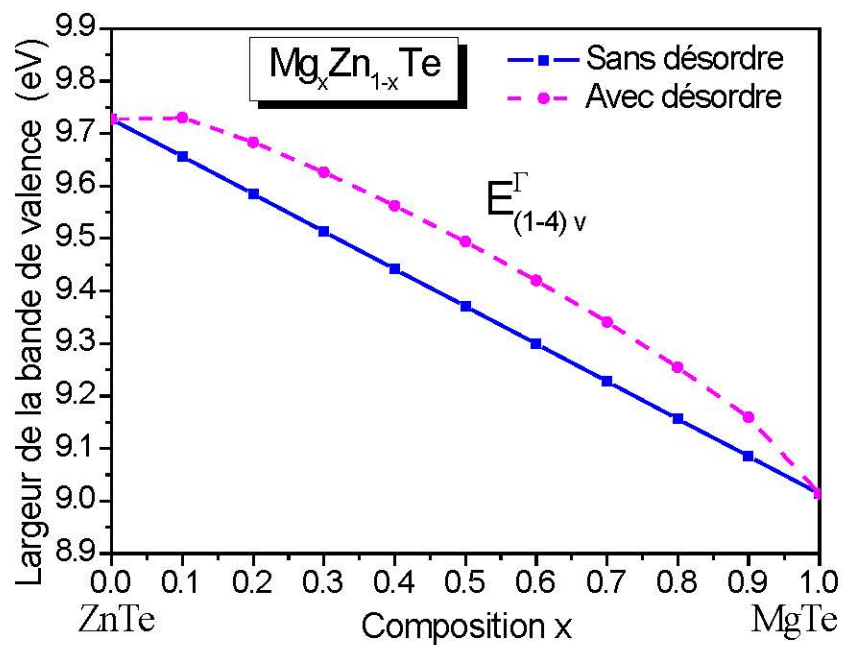


Figure (III-9) : la variation de la largeur de la bande de valence $E_{(1-4)v}^{\Gamma}$, en fonction de la composition x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Tableau (III-4) : La largeur de la bande de valence au point Γ des alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$

Matériaux	Energie $E_{(1-4)v}^{\Gamma}$ (eV)
ZnTe	9.72735
Mg _{0.1} Zn _{0.9} Te	9.65598* 9.72985***
Mg _{0.3} Zn _{0.7} Te	9.51324* 9.626079***
Mg _{0.5} Zn _{0.5} Te	9.3705* 9.493617***
Mg _{0.7} Zn _{0.3} Te	9.22776* 9.340599***
Mg _{0.9} Zn _{0.1} Te	9.08502* 9.15889***
MgTe	9.01365

* Nos calculs sans désordre

*** Nos calculs avec désordre

Les expressions analytiques de la largeur de la bande de valence $E_{(4-1)v}^{\Gamma}$ de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans désordre ci- dessous sont ajustées sous les formes suivantes :

$$E_{(4-1)v}^{\Gamma}(\text{eV}) = 9.72735 - 0.7137 x + 0 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-17})$$

$$E_{(4-1)v}^{\Gamma}(\text{eV}) = 9.7412268 - 0.2396782 x - 0.4740218 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-18})$$

III.4. Etude des structures de bandes électroniques :

III.4.1. Structures de bandes électroniques des composés binaires :

Pour l'étude de la structure des bandes électroniques, on a calculé les structures de bandes électroniques aux points de hautes symétries de la première zone de Brillouin.

Nos résultats pour les composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$ sont présentées dans les Figures (III-10) et (III-11) respectivement.

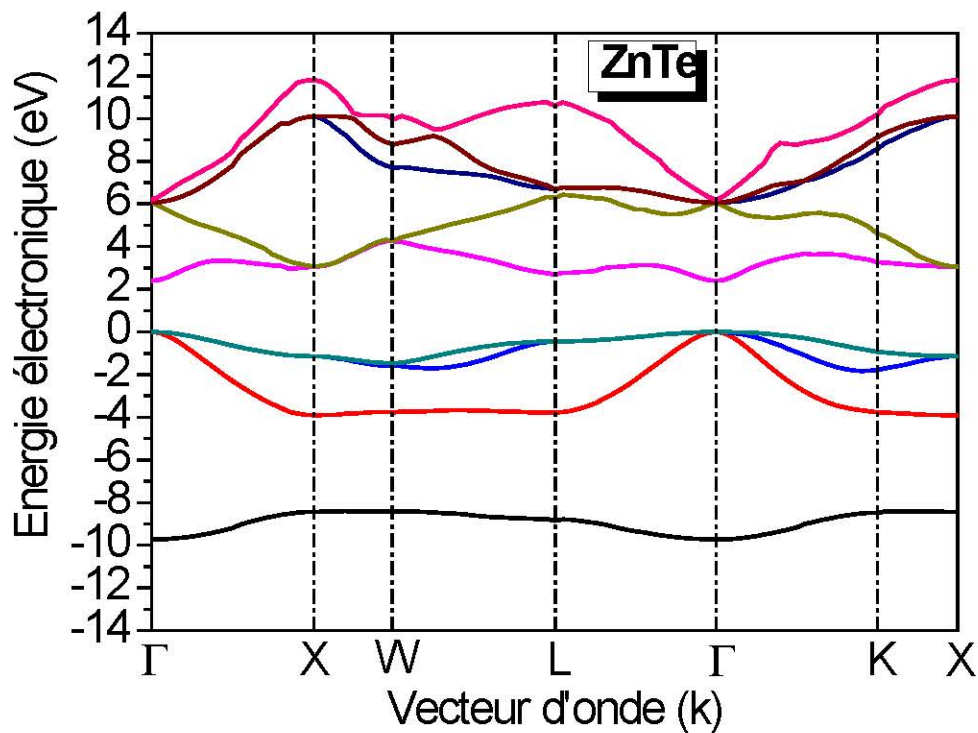


Figure (III-10): Structure de bande électronique du composé binaire $ZnTe$

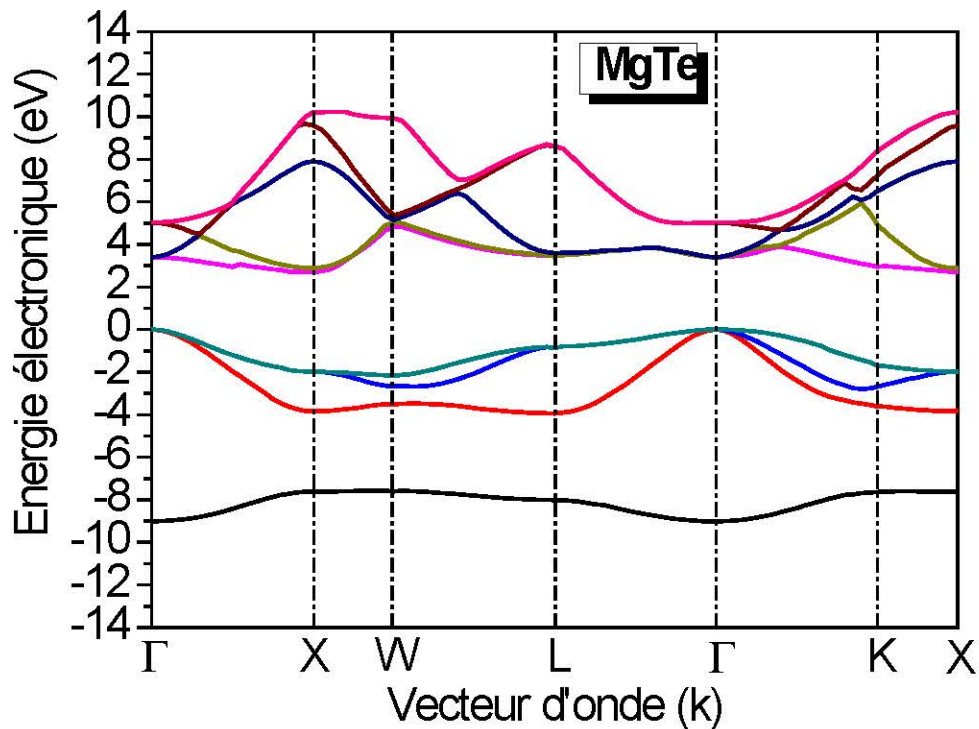


Figure (III-11): Structure de bande électronique du composé binaire $MgTe$

- A propos de la *Figure (III-10)* ; on remarque que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point de haute symétrie Γ , ce qui indique que le composé binaire ($ZnTe$) est un semiconducteur à gap d'énergie direct.
- En ce qui concerne la *Figure (III-11)* ; on observe que Le maximum de la bande de valence est au point de haute symétrie Γ et le minimum de la bande de conduction est au point de haute symétrie X , cela signifie que le composé binaire ($MgTe$) est un semiconducteur à gap d'énergie indirect.
- Les bandes de conduction sont plus dispersées que les bandes de valence, ce qui s'explique par le fait que les électrons dans les bandes de conduction sont plus libres.
- Il faut noter qu'il existe un gap entre la première et la deuxième bande de valence au point de haute symétrie X . Ce gap antisymétrique est connecté avec la différence du potentiel entre les cations Zn et Mg et l'anion Te . Dans la structure de bande du $ZnTe$ ce gap antisymétrique est plus large que dans la structure du $MgTe$, cela est dû au fait de l'électronégativité. Cette dernière est égale à 1.65 *Pauling's* pour le Zinc " Zn " et 1.31 *Pauling's* pour le Magnésium " Mg " et 2.1 *Pauling's* pour le Tellure " Te ", donc le $ZnTe$ est plus ionique que le $MgTe$. Les valeurs des énergies des composés $ZnTe$ et $MgTe$ pour le point X entre la première et la deuxième bande de valence est présentés dans le tableau (III-3).

III.4.2. Effet du désordre sur les structures de bandes électroniques:

La Figure (III-12) illustre les structures des bandes électroniques de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ pour la concentration $x=0.5$ de Magnésium le long des points de hautes symétries de la première zone de Brillouin avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.

On prend le maximum de la bande de valence comme une référence du zéro d'énergie.

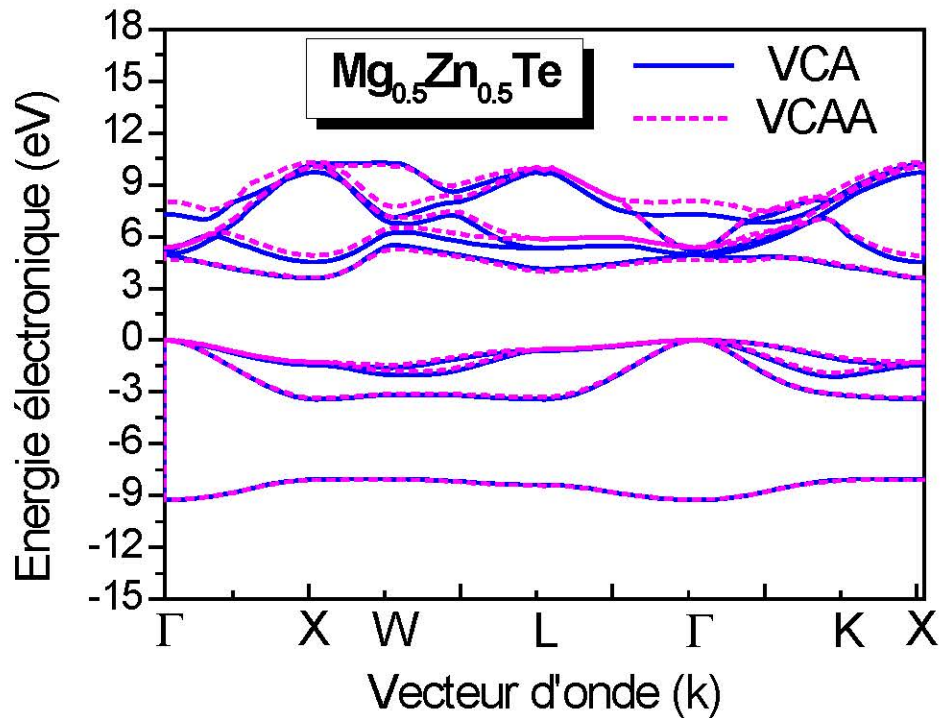


Figure (III-12): la structure de bande électronique de l'alliage ternaire $Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$

On remarque que les bandes de conduction sont plus dispersées que les bandes de valence. On note aussi qu'il y a un gap entre la première et la deuxième bande de valence au point de haute symétrie X. Ce gap antisymétrique est une mesure qualitative de l'ionicté (tableau III-3), et sous l'effet du désordre ce gap antisymétrique augmente un petit peu, c'est-à-dire que l'ionicté de l'alliage augmente. L'effet du désordre n'affecte que les bandes de conduction. Les bandes de valence restent presque inchangeables.

III.4.3. Effet de la concentration sur les structures de bandes :

La figure (III-13) représente l'influence de la concentration sur les structures de bandes de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ pour les concentrations $x=0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1$ de Magnésium le long des points de hautes symétries de la première zone de Brillouin, ces structures sont similaires à celles observées pour les alliages ternaires III-V [28-34] et quaternaires [35, 36] on remarque que:

- En pratique, la présence de Magnésium déplace presque toutes les bandes. Alors que les minimums de la bande de conduction sont décalés vers le haut aux points de haute symétrie Γ et L ce qui conduit à la croissance des gaps directs E_{Γ}^{Γ} , E_{L}^L et de gap indirect E_{Γ}^L . Par contre il y a un décalage vers le bas au point de haute symétrie X, ce qui signifie une décroissance du gap indirect E_{Γ}^X
- On note aussi qu'il y a un décalage vers le haut de la première et la deuxième bande de valence au point de haute symétrie X. Mais le décalage de la première bande de valence au point de haute symétrie X est plus important que le décalage de la deuxième bande de valence. Cela veut dire, qu'il y a une décroissance du gap antisymétrique $E_{(2-1)v}^X$ de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$. Cette décroissance mène à dire que l'ionicité de l'alliage concernée diminue avec les concentrations x de Magnésium
- Une remarque très importante est que, ce décalage considérable vers le haut de la première bande de valence le long des points de hautes symétries de la première zone de Brillouin veut dire aussi qu'il y a une diminution de la largeur des bandes de valence. Cela nous confirme qu'il y a une décroissance du caractère covalent et l'apparition du caractère ionique.

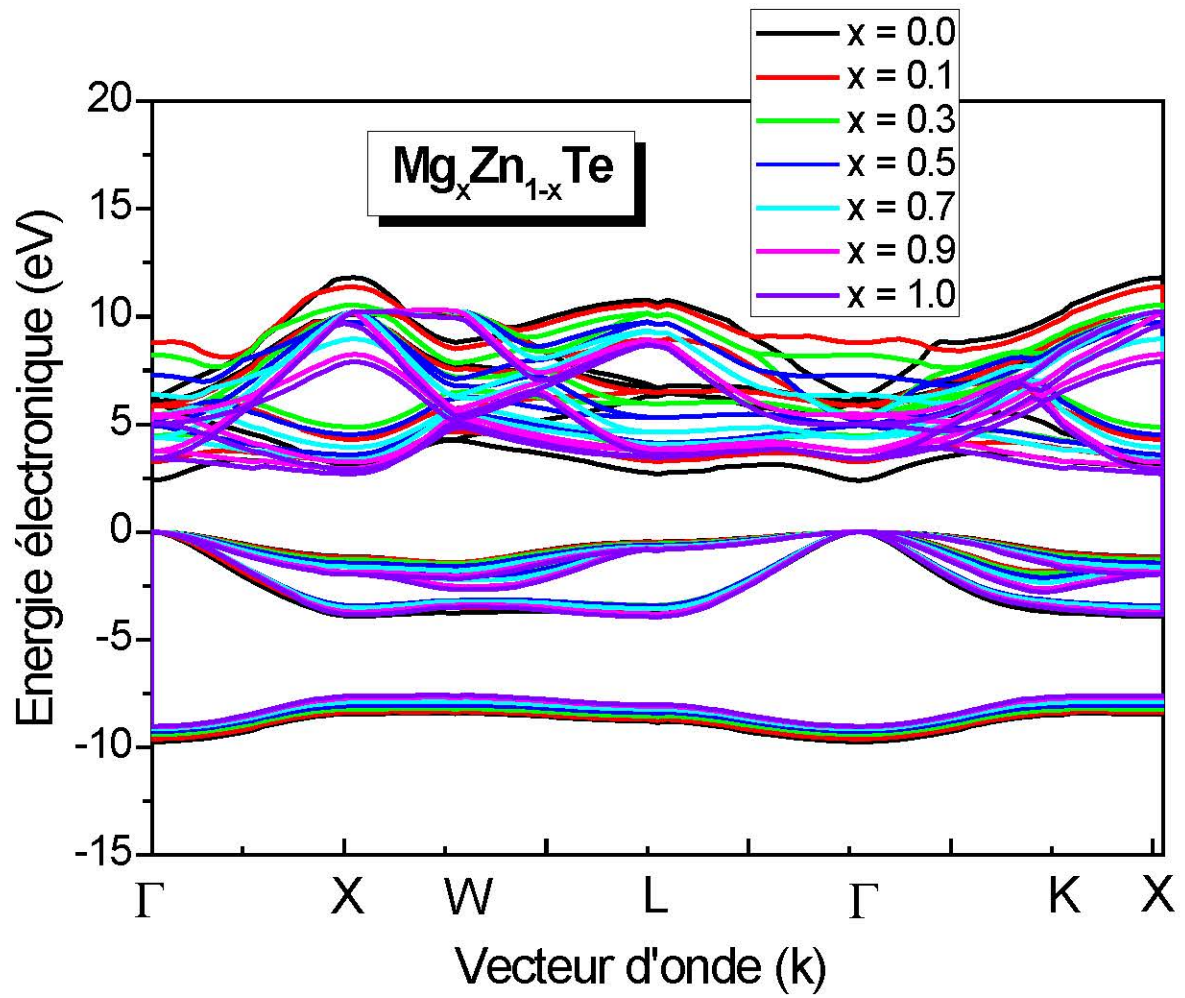


Figure (III-13): l'effet de la concentration x de Magnésium sur les structures de bandes de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$

Références:

- [1] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [2] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [3] S. Benyettou, thèse de doctorat, Université de Biskra (Algérie), 2016.
- [4] S. Kasap, P. Capper (Eds), Springer hand book of electronic and photonic material, Springer Science, 2017.
- [5] A. Belhachemi, H. Abid, Y. Al-Douri, M. Sehil, A. Bouhemadou, M. Ameri, Chinese J. Phys. **55** (2017) 1018.
- [6] R. R. Reddy, M. Ravikumar, T. V. R. Rao, infrared phys **34** (1993) 103.
- [7] P. K. Yadawa, Communications in Applied Sciences J. Phys. **1** (2013) 47.
- [8] Y. Al-Douri, H. Abid, A. Zaoui, H. Aourag, Physica B **301** (2001) 295.
- [9] W. Kara Mohamed, thèse de doctorat, Université Mohamed khider-Biskra, (Algérie), 2012.
- [10] L. Hannachi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie), 2010.
- [11] S. Bacha, thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar-Annaba, (Algérie), 2014.
- [12] N. Fares, thèse de doctorat, Université Mohamed Khider-Biskra, (Algérie), 2016.
- [13] M. Benhamida, thèse de doctorat, Université Ferhat Abbas-Setif, (Algérie), 2014.
- [14] R. Mouici, mémoire de magister, Université de Tébessa, (Algérie), 2012.
- [15] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer Series in Solid-State Science, Berlin (1988).
- [16] F. Mezrag, N. Bouarissa, M. Boucenna and L. Hannachi, Phys. Scr. **82** (2010) 035702.
- [17] B. Bradji, D. Djabbari, mémoire de master, Université de Tébessa, (Algérie), 2018.
- [18] P. Y. Yu, M. Cardona, Physics and Materials properties, Fourth edition, 2010.
- [19] S. Adachi, Proprieties of semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, Ed. John Wiley & Sons, 2009.
- [20] G.-D. Lee, M.H. Lee, J. Ihm, Phys. Rev. B **52** (1995) 1459.
- [21] J. R. Chelikowsky, T. J. Wagner A. Tin and J. H. Weaver, Phys. Rev. B **40** (1989) 9644.
- [22] N. Bouarissa, R. N. West and H. Aourag, Phys. Stat. Sol. (b) **188** (1995) 723.
- [23] A. Garcia, M.L. Cohen, Phys. Rev. B **47** (1993) 42155.
- [24] J. C. Phillips, Bonds and Bands in Semiconductors, Academic Press, New York, 1973.
- [25] N. Bouarissa, Materials Science and Engineering B **86** (2001) 53.
- [26] N. Bouarissa, Materials Chemistry and Physics **73** (2002) 51.
- [27] M. Boucenna and N. Bouarissa, Materials Chemistry and Physics **84** (2004) 375.
- [28] J. M. Baranowski, J. Phys. C **17** (1984) 6287.
- [29] N. Bouarissa, Superlattice Microst. **26** (1999) 279.

- [30] S. Bacha, A. Bechiri, F. Benmakhlouf, H. Allouache, N. Bouarissa. *Physica B* **406** (2011) 2021.
- [31] H. Saheb and A. Bechiri, *Solid State Phenomena*, 297 (2019) 131.
- [32] A. El Hassasna and A. Bechiri, *Solid State Phenomena*, 297 (2019) 82.
- [33] A. El Hassasna, A. Bechiri and N. Bouarissa, *Mater. Res. Express* 6 (2019) 085915.
- [34] A. Bechiri, F. Benmakhlouf and N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* **77** (2002) 507.
- [35] K. Kassali and N. Bouarissa, *Microelectronic Engineering* **54** (2000) 277.
- [36] A. Bechiri, N. Bouarissa, *Superlattices and Microstructures* **39** (2006) 478.



Conclusion générale

Conclusion générale

Notre travail consiste à étudier les propriétés des composés binaires ZnTe, MgTe et leurs alliages ternaires semiconducteurs $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Nos calculs sont basés sur l'utilisation de la méthode pseudopotential empirique (E.P.M) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA).

Le paramètre de courbure ($c=0,67$ eV) a été vérifié par une comparaison avec les valeurs expérimentales et théoriques et le paramètre ajustable du désordre utilisé égal à $p=0.34501031$.

Nous avons calculé la variation des différents gaps d'énergie E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X , E_{Γ}^L , E_L^L , E_X^X , la variation du gap antisymétrique d'énergie $E_{(2-1)v}^X$ et la variation de la largeur de bandes de valence $E_{(4-1)v}^{\Gamma}$ en fonction de la concentration "x" de Magnésium (Mg) pour l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nous avons trouvé que les gaps d'énergie E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^L , E_L^L , E_X^X augmentent linéairement avec l'augmentation de la concentration de Magnésium (Mg) sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Mais cette augmentation est non linéaire avec désordre compositionnel. Par contre, il y a une diminution linéaire du gap indirect E_{Γ}^X , et du gap antisymétrique d'énergie $E_{(2-1)v}^X$ et la largeur de bandes de valence $E_{(4-1)v}^{\Gamma}$ avec l'augmentation de la concentration de Magnésium (Mg) sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Mais cette diminution est non linéaire avec désordre compositionnel.

Nous avons aperçu que lorsque on ne tient pas en compte l'effet du désordre compositionnel, il y a une transition du gap direct E_{Γ}^{Γ} au gap indirect E_{Γ}^X à la concentration $x=0.49$ de Magnésium (Mg). Cette transition se décale vers la concentration $x=0.65$ de Magnésium (Mg) si on tient compte de l'effet du désordre compositionnel.

Nous avons trouvé que le composé ZnTe est un semiconducteur à gap direct (2.39 eV), par contre le composé MgTe est un semiconducteur à gap indirect (3.40 eV).

Nous avons calculé aussi les structures de bandes électroniques des composés binaires ZnTe et MgTe et leurs alliages ternaire $Mg_{0,5}Zn_{0,5}Te$.

En étudiant la structure de bande électronique de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, nous avons trouvé que les minimums de la bande de conduction sont décalés vers le haut aux points de haute symétrie Γ et L ce qui conduit à la croissance des gaps directs E_{Γ}^{Γ} , E_L^L et de gap indirect E_{Γ}^L . Par contre il y a un décalage vers le bas au point de haute symétrie X, ce qui signifie une décroissance des gaps indirects E_{Γ}^X à cause de l'effet de la concentration "x" de Magnésium (Mg). Nous avons aperçu

qu'il y a un décalage important vers le haut de la première bande de valence par rapport à la deuxième bande de valence au point de haute symétrie X. Par conséquent il y'a une décroissance des gaps antisymétriques $E_{(2-1)v}^X$ de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$. Cette décroissance mène à dire que l'ionicté de l'alliage concernée diminue avec les concentrations x de Magnésium.

Même constatation a été faite par ce décalage, une diminution de la largeur de bandes de valence. Cela nous confirme qu'il y'a une décroissance du caractère covalent et l'apparition du caractère ionique.

Ce décalage est faible pour les bandes de valences, par contre il est très claire et important pour les bandes de conduction.

Une attention particulière a été portée à l'effet du désordre sur les propriétés électroniques de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$. Nous avons trouvé que l'effet du désordre sur les différents gaps d'énergie E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X , E_{Γ}^L , E_L^L , E_X^X , le gap antisymétrique d'énergie $E_{(2-1)v}^X$, la largeur des bandes de valence $E_{(4-1)v}^{\Gamma}$ et les structures de bandes est important et nous ne pouvons pas le négligé.