



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:

**Influence de la composition stœchiométrique de
Magnésium sur les propriétés élastiques de
l'alliage ternaire (Mg, Zn) Te.**

Présenté par:

Mostefaoui Nessrine et Djemel Fatma

Devant le jury:

Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Président
Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Labidi Herissi	MCB	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le 02 / 07 / 2020 à 10 :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:

Influence de la composition stœchiométrique de
Magnésium sur les propriétés élastiques de
l'alliage ternaire (Mg, Zn) Te.

Présenté par:

Mostefaoui Nessrine et Djemel Fatma

Devant le jury:

Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Président
Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Labidi Herissi	MCB	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le 02 / 07 / 2020 à



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



Nous soussignons

Nom, prénom: *Mortefarou Nessorine & Fatma Djemel*

N° de carte d'étudiant: (1) *34014952* (2) *34030207*

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:

Influence de la composition stoechiométrique de Magnésium sur les propriétés élastiques des alliages ternaires (Mg, Zn)Te

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'exclusions définitive.

*نظرا للموضوع المذكور أعلاه
السيد /
بوخضرة في تاريخ 25 أكتوبر 2020
أفيسر المحظوظ السعي البلدي*

25 أكتوبر 2020

أفيسر المحظوظ السعي البلدي

Fait à Tébessa, le:

Signature des étudiants (es):

(1):

[Signature]

(2):

[Signature]



Formulaire de levée de réserves après soutenance d'un Mémoire de Master

Données d'identification du candidats(es) :

Nom et prénom du candidat (1): **Mostefaoui Nessrine**

Nom et prénom du candidat (2): **Djemel Fatma**

Intitulé du Sujet : **Influence de la composition stœchiométrique de Magnésium
sur les propriétés élastiques des alliages ternaires (Mg, Zn)Te**

Données d'identification du membre de jury :

Nom et prénom : **Bechiri Abderrachid**

Grade: **Professeur**

Lieu d'exercice : **Université Larbi Tebessi- Tébessa**

Vu le procès-verbal de soutenance de la thèse sus citée comportant les réserves suivantes :

Quelques figures mal présentées

Améliorer le support bibliographique

Quelques fautes

Et après constatation des modifications et corrections suivantes :

Les figures bien Présentées

Amélioration du support bibliographique

Corrections des fautes

Je déclare en ma qualité de président de jury de soutenance que le mémoire cité remplit toutes les conditions exigées et permet au candidat de déposer son mémoire en vue de l'obtention de l'attestation de succès.

Le...**26 octobre 2020**.....

Président de jury de soutenance : (Nom/Prénom et signature)

Bechiri Abderrachid

المخلص :

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص المرونية لأشباه الموصلات $II-VI$ ذات البنية زنك - بلاند للمركبات الثنائية $MgTe$ و $ZnTe$ إضافة إلى سبائكها الثلاثية $Mg_xZn_{1-x}Te$ تستند حساباتنا على استخدام الطريقة التجريبية لشبه الكمون (EPM) مرتبطة بتقريب البلورة الافتراضية (VCA) والتي تأخذ تأثير العشوائية ككمون فعال بعين الاعتبار، مقارنة مع نموذج المدارات المرتبطة لـ $Harrison$. تطرقنا في الدراسة إلى حساب ثوابت المرونة ومعامل الانضغاط الحجمي B وثوابت القوة α و β ومعاملات القص G يونغ Y بواسون ν ، و عامل تباين المناخي A ، و الايونية f_i ومعامل ξ $Kleinman$. درسنا تأثير تركيز المغنزيوم x على خصائص المرونة للسبيكة الثلاثية $Mg_xZn_{1-x}Te$ ومركباتها الثنائية $MgTe$ و $ZnTe$ في حالة وجود عشوائية او عدم وجودها على المجال $[0-1]$. عموما نتائجنا متوافقة جدا مع النتائج التجريبية والنظرية المتوفرة.

الكلمات المفتاحية : أنصاف النواقل $II-VI$ ، السبيكة الثلاثية $Mg_xZn_{1-x}Te$ الخواص المرونية، طريقة شبه الكمون التجريبية، تقريب البلورة الافتراضية، نموذج المدارات الحرة، تأثير التركيز، فعل العشوائية.

Abstract:

In this work we have studied the elastic properties of (II-VI) semiconductors, crystallising in the zinc-blende structure of binary compounds $ZnTe$, $MgTe$ and ternary alloy $Mg_xZn_{1-x}Te$. Our calculations are based on using the empirical pseudopotential method (EPM) coupled with the virtual crystal approximation (VCA), which includes the disorder effect as an effective potential, and combined with the related orbital model of Harrison.

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

We have studied the dependence of the Magnesium concentration x on the elastic properties of the ternary alloy $Mg_xZn_{1-x}Te$ and these binary compounds $ZnTe$, $MgTe$ in case of presence of the disorder or not over the whole range of the composition [0-1].

Generally our results are in good agreement with the available experimental and theoretical results.

Key words: semiconductors (II-VI), ternary alloy $Mg_xZn_{1-x}Te$, elastic properties, empirical pseudopotential method, virtual crystal approximation, model of linked orbitals, influence of concentration, effect of disorder.

Résumé :

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés élastiques des semiconducteurs (II-VI), cristallisés dans la structure zinc-blende des composés binaires $ZnTe$, $MgTe$ et leurs alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$. Nos calculs sont basés sur l'utilisation de la méthode de pseudopotentiel empirique (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA), qui contient l'effet du désordre comme un potentiel effectif, et combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison.

Nous avons calculé les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}), le module de compressibilité B , les constantes de force α et β les modules de cisaillement G , de Young Y , le coefficient de Poisson ν , les facteurs d'anisotropie A et d'ionicité f_i ainsi que le paramètre de Kleinman ξ .

Nous avons étudié la dépendance de la concentration x de Magnésium sur les propriétés élastiques de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ et ces composés binaires $ZnTe$, $MgTe$ en cas de présence du désordre ou non sur toute la gamme de la composition [0-1].

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

Mots clés : semiconducteurs (II-VI), alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, les propriétés élastiques, méthode du pseudopotentiel empirique, approximation du cristal virtuel, modèle des orbitales liées, l'influence de la concentration, l'effet du désordre.

Remerciement

*Un très grand merci à mon dieu **ALLAH** qui est toujours à présent avec moi dans les moments faciles et difficiles de la vie.*

Par ces quelques lignes, je tiens à remercier toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin au bon déroulement de cette mémoire, en espérant n'avoir oublié personne...

*Je tiens avant tout à remercier du fond du coeur à mon encadreur **Dr. Fella Benmakhlouf**, Professeur à l'université de Tébessa, pour m'avoir proposé ce thème de recherche et pour m'avoir dirigé ce mémoire. Sa disponibilité, la clarté de ses explications, sa patience, sa détermination et liberté de manœuvre qu'il m'a accordé ont été pour moi un exemple et un soutien particulièrement efficaces dans les moments de doute. j'ai beaucoup apprécié la rigueur qui a guidé son encadrement ainsi que la discussion et la correction de ce manuscrit.*

*Je remercie vivement **Dr. Abderrachid Bechiri**, Professeur à l'Université de Tébessa, qui m'a fait l'honneur de présider mon jury.*

*Je remercie sincèrement Monsieur **labidi herissi**, Maître de conférences B à l'université de Tébessa, d'avoir accepté d'examiner ce travail.*

Je remercie vivement tout les enseignants de l'université de Tébessa.

*J'ai un grand plaisir à remercier **Dr. Abderrachid Bechiri** et **Dr. Fella Benmakhlouf**, pour leur nombreux conseil, leurs encouragements et leurs aides qui m'ont permis de mener à bien ce travail.*

Enfin, je voudrais remercier ma famille et surtout mes parents pour leur soutien moral et financier durant ces années d'étude. Que ce travail rende hommage à leur dévouement et à leur affection.



Dédicace

*Avec un énorme plaisir, un cœur ouvert et immense joie, que je dédie
mon travail :*

- *A ma grand-mère, que Dieu ait pitié d'elle.*
- *A mes très chers parents qui m'ont soutenu tout au long de ma vie.*
- *A mon frères et mes sœurs : **Rami, Siwar, Poussi.***
- *A ma chère amie et mon bras **Fatma.***
- *A toutes mes amies: **Mounia, Najiba, Ouahiba.***
- *A tous qui m'ont aidé de près ou de loin.*
 - *A toute ma famille*

Remerciement

Je remercie en premier lieu Dieu le tout puissant de nous avoir accordé la puissance et la volonté pour terminer ce travail Louange à Dieu le clément qui a éclairé mon chemin vers la science, qui m'a donné la volonté, la santé, la chance de poursuivre et de terminer mon travail dans ces circonstances difficiles de la maladie covid-19.

*Je tiens à exprimer ma profonde gratitude aux superviseurs du **Dr Fella Benmakhlouf**, professeur à l'Université de Tebessa, pour avoir présenté ce sujet de recherche et pour m'avoir adressé ce message, ainsi que pour sa disponibilité et son suivi, Ses conseils et recommandations nous sont tout le temps utiles et l'aident à répondre fréquemment à mes questions dans l'exécution de ce travail dans les meilleures circonstances.*

*Je voudrais exprimer mes sincères remerciements et merci pour **Dr. Abderrachid Bechiri**, professeur à l'Université de Tébessa, pour l'honneur qu'il m'a fait, en acceptant de présider le jury de mémoire, sans oublier ses précieux conseils ainsi que les discussions que nous avons eues, qui m'ont guidées dans ce domaine.*

*Je remercie sincèrement, **Dr. Labidi Herissi** à l'université de Tébessa, d'avoir accepté d'examiner ce travail.*

Ma reconnaissance pour tout l'ensemble des enseignants de l'université de Tébessa qui ont contribué à ma formation en graduation et en post-graduation.

En fin, j'exprime ma reconnaissance à toute personne qui a contribué au bon déroulement de mon projet.



Dédicace

Ce travail s'adresse à ceux qui m'ont donné le goût de la recherche et qui m'ont soutenu tout au long de mon parcours. En particulier, je l'ai dédié aux membres de ma famille présents ou partis:

- *À ma défunte grand-mère, aie pitié d'elle avec une grande miséricorde*
- *À mes parents et frères.*
- *Ce manuscrit est également destiné à mes amis et professeurs de l'Université de Tébessa pour le professeur Fella Benmakhlouf, le professeur Abderrachid Bechiri , le professeur Faicel Chammem, le docteur Mourad Khachaba , le docteur Hafdhallah Abdekader, le docteur Harisi Labidi, le docteur Naouari Rouag , le docteur Mouhammad Amine Tag et le docteur Fadila Sardouk.*

Tous ceux qui me sont chers ...





Sommaire

Sommaire

المخلص

Abstract

Résumé

Remerciement

Dédicace

Sommaire

Liste des tableaux	<i>i</i>
Table des figures	<i>ii</i>
Liste des symboles	<i>iv</i>

Introduction générale

Introduction générale	1
Références	3

Chapitre I

La méthode du pseudopotentiel

I-1- Introduction	4
I-2 -La méthode du pseudopotentiel	4
I-3- Le principe de la méthode de pseudopotentiel	5
I-4- Le formalisme mathématique	5
I-5- Caractéristique du pseudopotentiel	7
I-6 Les modèles de pseudopotentiel	7
I-6-1 Le modèle local	8
I-6-1-a- Le modèle d' Ashcroft	8
I-6-1-b- Le modèle de Heine et Abarenkov	8
I-6-2- Le modèle non local	9
I-6-2-a- La fonction de Heine Abarenkov	9
I-6-2-b- La fonction de Gauss	10
I-6-2-c- Le modèle d' Ashcroft	11
I-7- La méthode empirique de pseudo potentiel (E.P.M)	11
I-8- La procédure de calcul de la méthode (E.P.M)	13
I-9- Approximation du cristal virtuel (VCA)	15
I-10- Approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)	15
Références	17

Chapitre II

Les propriétés élastiques

II-1- Introduction 18

II-2-Le module d'élasticité18

II-3- Les contraintes et les déformations 19

 II-3-1- Les contraintes 19

 II-3-2- Les déformations 21

II-4- Relation contrainte-déformation 25

 II-4-1- La loi de Hooke généralisée 26

II-5- Les méthodes de calcul des propriétés élastiques 29

 II-5-1- Le calcul des constantes élastiques 29

 II-5-2-Le module de compressibilité 30

 II-5-3-Les constantes des forces 31

 II-5-4-Le module de cisaillement G 31

 II-5-5-Le module de Young Y 32

 II-5-6-Le coefficient de Poisson ν 33

 II-5-7-Le facteur d'anisotropie A 33

 II-5-8-Le facteur d'ionicté f_i 33

 II-5-9-Le paramètre de Kleinman ξ 33

Références 35

Chapitre III

Résultats et discussion

III-1-Introduction 37

III-2-Les propriétés élastiques37

III-3-Les propriétés élastiques de l'alliage semiconducteur $Mg_xZn_{1-x}Te$ 39

 III-3-1- Les constantes élastiques 39

 III-3-2-Le module de compressibilité et les constantes des forces 44

 III-3-3- Les modules de cisaillement G , de Young Y , le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A 48

 III-4-4-Le facteur de l'ionicté et le paramètre de Kleiman 52

Références 55

Conclusion générale

Conclusion générale 57

Liste des tableaux

<i>Tableaux</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
Tableau II-1	les différences entre la déformation et la contrainte	26
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)	39
Tableau III-2	Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dyne / cm^2) de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$	40
Tableau III-3	Le module de compressibilité B en (10^{11} dyne / cm^2) et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en (N / m) de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$	45
Tableau III-4	les modules de cisaillement (G), Young (Y) en (10^{11} dyne / cm^2) le coefficient de Poisson ν et le facteur d'isotropie (A) de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$	49
Tableau III-5	Facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ de l'alliage $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$.	53

Liste des figures

<i>Figure</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
Figure I-1-a	Potentiel cristallin	6
Figure I-1-b	Fonction d'onde	7
Figure I-2	Fonction de Heine-Abarenkov	10
Figure I-3	fonction de Gauss	10
Figure I-4	Fonction d'Ashcroft	11
Figure I-5	L'organigramme de la méthode EPM	14
Figure II-1	Un module d'élasticité est le rapport entre une <u>contrainte</u> et la <u>déformation</u> relative qui en résulte	19
Figure II-2	Une force s'exerce sur l'unité de surface du solide	20
Figure II-3	Les composantes du tenseur de contraintes	21
Figure II-4	Axes des coordonnées avant et après la déformation : (a) état initial, (b) état déformé	22
Figure II-5	Axes de coordonnées pour la description d'un état déformé élastique	22
Figure II-6	la courbe contrainte-déformation d'un matériau	26
Figure II-7	Présentations des comportements élastiques	27
Figure II-8	La compressibilité quantifie l'aptitude d'un corps à se contracter sous l'effet de la pression	31
Figure II-9	principe du cisaillement d'un matériau	32
Figure III-1	Les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} en fonction de la concentration x de Magnésium: sans désordre (—) et avec désordre (- - - - -) de l'alliage ternaire	42
Figure III-2	Les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, avec et sans désordre	43
Figure III-3	Les variations des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium: sans désordre (—) et avec désordre (- - - - -) de l'alliage ternaire	46
Figure III-4	La variation des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium, avec et sans désordre	47
Figure III-5	La variation du module de compressibilité B avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium	48

Figure III-6	La variation du module de cisaillement (G) en (dyne/cm^2), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ en fonction de la concentration x de Magnésium	50
Figure III-7	La variation du module de Young (Y) en (dyne/cm^2), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ en fonction de la concentration x de Magnésium	50
Figure III-8	La variation de coefficient de Poisson ν avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ en fonction de la concentration x de Magnésium	51
Figure III-9	La variation du facteur d'anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$, en fonction de la concentration x de Magnésium	51
Figure III-10	La variation de facteur d'ionicité f_i avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ en fonction de concentration x de Magnésium	54
Figure III-11	La variation du facteur de Kleinman ξ avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ en fonction de concentration x de Magnésium	54

Liste des symboles

<i>symbole</i>	<i>Sens physique</i>
E_n	L'énergie propre
ψ_k	La fonction d'onde
Φ	La fonction d'onde plane
Φ_c	Les états atomiques qui occupent le cœur
b_c	constante calculée par l'orthogonalité de Ψ_k avec chaque niveau du cœur
H	Le Hamiltonien
V_R	Le potentiel répulsif
V_c	Le potentiel attractif
V_p	Le pseudopotentiel
E_k^c	L'énergie du cœur
E_k^v	L'énergie de valence
\hbar	La constante réduite de Planck
m	La masse de l'électron
Z	Le nombre d'électrons
r_c	Le rayon du cœur
A	Le potentiel constant dans la région du cœur
V_L	Le potentiel local
V_{NL}	Le potentiel non local
A_I	L'énergie des états profonds
f_I	La fonction qui représente l'effet de l'état du cœur
P_I	L'opérateur de projection de la l ^{ème} composante du moment angulaire
\vec{R}	Le vecteur du réseau direct
$\vec{\tau}$	Le vecteur de translation du réseau direct
$V_a(\vec{G})$	Le facteur de forme
$S(\vec{G})$	Le facteur de structure
N_a	Le nombre d'atomes de base
$\psi_{n,k}$	Fonctions d'ondes propres
V_{AC}	Facteurs de formes des composés AC
V_{BC}	Facteurs de formes des composés BC
V_{VCA}	Potentiel périodique virtuel du cristal
$V_{dés}$	Potentiel non périodique
F	Force exercée
S	Surface d'un matériau solide
σ_{ij}	Le tenseur de la contrainte
\vec{r}	Le vecteur de position
\vec{u}	le vecteur du déplacement
ε_{ij}	Les constantes de proportionnalité
$[\varepsilon_{ij}]$	Le tenseur des petits déplacements
$\vec{\Delta u}$	Le vecteur des petits déplacements

ω_{ji}	Le tenseur antisymétrique
e_{ij}	Le tenseur symétrique
S_{ijkl}	Les tenseurs des complaisances élastiques
c_{ijkl}	Les modules élastiques
E_{ij}^{exp}	Les énergies observées expérimentalement
E_{ij}^{cal}	Les énergies calculées
C_{11}, C_{12}, C_{44}	Les constantes élastiques
U	La densité d'énergie élastique
$C_{\alpha\beta}$	La matrice des constantes élastiques du 2 ^{ème} ordre
α_p	La polarité
$V_a(3)$	Facteurs de formes antisymétriques
$V_s(3)$	Facteurs de formes symétriques
d	La distance entre les plus proches voisins
a	Le paramètre du réseau
B	Le module de compressibilité
α	La constante de force d'élongation
β	La constante de force de recourbement
$Z_1 Z_2$	La charge anionique et la charge cationique
G	Le module de cisaillement
Y	Le module de Young
ν	Le coefficient de Poisson
A	Le facteur d'anisotropie
f_i	Le facteur d'ionicté
ξ	Le paramètre de Kleinman



*Introduction
générale*

Introduction générale

L'objectif principal de la physique des matériaux a été la détermination des propriétés en utilisant uniquement des informations sur la constituante espèce. La réalisation de cet objectif permettrait aux scientifiques pour prédire l'existence et les propriétés de nouveaux solides ou liquides non réalisés auparavant dans la nature, et la possibilité de développer des méthodes informatiques de production de solides avec des propriétés utiles [1].

L'avancement technologique ces dernières années a mené au développement des matériaux cristallins avec certaines qualités désirées permettant leurs applications dans les secteurs comme l'électronique (optoélectronique), spintroniques, médecine, super conductivité, nucléaire et résonance d'électron, recherche moléculaire de structure, photoniques et photovoltaïques. Certains de ces matériaux cristallins sont spécifiquement employés dans la fabrication des diodes, des redresseurs, des cellules photovoltaïques, des scintillateurs, des mètres de Gauss, et des compteurs des particules [2]. Selon les propriétés électriques, les matériaux sont classés en trois catégories : conducteurs, isolants et il y a une place intermédiaire entre les conducteurs et les isolants ces matériaux ont les appelés «semiconducteurs» [3] ce qui constituent aujourd'hui les matériaux de base pour fabriquer les émetteurs et les récepteurs dans la communication cellulaire, satellite et des fibres de verre, leur importance est née avec la découverte en 1948 du transistor [4].

Parmi les matériaux semiconducteurs nous avons choisi les semiconducteurs II-VI, qui sont des corps composés, sont constitués d'un élément de la II^{ème} colonne A et B telle que le Béryllium, le Magnésium, le Calcium, le Strontium, le Baryum, le Zinc, le Cadmium, le Mercure et d'un autre élément de la VI^{ème} colonne telle que l'Oxygène, le Tellure, le polonium, de la classification périodique de Mendeleïev.

L'alliage d'intérêt $Mg_xZn_{1-x}Te$ est un matériau d'une grande importance dans la technologie, il est utilisé dans l'industrie optoélectronique et est un bon candidat pour les lampes à (LED) à émission verte et bleue [5,6], les éléments de cellules solaires ou les couches diélectriques conductrices minces transparentes, et de nombreux détecteurs à barrière Chotky sont fabriqués comme couche active, elle peut être utilisée comme une exposition aux UV efficace inférieure à 300 nm [7,8].

Les propriétés électroniques des composés ZnTe semblent quelque peu prometteuses pour des applications dans les technologies optiques telles que les dispositifs d'éclairage visible et proche UV [9,10], et ont également été étudiées pour leur utilisation de lasers à large bande interdite avec émission de lumière visible [11].

Alors que, le MgTe présente des trous à large bande et de faibles constantes diélectriques, ils conviennent à l'optique dans le rayonnement UV-bleu [12,13], et a également été observé son potentiel d'émission de lumière dans un état solide très efficace [14,15].

Les alliages ternaires de type $A_xB_{1-x}C$ peuvent ajuster la largeur de gap en modifiant les concentrations x de ces alliages.

Le présent travail de notre mémoire porte sur les propriétés élastiques des composés semiconducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages ternaires. Cela se fait en effectuant des simulations avec le programme Fortran, Ce programme est basé sur la méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M) couplé avec la méthode du cristal virtuel (V.C.A) qui inclue l'effet de désordre compositionnel comme un potentiel effectif, et combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM).qui permet de calculer les constants élastiques (C_{11} , C_{12} , C_{44}) et certains autres paramètres, tels que :Le module de compressibilité B et les constantes des forces α et β , le module de cisaillement G , le facteur d'anisotropie A , et par conséquent l'effet de désordre sur les évolutions de ces paramètres élastiques tels que, le module de Young Y , le coefficient de Poisson ν , le facteur d'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ ...etc.

Pour ce faire, nous avons organisée et subdivisé ce mémoire en trois chapitres en plus d'une introduction générale et une conclusion générale, alors que :

- ✚ le premier chapitre, nous rappelons le principe de la méthode empirique du pseudopotentiel (E.P.M), que nous avons utilisé pour étudier les propriétés élastiques des semiconducteurs.
- ✚ Le deuxième chapitre est consacré à la présentation de l'étude des propriétés élastiques des alliages semiconducteurs dans la structure zinc blende.
- ✚ le troisième chapitre, nous présenterons les résultats obtenus lors de nos calculs des propriétés élastiques pour l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en tenant et sans tenir compte de l'effet du désordre. Ces résultats sont interprétés, confrontés et comparés avec les valeurs expérimentales et théoriques disponible d'autres chercheurs.
- ✚ Finalement, notre travail sera achevé par une conclusion générale.

Références :

- [1] J. R. Chelikowsky and S. G. Louie, Quantum Theory of Real Materials, eds. Kluwer, Boston, 1996.
- [2] F. I. Eczema, U. O. A. Nwankwo, Digest J. Nanomater. Biostruct. **5** (2010) 981.
- [3] A. H. Souici, cours de Physique des Semi-conducteurs (Algérie) 2013.
- [4] A. Berghouth, thèse de doctorat, université de Paul Verlain-Metz (France) 2007.
- [5] E. Ebina , M. Yamamoto , T. Takahashi , Reflectivity of $ZnSe_xTe_{1-x}$ single crystals, Phys. Rev. **6** (1972) 3786.
- [6] S.G. Parker , A.R. Reinberg , J.E. Pinnell , W.C. Holton , Preparation and properties of $Mg_x Zn_{1-x} Te$, J, Electrochem. Soc. **118** (1971) 979.
- [7] V. Sallet, A. Lusson, M. Rommeluere and O. Gorochov J. Cryst. Growth. **220** (2000) 209.
- [8] X. Liu, U. Bindley, Y. Sasaki and J. k. Furdyna J. Appl. Phys. **91** (2002) 2859.
- [9] M. Matsuoka, K. Ono, J. Vac. Sci. Technol. A **7** (1989) 2975.
- [10] M. J. Weber (Ed), Handbook of Laser Science and Technology, CRC Press, Cleveland, Vol.III (1986).
- [11] M. C. Tamargo, M.J.S.P. Brasil, R.E. Nahory, R.J. Martin, A.L. Weaver, H. L. Gilchrist, Semicond. Sci. Technol. **6** (1991) A8.
- [12] L. Konczenwicz, P. Bigenwal, T. Cloitre, M. Chibane, R. Ricou, P. Testuo, O. Briot, R.L. Aulombard, J. Cryst. Growth **159** (1996) 117.
- [13] H. Okuyama, K. Nakano, T. Miyajima, K. Akimoto, J. Cryst. Growth **117** (1992) 139.
- [14] M. W. Wang, M. C. Phillips, J. F. Swenberg, E. T. Yu, J. O. McCaldin, T. C. McGill, J. Appl. Phys. **73** (1993) 4660.
- [15] M. W. Wang, M. C. Phillips, J. F. Swenberg, E. T. Yu, J. O. McCaldin, R. W. Grant, T. C. McGill, Appl. Phys. Lett. **64** (1994) 3445.



Chapitre I
Méthode de
pseudopotentiel

*Méthode de pseudopotentiel**I-1-Introduction :*

Au cours connu dans les cinquante dernières années, les chercheurs ont trouvé une nouvelles techniques de calcul plus rapide et plus précis qui permettent de calculer à grande vitesse les propriétés de nombreuses substances solides, et cette technique de calcul est appelée la méthode pseudopotentielle [1]. On peut faire la distinction entre deux types des électrons : les électrons de cœur (ceux des couches les plus proches du noyau, et est peu effectués par les potentiels créés par les noyaux environnants) et les électrons de valence. Les orbitales de cœur sont les plus basses en énergie, elles sont localisées près du noyau, sont très peu sensibles à l'environnement et ne participent pas aux liaisons chimiques. L'idée de base de la méthode du pseudo-potentiel est d'obtenir les états de valence d'un système (atome, molécule, cristal) sans avoir recours à calculer les états du cœur qui ne sont pas nécessaires pour la description des propriétés physiques [2].

Dans ce chapitre, nous rappelons la méthode de pseudopotentiel dans ses grandes lignes .L'objectif est de présenter un certain nombre de modèles, qui seront utilisés dans ce travail.

I-2-La méthode du pseudopotentiel:

La méthode du pseudopotentiel fut introduite par Fermi en 1934 pour étudier les états atomiques des couches minces [3]. Dans l'année suivante, Hellman proposa que cette méthode puisse être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des métaux alcalins. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Phillips et Kleinman en 1959 qui se sont basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W) [4,5] pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur peuvent être utilisés pour construire un potentiel orthogonal. Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valence loin du cœur [6].

Un pseudopotentiel est un potentiel analytique dans lequel sont baignés les électrons de l'atome non inclus dans le cœur. Son rôle est de singer le vrai potentiel engendré par le noyau et les électrons de cœur afin de n'avoir à traiter explicitement que les électrons de valence de l'atome [6] ainsi, ce sont les électrons de valence qui sont pris en compte parce qu'ils sont les seuls qui se déplacent dans un potentiel électronique et les électrons du cœur sont supposées « gelés » [4]. Cette méthode fut appliquée notamment pour le calcul des structures électroniques des solides et liquides, les interactions électron-phonon, la supraconductivité, les vibrations des réseaux, les liaisons et structures des cristaux ... etc [7,8].

I-3-Le principe de cette méthodes :

La méthode de pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies $E_n(k)$ et d'autres propriétés des semi-conducteurs. La vertu de cette approche n'est seulement que les électrons du cœur sont supposés figer dans la configuration atomique et les électrons de valence se meuvent dans un potentiel périodique d'un seul électron [7]. Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode d'N.F.E.M ou d'autres méthodes standard pour résoudre l'équation de Schrödinger [8].

I-4-Formalisme mathématique :

Dans un atome ou dans un solide le potentiel agissant sur un électron de valence est très attractif à l'intérieur du cœur (figure I-1-a).

Dans cette région la fonction d'onde oscille rapidement (figure I-1-b), ce qui se traduit par une énergie cinétique élevée, où l'énergie potentielle est très faible, ou bien comme une manifestation du principe de Pauli qui exige que la fonction d'onde soit orthogonale aux orbitales des électrons du cœur [9].

Comme dans la méthode O.P.W la fonction ψ_k est donnée par la somme d'onde Φ_k^v planes et Φ_k^c des états atomiques occupés du cœur [8]

$$\psi_k(r) = \Phi_k^v(r) + \sum b_c \Phi_k^c(r) \quad (I-1)$$

Φ_k^v et Φ_k^c : des fonction atomique.

b_c : une constante calculée par l'orthogonalité de Ψ_k avec chaque niveau du cœur.

La fonction d'onde ψ_k doit être orthogonale aux états du cœur :

$$\langle \Phi_k^v | \psi_k \rangle = 0 \quad (I-2)$$

Par ailleurs la fonction d'onde ψ_k satisfait à la relation :

$$\psi_k(r) = \Phi_k^v(r) + \sum_c \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r) \rangle \Phi_k^c(r) \quad (I-3)$$

Vérifier l'équation de Schrödinger :

$$H\psi_k = E_k\psi_k \quad (I-4)$$

En reportant les développements des équations (I-2) et (I-3) dans (I-4) on trouve :

$$H(\Phi_k^v(r) + \sum_c \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r) \rangle \Phi_k^c(r)) = E_k(\Phi_k^v(r) + \sum_c \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r) \rangle \Phi_k^c(r)) \quad (I-5)$$

Sachant que :

$$H\Phi_k^c = E_k^c\Phi_k^c \quad (I-6)$$

Et par la suite :

$$H\Phi_k^v(r) + E_k \sum_c \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r) \rangle \Phi_k^c(r) = E_k (\Phi_k^v(r) + \sum_c \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r) \rangle \Phi_k^c(r)) \quad (\text{I-7})$$

Et d'une façon équivalente :

$$H\Phi_k^v(r) + \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r) \rangle \Phi_k^c(r) = E_k \Phi_k^v(r) \quad (\text{I-8})$$

On faisant intervenir le potentiel $V(r)$ en posant :

$$V_R \Phi_k^v = \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r) \rangle \Phi_k^c(r) \quad (\text{I-9})$$

Où (V_R) : représente le potentiel répulsif positif.

D'une façon condensée, on peut écrire:

$$(H + V_R) \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (\text{I-10})$$

Dans l'équation (I-10), il est important de noter que la valeur propre de l'énergie E_k n'est pas un pseudo énergie mais la vraie énergie correspondant à la vraie fonction d'onde ψ_k [10].

Donc cette équation devient :

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V_c + V_R \right) \Phi_k^v = \left(\frac{P^2}{2m} + V_p \right) \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (\text{I-11})$$

V_c : le potentiel attractif (négatif) du cœur.

V_R : le potentiel répulsif (positif).

V_p : le pseudopotentiel faible qu'on peut l'écrire comme : $V_p = V_c + V_R$

Dans l'équation de Schrödinger on peut considères le pseudopotentiel comme perturbation [11].

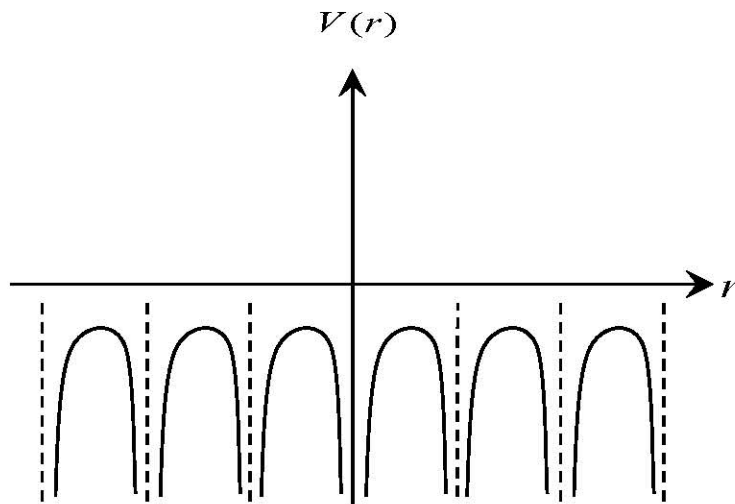


Figure I-1-a : Potentiel cristallin [9].

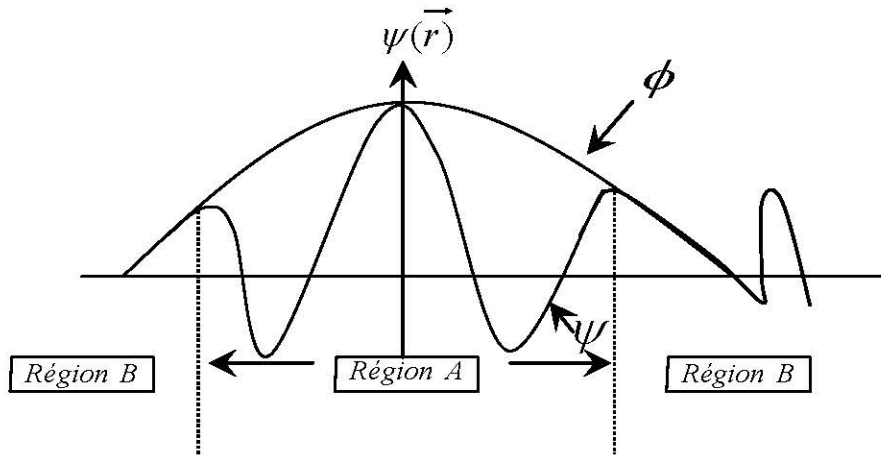


Figure I-1-b : Fonction d'onde [9].

I-5- Caractéristiques du pseudopotentiel :

Le pseudopotentiel est considéré comme une perturbation, les éléments de matrice du pseudopotentiel V_r sont donnés par [12, 13] :

$$\psi_k V_r \psi_k = \sum_c (E_v - E_c) \int dr |\psi^* \psi|^2 \quad (\text{I-12})$$

V_r est toujours positif et très faible car E_k^v est légèrement supérieur à E_k^c d'où l'utilisation de la théorie des électrons presque libres pour le calcul des niveaux de valences.

Si on néglige l'effet du cœur le pseudopotentiel devient local et dépend explicitement de la position r , il peut être comme suit [13, 14]:

$$V_r = V(r, r_0) = \sum_c (E_v - E_c) |\Phi_k^v(r)\rangle \langle \Phi_k^c(r) | \Phi_k^v(r)\rangle \quad (\text{I-13})$$

Si on tient compte de l'effet du cœur, le potentiel devient non local [15].

I-6- Les modèles de pseudopotentiel :

Le théorème de l'annulation et les démonstrations analytiques basées sur le pseudopotentiel électronique d'un système réel peut être décrite par la méthode N.F.E.M ou par un faible potentiel. [3].

L'approche de Philips et Kleinman n'a pas une large application comme méthode de calcul pour obtenir la structure de bandes d'un cristal malgré le fait que le pseudopotentiel V_p dépend fondamentalement des composantes du moment angulaire présents dans les états du cœur [12,16], donc pour ajuster les propriétés observées et résoudre ensuite l'équation de Schrödinger on utilise des modèles et des potentiels empiriques.

Il existe deux modèles de pseudopotentiel à savoir le pseudopotentiel local et le pseudopotentiel non local.

I-6-1-Le modèle local :

Cette méthode empirique est très exploitée dans le calcul des structures de bandes des semiconducteurs, elle ne tient pas compte de la dépendance énergétique du pseudopotentiel avec les états du moment angulaire représentant les états du cœur [9].

Le modèle le plus simple consiste en un potentiel local dépendant de la variable r , et pour ce fait plusieurs formes potentielles ont été proposées. Le premier modèle [8] consiste en un potentiel de coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région de cœur, la forme de ce potentiel [12] $V(r)$ est donné par la relation suivante :

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

Où Z : le nombre des électrons de valence atomique.

r_c : Le rayon du cœur, il sert à ajuster les données atomiques.

I-6-1-a- Le modèle d'Ashcroft :

Ashcroft a proposé dans son modèle une autre forme de potentiel similaire qui est beaucoup utilisé que s'appelle aussi « the empty core potential » [11,17] c'est le potentiel des cœurs inoccupés présenté comme suit [11] :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-13})$$

I-6-1-b- Le modèle de Heine Abarenkov :

Heine et Abarenkov ont introduit plus de flexibilité pour cet ajustement par l'introduction d'un potentiel A considéré constant dans la région du cœur. Dans ce cas, la forme du potentiel sera [5,11] :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-14})$$

I-6-2- Le modèle non local :

Cette approche a fait son apparition à partir des années 1976 pour apporter une correction de la dépendance énergétique du potentiel répulsif. Le non localité traduit la différence d'énergie qui existe entre le cœur et l'électron de valence [9]. De la même façon le pseudopotentiel est essentiellement non local et dépend de r et de l'énergie E en choisissant des constantes différentes dans la région du cœur pour chaque moment angulaire orbital ($l = 1, 2, 3, \dots$) [9,18,19] , la dépendance en énergie peut être ainsi incluse en remplaçant la constante A par $A_l(E)$ [18]. Par conséquent, on peut écrire le pseudopotentiel non local sous la forme suivante [19,20]:

$$V_p = V_{NL}(r, E) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{I-15})$$

$A_l(E)$: une énergie de l'état profond, c'est une fonction dépendant de l'énergie des états du cœur.

$f_l(r)$: une fonction simulant l'effet du cœur.

P_l : l'opérateur de projection de la $l^{\text{ème}}$ composante du moment angulaire.

La fonction $f_l(r, E)$ a plusieurs formes comme celle de Ashcroft, Heine-Abarenkov ou une forme Gaussienne. Ces deux dernières sont les plus utilisées [3].

I-6-2-a-La fonction de Heine Abarenkov :

Plutôt que d'utiliser le potentiel exact dû à l'ion, Heine et Abarenkov ont proposé une méthode pour obtenir un modèle de pseudopotentiel pour les métaux. L'information sur l'ion est déduite des niveaux d'énergie atomiques tirés des données spectroscopiques plutôt que d'un calcul élaboré de mécanique quantique. La fonction $f_l(r)$ est définie comme suit :

$$f_l(r) = \begin{cases} 1 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \quad (\text{I-16})$$

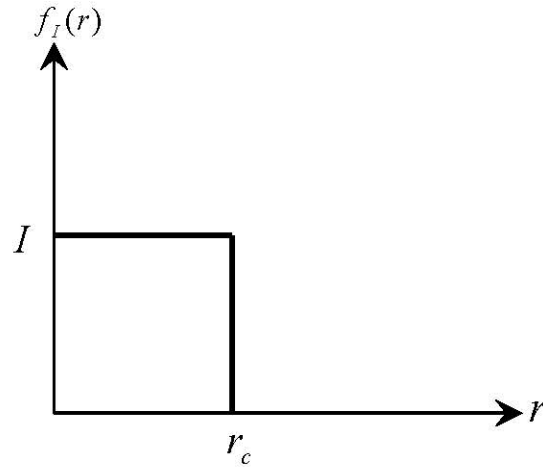


Figure I-2 : Fonction de Heine-Abarenkov [5].

r_c : Le rayon du cœur ionique.

I-6-2-b- La fonction de Gauss :

Les résultats de ce modèle sont les plus réalistes, et qui s'accordent avec les résultats empiriques [16]. La forme Gaussienne est représentée dans la figure (I-3) et donnée par l'expression suivante [18] :

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

Le pseudopotentiel écrit sous la forme suivante [18] :

$$V_{NL} = A_1 \exp\left(-\frac{r^2}{r_1^2}\right) \quad (\text{I-18})$$

A_1 : La profondeur du puits.

r_1 : Le rayon du cœur ionique.

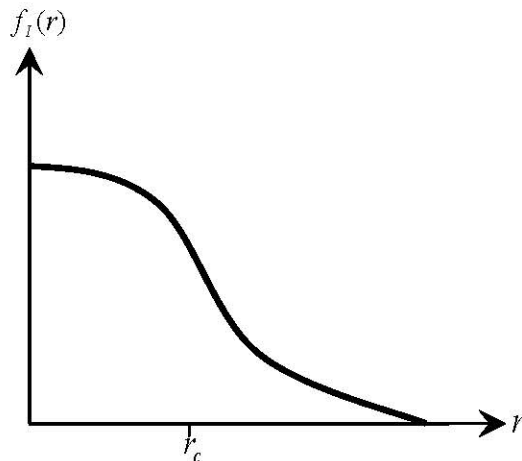


Figure I-3 : La fonction de Gauss.

I-6-2-c-La fonction d'Ashcroft :

Dans ce cas, on emploie pour la fonction $f_I(r)$ la forme carrée, à cause de sa simplicité, sa précision et sa large application [11,17,19], l'effet du cœur est pris en considération dans une fenêtre unitaire pour $r < r_c$ et plus en s'éloigne plus l'effet est atténué jusqu'à l'annulation comme c'est indiqué sur la figure (I-4)

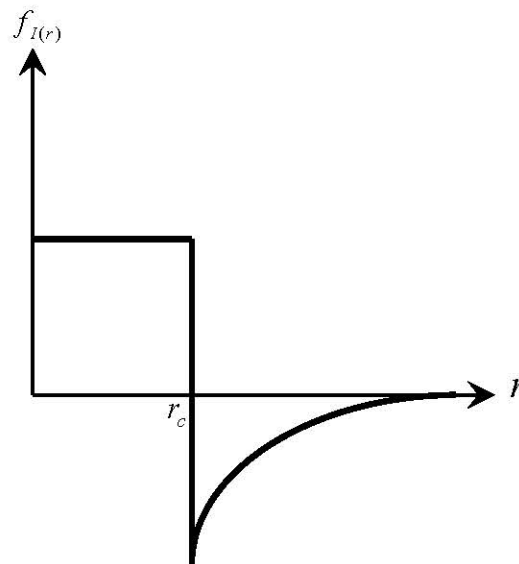


Figure I-4 : Fonction d'Ashcroft.

I-7- La méthode empirique des pseudopotentiels (E.P.M):

Il s'agit d'une approche dérivée de la méthode des pseudopotentiels décrite précédemment mais dans laquelle les pseudopotentiels sont supposés locaux. Cette méthode datée de 1959 utilise des paramètres d'ajustement pour modéliser le potentiel ionique [21]. Elle est très exploitée dans le calcul des structures de bandes des semiconducteurs, elle ne tient pas compte de la dépendance énergétique du pseudopotentiel avec les états du moment angulaire représentant les états du cœur [22]. On va donc s'intéresser aux électrons de valence dans le cas d'un cristal massif [23]. La méthode [E.P.M] est appliquée dans les semiconducteurs de structure diamant ou zinc blende [21,24].

Il existe deux approches pour calculer les facteurs de forme de pseudopotentiel. Depuis le nombre de facteurs de forme pseudopotentiels pertinents est faible, ils peuvent être déterminés en ajustant un petit nombre de données expérimentales, telles que la position de pics dans les spectres de réflectivité optique ou de caractéristiques dans le spectre photoélectron. Cette approche est connue sous le nom de pseudopotentiel empirique Méthode (EPM) [7]. La méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme

expérimentaux $V(\vec{G})$ du pseudopotentiel $V_p(r)$ qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques donnée par l'expression suivante [5,27]:

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

Où :

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

$\vec{\tau}$: le vecteur de translation du réseau direct.

Dans le réseau réciproque le potentiel $V_p(r)$ prend la forme suivante [7,24]:

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

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

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

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

N_a : étant le nombre d'atome de base.

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

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V_p(r) \right) \psi_{n,k}(r) = E_n(k) \psi_{n,k}(r) \quad (\text{I-22})$$

n : représente l'indice de la bande.

$V_p(r)$: est le pseudopotentiel.

$\psi_{n,k}(r)$: Sont les fonctions de Bloc.

Les facteurs de forme des structures étudiées sont donnés comme suit [21] :

$$V(G) = V^s(G) \cos(Gr) + iV^A(G) \sin(Gr)$$

Avec :

$$V^s(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) - V_B(G)]$$

$$V^A(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) + V_B(G)]$$

$$\tau = \pm \frac{1}{2} (1,1,1)a$$

Où a : le paramètre du réseau.

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

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

- ✦ Choisir les facteurs de forme $V(\vec{G})$.
- ✦ Remplacer $V(\vec{G})$ dans la relation du pseudopotentiel qui inclut le facteur de structure.
- ✦ Résoudre l'équation de Schrödinger avec les potentiels construit et trouver l'énergies propre E_k et les fonctions d'onde propre ψ_k .
- ✦ 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 $V(\vec{G})$.

La procédure de calcul de la méthode (E.P.M) est illustrée dans le diagramme suivant [9,27]:

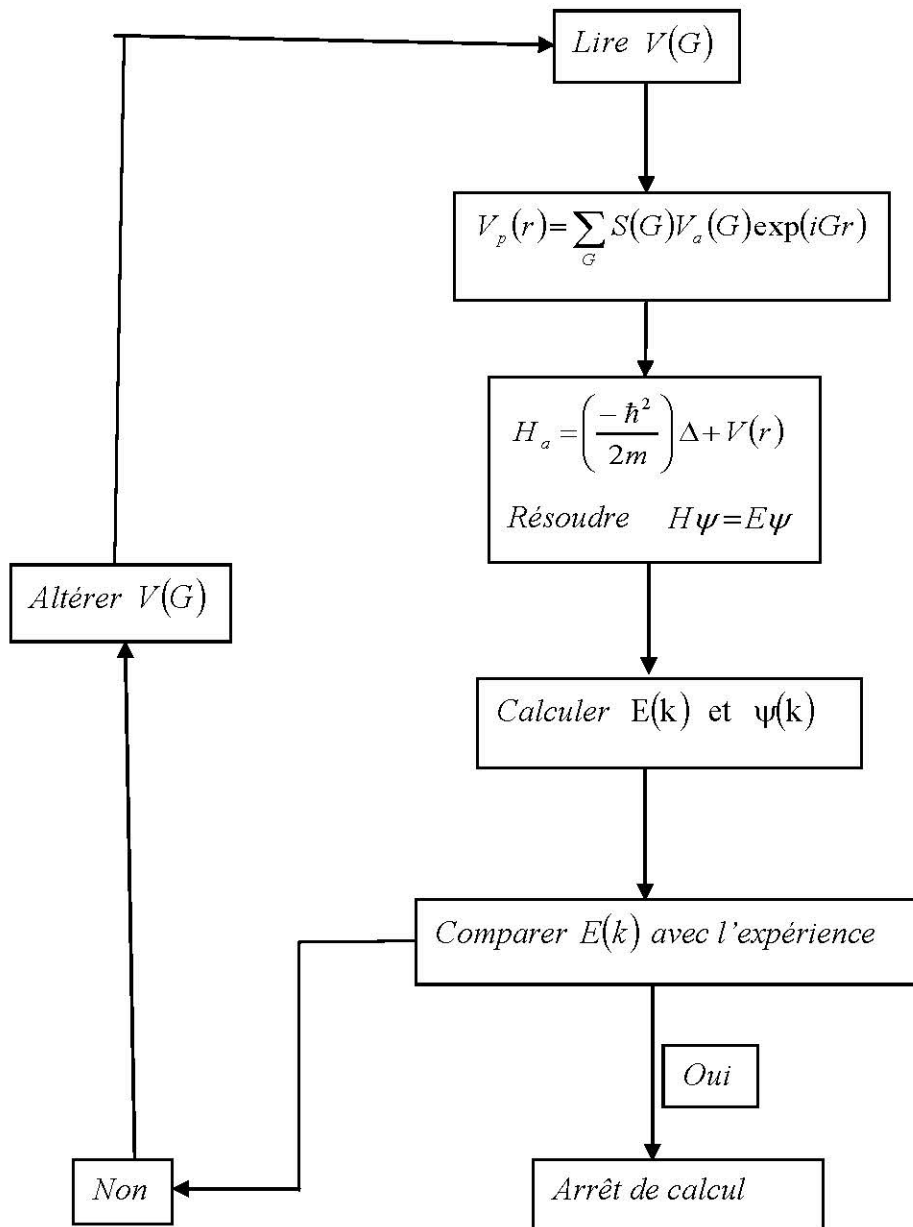


Figure I-5 : L'organigramme de la méthode EPM [8].

La méthode pseudopotentiel empirique locale est utilisée pour étudier les propriétés électroniques des alliages semiconducteurs, combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) introduisant l'effet du désordre comme un potentiel effectif.

I-9- Approximation du cristal virtuel (VCA) :

Dans l'approximation du cristal virtuel (Virtual-Crystal Approximation VCA), on considère que les distorsions sont suffisamment faibles (théorie de perturbation du premier ordre). Pour préserver la structure de bande du cristal parfait, ce qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Ce modèle prévoit une variation linéaire des principaux paramètres dans l'alliage. En particulier, le potentiel cristallin de l'alliage ternaire $A_xB_{1-x}C$ est défini par interpolation linéaire entre ceux des composants constituant le cristal [28]

$$V(\mathbf{x}) = xV_{AC} + (1-x)V_{BC} \quad (I-27)$$

L'hamiltonien considéré dans la VCA est donné par :

$$H(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (I-28)$$

Pour établir le calcul de la structure de bandes, il est nécessaire de construire le potentiel de l'alliage en fonction de la composition, en tenant compte l'effet de désordre [28].

I-10- Approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA) :

Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA), le potentiel du au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système devient [14] :

$$V(\mathbf{r}) = V_{vca} + V_{dés} \quad (I-29)$$

$$V(\mathbf{r}) = V_{VCA} - p(x(1-x))^{1/2} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (I-30)$$

V_{VCA} : le potentiel périodique du cristal virtuel

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

p : le paramètre ajustable.

L'équation (I-29) peut être écrite sous une forme plus étendue :

$$V(\mathbf{r}) = xV_{AC}(\mathbf{r}) + (1-x)V_{BC}(\mathbf{r}) - p \left[x(1-x)^{1/2} \right] (V_{AC} - V_{BC}) \quad (I-31)$$

Sous une forme plus condensée, en termes de séries de Fourier $V(\mathbf{r})$ devient [14] :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) V(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{I-32})$$

Avec $V(\mathbf{G})$ est le facteur de forme donné par [14]

$$V(\mathbf{r}) = xV_{AC}(\mathbf{G}) + (1-x)V_{BC}(\mathbf{G}) - p \left[x(1-x)^{\frac{1}{2}} \right] (V_{AC}(\mathbf{G}) - V_{BC}(\mathbf{G})) \quad (\text{I-33})$$

$V_{AC}(\mathbf{G})$ 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 semiconducteur $Mg_xZn_{1-x}Te$ 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 (I-34)

$$V_{Mg_xZn_{1-x}Te} = xV_{MgTe}(\mathbf{G}) + (1-x)V_{ZnTe}(\mathbf{G}) - p \left[x(1-x)^{\frac{1}{2}} \right] [V_{MgTe}(\mathbf{G}) - V_{ZnTe}(\mathbf{G})] \quad (\text{I-34})$$

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] L. Hannachi, thèse de doctorat, université de Sétif (Algérie) 2010.
- [4] H. Bouafia, thèse de doctorat, université d'Oran (Algérie) 2014.
- [5] I. V. Abarenkov, V. Heine, Phil. Mag. **12** (1965) 529.
- [6] C. Frayret, thèse de doctorat, université de Bordeaux (France) 2004.
- [7] P. Y. Yu M. Cardona, fundamentals of semiconductors, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010.
- [8] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of semiconductors, Springer, Berlin, 1988
- [9] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, Université Constantine (Algérie) 2006.
- [10] W. Hamidane, mémoire de master de physique, université de Tébessa (Algérie) 2015.
- [11] F. Mezrag, thèse de doctorat, université de Biskra (Algérie) 2012.
- [12] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. Phillpot, D. Wolf, Phys. Rev B**52** (1995) 12627.
- [13] H. Mekahlia, mémoire de master, Université de Tébessa (Algérie) 2016.
- [14] A. Kan Garlu, Phys. Rev. B**38** (1988) 9790.
- [15] G. Böhan, K. Unger, Physics State Solid, B**216** (1999)961.
- [16] S. Debouba, mémoire de master de physique, université de Tébessa (Algérie) 2016.
- [17] N. W. Ashcroft, Phys. Lett. **23**(1966) 48.
- [18] H. Nara and T. Kobayasi, J. Phys. Soc. Japon, **41**(1976)1429.
- [19] H. Aourag, Pseudopotentiel Method theory and Practice, Winter College on Computational condensé de matter physics, university of Sidi-Bel-Abes, 1995.
- [20] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat, université de Constantine (Algérie) 2006.
- [21] F. Maxime, thèse de doctorat, l'institut National de Lyon (France) 2009.
- [22] M. L. Cohen and T. Bergstresser Phys. Rev. **141**(1966) 789; M. L. Cohen and T. Bergstresser Phys. Rev. **164** (1976) 1069.
- [23] T. Eric, thèse de doctorat, Université Paris-Sud 11 (France) 2012.
- [24] N. Bouarissa and R. Bachiri, physica, B**322** (2002)193.
- [25] J. Chelikowsky, M.L. Cohen, Phys. Rev, B**14** (1976) 552.
- [26] W. M. Kara, thèse de doctorat, université de Biskra (Algérie) 2012.
- [27] S. Y. Davydov and S. K. Tikhonov, Semiconductors, **32** (1998) 947.
- [28] M. A. Monire, thèse de doctorat, université de Mascara (Algérie) 2016.



Chapitre II
Propriétés
élastiques

Les propriétés élastiques

II-1-Introduction :

On dit que la théorie élastique est celle qui traite du comportement des matériaux et qui ont la capacité de revenir à leur forme initiale et ce en supprimant les forces qui produisent les déformations [1,2]. Dans la région proche de la position d'équilibre des atomes, on peut considérer l'énergie du solide comme une fonction quadratique des paramètres du solide. Lorsqu'on exerce une contrainte sur le cristal, celui-ci se déforme, modifiant les paramètres qui le décrivent. Ce sont les déformations homogènes du cristal. Dans la région proche de l'équilibre, le développement quadratique de l'énergie permet d'exprimer une relation linéaire entre la contrainte et la déformation : c'est la loi de Hooke [3].

Il est très important d'étudier les propriétés élastiques des matériaux car ils ont un rôle important dans la fourniture d'informations précieuses sur l'anisotropie des liaisons interatomiques, la continuité structurelle et les propriétés mécaniques du matériau car le comportement élastique idéal correspond à la réflexion mécanique [4].

Dans cette section, nous découvrirons brièvement un rappel de l'élasticité et de ses propriétés mécaniques associées au milieu cristallin, et présenterons l'évolution et l'importance de ces constantes sous l'effet d'une déformations telles que la pression [2].

II-2-Le module d'élasticité:

L'élasticité est une propriété générale des matériaux solides qu'est fut énoncée par Hooke en 1660.

Le module d'élasticité est une grandeur définie par le rapport entre une contrainte donnée (poisson, compression, young, cisaillement) appliquée le long d'un axe, et la déformation élastique provoquée par cette contrainte. Le module d'élasticité décrit ainsi la rigidité d'un matériau : pour une même contrainte, le matériau est d'autant plus rigide que le module d'élasticité est grand (car la déformation est alors plus faible). Pour un matériau donné, le module d'élasticité reste constant dans une certaine fourchette de contrainte (sous la limite élastique). Le module d'élasticité normalement est plus grand (les déformations sont plus faibles) lorsque les charges sont appliquées parallèlement aux fibres (dans la direction longitudinale) que perpendiculairement (directions radiale et tangentielle).

Les propriétés élastiques sont fortement corrélées au type de liaisons entre les atomes car elles déterminent l'énergie de cohésion de la matière, la force nécessaire pour écarter les atomes les

uns des autres. En fait, deux facteurs ont un effet particulièrement important sur le comportement élastique des cristaux : les forces qui retiennent les atomes les uns aux autres (liaisons interatomiques), elles agissent comme de petits ressorts qui lient un atome à ces voisins, et la façon dont les atomes sont empilés (l'empilement atomiques) ; ce dernier détermine le nombre de petits ressorts par unité de surface et l'angle selon lequel on les étirées [5].

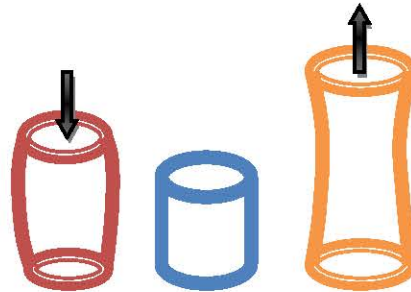


Figure II-1 : Un module d'élasticité est le rapport entre une contrainte et la déformation relative qui en résulte.

II-3-Les contraintes et les déformations:

L'effet des forces sur différents matériaux est expliqué par Robert Hooke (1635-1703) qui déclare que l'allongement est toujours proportionnel à la force appliquée [6] et qui établit que la déformation est directement liée à la contrainte dans un solide élastique. Cette loi s'applique seulement dans le cas des petites déformations [7].

Cette loi n'est rigoureusement vraie que pour les céramiques, le verre, la plupart des minéraux et les métaux les plus durs. Mais, dans quelle mesure le comportement d'une structure dépend de son matériau constitutif plutôt que de ses dimensions et de sa forme ? Nous avons besoin de standards objectifs de comparaison qui soient indépendants de la taille et de la forme du matériau. La considération des conditions qui règnent en chaque point d'un matériau soumis à des forces mécaniques conduit aux notions de contrainte et de déformation [6].

II-3-1-Les contraintes :

La contrainte est la force exercée sur l'unité de surface d'un solide [8], et il est déterminé avec quelle intensité les atomes du matériau sont écartés les uns des autres ou comprimés les uns sur les autres. Cette contrainte est, pour une traction simple [6], est donc homogène à une pression et exprimée en pascals (Pa) [3].

qss8

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

σ : est la contrainte.

F : est la force.

S : est la surface.

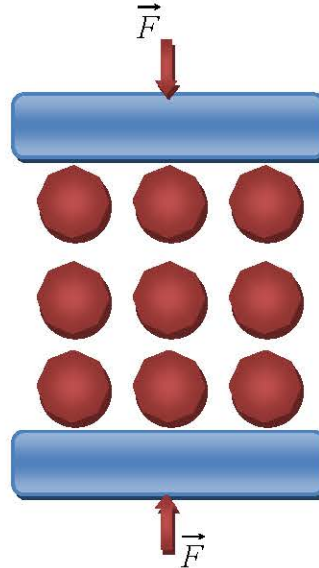


Figure II-2 : Une force s'exerce sur l'unité de surface du solide.

La composante tangentielle peut aussi être exprimée en fonction de composantes parallèles aux axes des coordonnées. Si on extrapole à un cas tridimensionnel, comme proposé sur la figure (II-3), une contrainte σ_{ij} est définie comme agissant sur le plan i qui indique la direction de la force le long de la direction j , et cette dernière indique la position normale de la face à laquelle s'applique la force. En conséquence, les composantes présentant des indices égaux correspondent aux contraintes normales et celles présentant des indices différents, aux contraintes tangentielles. Si le milieu est en équilibre statique, la somme de toutes les composantes de la contrainte ainsi que le moment total sont nuls [9]. Il en résulte les composantes tangentielles :

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (\text{II-2})$$

Et les composantes normales :

$$\sigma_{ii} = \sigma_{jj} \quad (\text{II-3})$$

Le nombre de composantes indépendantes de la contrainte est réduit de 9 à 6 termes indépendants $(\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz})$ [10], en appliquant à un cube élémentaire la condition qu'il n'y a pas d'accélération angulaire et que le couple total doit être donc nul [11]. Seuls six paramètres du

tenseur de contraintes suffisent donc à définir complètement l'état de contrainte en tout point P du milieu continu [9].

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{21} & \sigma_{31} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{32} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad \text{avec : } i, j = 1, 2, 3 \quad (\text{II-4})$$

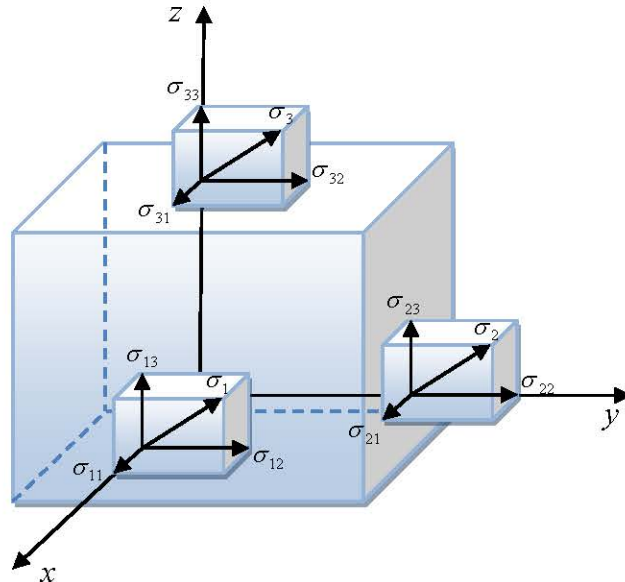


Figure II-3 : Les composantes du tenseur de contraintes [12].

II-3-2-Les déformations:

La déformation élastique est une déformation réversible, c'est-à-dire lorsque l'on supprime les sollicitations le milieu retourne à son état initial [13]. En général, toute force appliquée à un milieu continu va induire une déformation de ce milieu. Les forces internes, propres à chaque système, tendent cependant à résister à cette déformation. En conséquence, et pour de petites quantités de déformation, le milieu va retrouver sa forme et son volume initial une fois les forces extérieures retirées. Si ce retour à l'état initial est parfait, le milieu est dit élastique. Il existe donc une relation entre la contrainte appliquée et la déformation subie par le milieu : cette relation est appelée Loi de Hooke [9].

Dans cette gamme, l'allongement est proportionnel à la force dans le cas d'un étirement, et l'angle est proportionnel au couple dans le cas d'une torsion.

La déformation élastique intervient pour les faibles sollicitations. Si l'on augmente les sollicitations, on change le mode de déformation [13].

L'étude analytique est petite et flexible avec une déformation qui obtient sous l'influence des forces externes relativement importantes. Et pour décrire la déformation d'un objet liée à des vecteurs orthogonaux x_1, x_2, x_3 [14] le long de l'unité étroitement liée au solide comme sur la figure (II-4), en supposant qu'ils ne sont pas déformés par la déformation du corps, par conséquent, nous étudions le déplacement de points de corps déformés de coordonnées cartésiennes associé à une condition corporelle non déformée.

Pour la déformation uniforme [11] chaque maille primitive du cristal est déformée de la même façon.

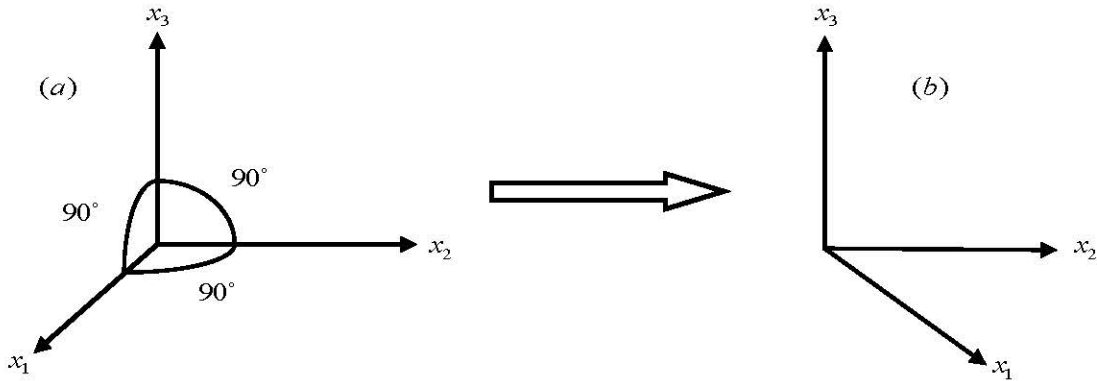


Figure II-4 : Axes des coordonnées avant et après la déformation : (a) état initial, (b) état déformé [11].

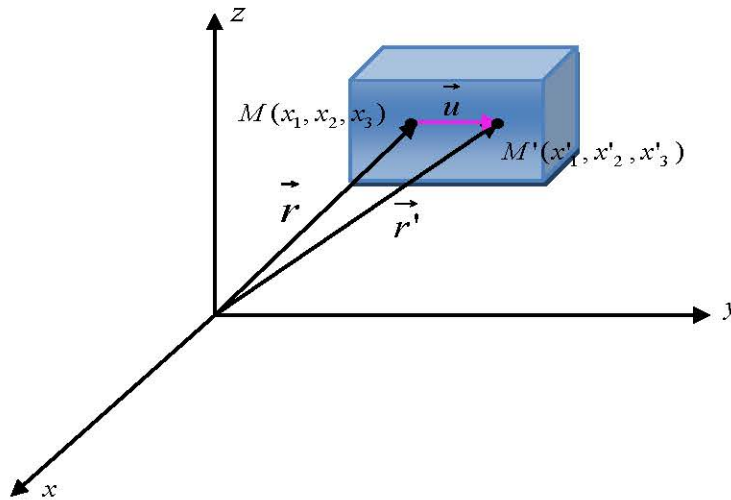


Figure II-5 : Axes de coordonnées pour la description d'un état déformé élastique [2].

Dans la figure II-5 on peut définir les vecteurs \vec{r} et \vec{r}' comme suit :

$$\vec{r} = \vec{r}(x, y, z) \tag{II-5}$$

$$\vec{r}' = \vec{r}'(x', y', z') \tag{II-6}$$

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

\vec{u} : Le déplacement est une fonction pour les coordonnées: $\vec{u} = \vec{u}(x, y, z)$

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

$$u_1 = \varepsilon_{11}x_1 + \varepsilon_{12}x_2 + \varepsilon_{13}x_3 \quad (\text{II-7-a})$$

$$u_2 = \varepsilon_{21}x_1 + \varepsilon_{22}x_2 + \varepsilon_{23}x_3 \quad (\text{II-7-b})$$

$$u_3 = \varepsilon_{31}x_1 + \varepsilon_{32}x_2 + \varepsilon_{33}x_3 \quad (\text{II-7-c})$$

Où :

$$u_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij}x_j \quad (i = 1, 2, 3) \quad (\text{II-8})$$

Ou bien :

$$\vec{u} = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \vec{r} \quad (\text{II-9})$$

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

$$[\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{II-10})$$

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

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

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{II-11-a})$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{II-11-b})$$

$$\Delta u_3 = \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \Delta x_3 \quad (\text{II-11-c})$$

ε_{ij} définie par la formule suivante [1] :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (\text{II-12})$$

Les quantités ε_{ij} ne dépendent pas des valeurs des déplacements sont les composés de tenseur de déformation et les équations (II-10-a), (II-10-b), (II-10-c) s'écrivent comme suit:

$$\Delta u_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} x_j \quad (i=1,2,3) \quad (\text{II-13})$$

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

Le tenseur $|\varepsilon_{ij}|$ n'est généralement pas symétrique, il est donc comme n'importe tenseur du seconde ordre qu'on peut l'imaginer comme la somme de deux tenseurs : le premier symétrique et le deuxième est antisymétrique (le tenseur symétrique est caractérisé par $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ et le tenseur antisymétrique est caractérisé par $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji}$ et le fait que $\varepsilon_{ii} = 0$) signifie que:

$$\varepsilon_{ij} = e_{ij} + \omega_{ij} \quad (\text{II-14})$$

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji}) = e_{ji} \quad (\text{II-15})$$

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ji}) = -\omega_{ji} \quad (\text{II-16})$$

e_{ij} : Le tenseur symétrique.

ω_{ij} : Le tenseur antisymétrique.

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

$$\omega_{ij} = 0 \quad (i = j) \quad (\text{II-17})$$

$$\omega_{ij} + \omega_{ji} = 0 \quad (\text{II-18})$$

Alors nous obtenons:

$$du_i = \sum_{j=1}^3 \omega_{ij} dx_j \quad (\text{II-19})$$

Avec la combinaison et la multiplication par dx_i nous obtenons :

$$\sum_{i=1}^3 du_i dx_i = \sum_{i,j=1}^3 \omega_{ij} dx_i dx_j \quad (\text{II-20})$$

En appliquant les conditions du tenseur antisymétrique. Le coté gauche de l'équation (II-19) représente le produit scalaire entre le vecteur de déplacement et le vecteur de l'emplacement de vecteur à un point quelconque du vecteur dans le corps qui est une quantité nul. Cela signifie que le vecteur du déplacement dans l'un des points du corps est perpendiculaire avec le vecteur de localisation qui est calculées pour un point fixe 'o' du corps. Aussi on peut dire que le tenseur $|\omega_{ij}|$

est approprié pour le procédé à une rotation pur des points du corps autour d'un axe qui passe par un point du corps 'o'. Pour cela, la partie symétrique de $|\varepsilon_{ij}|$ (qui est $|e_{ij}|$ qui décrit la déformation) prend la forme suivante [10]:

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

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

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

$$\Delta u_i = \sum_{j=1}^3 e_{ij} \Delta x_j \quad (i = 1,2,3) \quad (\text{II-23})$$

Les composés diagonaux du tenseur $|e_{ij}|$ ont la même signification des composés diagonaux du tenseur de déplacement petit $|\varepsilon_{ij}|$ qui décrit la dilatation longitudinal. Tandis que les composés non diagonaux décrivant le déplacement angulaire [15].

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -\Delta p & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta p & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta p \end{bmatrix} \quad (\text{II-24})$$

$$\sigma_{ij} = -\Delta p \delta_{ij} \quad (\text{II-25})$$

II-4- Relation contrainte-déformation :

Les contraintes ont l'effet de forces internes sur la matière, mais les déformations sont l'effet du déplacement interne sur la matière. Il est connu que la contrainte et la déformation suivent une relation linéaire et proportionnelle jusqu'à une contrainte limite (Kollmann et Côté 1968, Gere et Timoshenko 1997) figure II-5, Par conséquent, cette relation est la suivante [3]:

$$\sigma = f(\varepsilon) \quad (\text{II-26})$$

Dans le tableau II-1, nous présenterons les différences entre la déformation et la contrainte.

Tableau II-1 : les différences entre la déformation et la contrainte

Déformations	Contraintes
Hypothèse des petites perturbations	Hypothèse des petites perturbations
vecteur déplacement : $\vec{u}(\vec{x}, t)$	vecteur contrainte : $\vec{t}(\vec{x}, \vec{n}, t)$
tenseur des déformations : $\varepsilon = \frac{1}{2}(\overrightarrow{grad}(u))$	tenseur des contraintes : $\vec{t} = \sigma \cdot \vec{n}$ avec $\sigma = \sigma(\vec{x}, t)$
Sans dimension	N.m ⁻² ou Pa (Pascal)

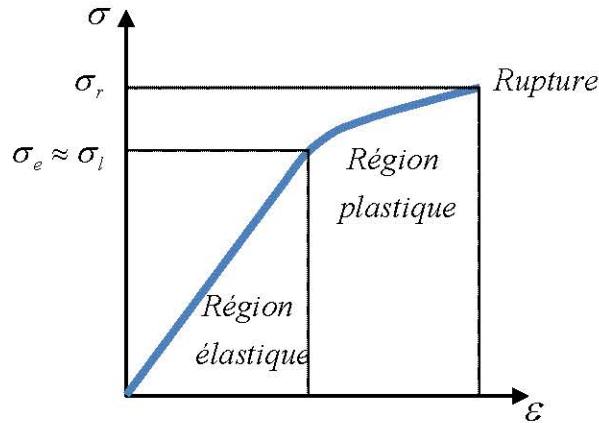


Figure II-6 : la courbe contrainte-déformation d'un matériau.

II-4-1- La loi de Hooke généralisée:

Le comportement d'un matériau élastique divise en quatre cas sont présentées sur la figure II-6: (a) élasticité linéaire, (b) élasticité non linéaire avec assouplissement, (c) élasticité non linéaire avec raidissement, (d) élasticité non linéaire avec assouplissement suivi d'un raidissement [16].

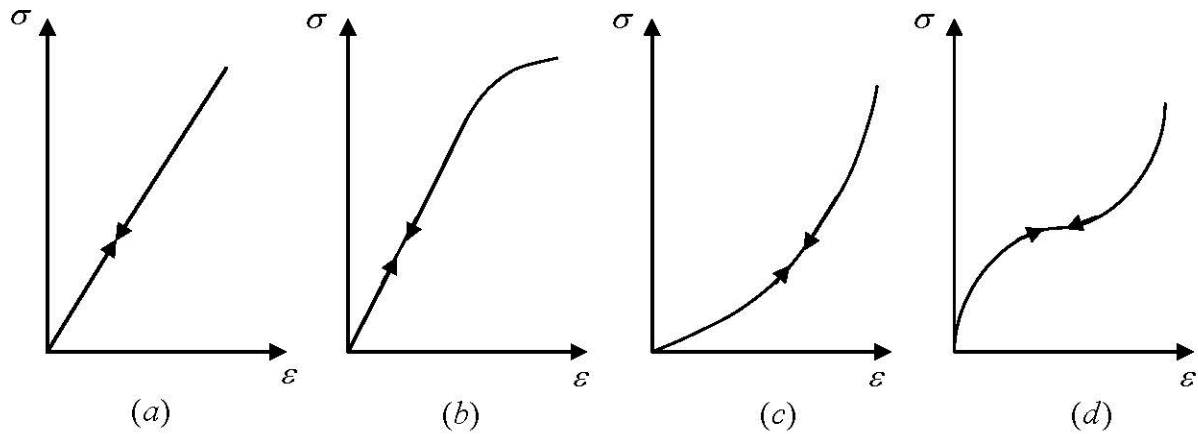


Figure II -7 : Présentations des comportements élastiques [18].

En 1678, Robert Hooke publie l'article «De Potentiâ Restitutiva», ou «Of spring». Il contient les résultats des expériences de Hooke sur les corps élastiques. C'est le premier article publié dans lequel les propriétés élastiques des matériaux sont discutées.

La loi de Hooke est une loi de comportement des solides soumis à une déformation élastique de faible amplitude. Elle a été énoncée par Robert Hooke, par la phrase en latin (expériences datant de 1675).

Ce qui signifie « telle extension, telle force », ou bien en termes modernes « l'allongement est proportionnel à la force ». Hooke désirait obtenir une théorie des ressorts, en soumettant ces derniers à des forces croissantes successives [5]. De sa loi deux aspects sont importants:

1. La linéarité.
2. L'élasticité.

Ces deux aspects ne sont pas identiques, la linéarité exprime « l'allongement est proportionnel à la force », l'élasticité exprime que cet effet est réversible et permet donc de revenir à l'état initial tel un ressort soumis à de faibles forces. L'élasticité a une limite, qui est indépendante de la notion de linéarité, Hooke n'a considéré que la phase élastique et linéaire, donc proportionnelle et réversible [3].

La loi de Hooke exprimant la linéarité (cas linéaire d'élasticité) des relations entre les composantes du tenseur des déformations d'un matériau élastique et celles du tenseur des contraintes, elle s'écrit comme suivant [17]:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \cdot \sigma_{kl} \quad \text{ou} \quad \sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \quad (\text{II-27})$$

Où S_{ijkl} , C_{ijkl} sont des tenseurs d'ordre quatre appelés tenseurs des complaisances élastiques et rigidités élastiques respectivement. Un tenseur d'ordre quatre défini dans un espace de dimension trois ($i, j, k, l = 1, 2, 3$) possède 81 composantes. Les tenseurs σ_{ij} et ε_{ij} sont symétriques, les

composantes élastique C_{ijkl} ne changent pas lors d'une permutation des deux premiers ou de deux derniers indices :

$$C_{ijkl} = C_{jikl} \quad \text{et} \quad C_{ijkl} = C_{ijlk} \quad (\text{II-28})$$

Le nombre de composantes indépendantes ramènent à 36, au lieu de 81 initialement. On tire avec l'aide de théorème de Schwarz sur la commutativité de l'ordre des dérivations pour les dérivées secondes :

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij} \quad ; (i,j,k,l=1,2,3) \quad (\text{II-29})$$

Il est possible donc d'exprimer les 21 composantes indépendantes dans un tableau 6x6 symétrique comme présenté au tableau suivant [17,19]:

$$(C_{ijkl}) = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1131} & C_{1112} \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2231} & C_{2212} \\ C_{1133} & C_{2233} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3331} & C_{3312} \\ C_{1123} & C_{2223} & C_{3323} & C_{2323} & C_{2331} & C_{2312} \\ C_{1131} & C_{2231} & C_{3331} & C_{2331} & C_{3131} & C_{3112} \\ C_{1112} & C_{2212} & C_{3312} & C_{2312} & C_{3112} & C_{1212} \end{bmatrix} \quad (\text{II-30})$$

Les 21 composantes peuvent alors être indexées selon deux indices :

$$C_{\alpha\beta} = C_{ijkl} \quad \text{où} \quad (ij) \rightarrow \alpha, (kl) \rightarrow \beta \quad (\text{II-31})$$

Cette transformation permet alors de définir le tableau suivant en s'appuyant sur les correspondances suivantes [16] :

$$(ij) \rightarrow \alpha, (kl) \rightarrow \beta$$

$$(11) \rightarrow 1, (22) \rightarrow 2, (33) \rightarrow 3, (23) \text{ et } (32) \rightarrow 4, (13) \text{ et } (31) \rightarrow 5, (12) \text{ et } (21) \rightarrow 6.$$

$$(C_{\alpha\beta}) = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{II-32})$$

La loi de Hooke s'exprime alors :

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^6 C_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta} \quad (\text{II-33})$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (\text{II-34})$$

Pour les cristaux de symétrie cubique, le tenseur des constantes élastiques se simplifie par symétrie. Donc, on ne trouve que trois valeurs distinctes C_{11} , C_{12} , C_{44} [19]. La matrice (C_{ijkl}) s'écrit dans ce cas :

$$(C_{ijkl}) = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{II-35})$$

La matrice des constantes élastiques $[S]$ qui a la même forme de $[C]$, est relié réciproquement à la matrice $[C]$ par la relation de Hooke, elle s'écrit donc de cette forme [20]:

$$(S_{\alpha\beta}) = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{II-36})$$

Pour un cristal cubique, les modules d'élasticité sont définis en fonction des constantes d'élasticité [11]:

$$C_{44} = -\frac{1}{S_{44}} ; C_{11} - C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1} ; C_{11} + 2C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1} \quad (\text{II-37})$$

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

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

En utilisant les facteurs de forme symétriques et antisymétriques ajustés, on a pu calculer la polarité qui est définie comme [21] :

$$\alpha_p = -\frac{V_a(3)}{V_s(3)} \quad (\text{II-38})$$

Avec $V_s(3)$ et $V_a(3)$ sont respectivement les facteurs de forme symétriques et antisymétriques pseudopotentiels pour les alliages ternaires d'intérêt pour calculer les constants élastiques des semiconducteurs.

En utilisant la description de Baranowski [22,23], et les interactions covalentes et de recouvrement des liaisons dans les composés tétraédriques et après simplification, nous obtenons les expressions des constantes élastiques suivantes [24,25]:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \frac{\hbar^2}{m} \left[4.37(5 + \lambda)(1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} - 0.6075(1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (\text{II-39})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \frac{\hbar^2}{m} \left[4.37(3 - \lambda)(1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} + 0.6075(1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (\text{II-40})$$

$$C_{44} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (\text{II-41})$$

Où $d = \frac{\sqrt{3}}{4} a$ est la distance entre les plus proche-voisin, a est le paramètre du réseau, λ est le paramètre de dimensionnalité avec une valeur constante de 0.738 [26].

Les paramètres élastiques nous permettent de déterminer la réponse du cristal à des forces extérieures. Ils se caractérisent par les constantes élastiques, le module d'incompressibilité, le module de cisaillement, le module de Young et le coefficient de Poisson. Ils jouent un rôle important dans la détermination de la résistance des matériaux. Les valeurs de ces paramètres élastiques nous fournissent des informations précieuses sur les caractéristiques de liaison entre les plans atomiques adjacentes et le caractère anisotrope de la liaison et la stabilité structurelle [27,28].

II-5-2-Le module de compressibilité :

Le module de compressibilité B (bulk modulus en anglais) est également appelé aussi Module de rigidité à la compression, qui est défini comme étant le rapport du changement de la pression hydrostatique p agissant sur un volume au changement de la fraction du volume dans les solides par rapport au cristal cubique isotrope. Il décrit la réponse du matériau à une pression uniforme. Elle est reliée aux constantes élastiques par la relation :

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{II-42})$$

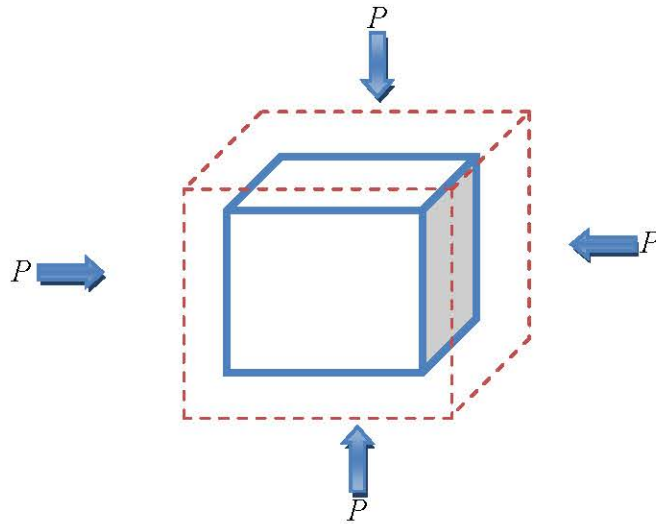


Figure II-8 : La compressibilité quantifie l'aptitude d'un corps à se contracter sous l'effet de la pression.

II-5-3-Les constantes des forces :

α et β représentent les constantes de force d'allongement (bond-stretching force constants) et de force de courbure (bond-bending force constants). Les relations de α et β sont donné par Verma [25] comme suit :

$$\alpha = \frac{A(Z_1 Z_2)^S}{d^3} \quad (\text{II-43})$$

$$\beta = \frac{V(Z_1 Z_2)^B}{d^3} \quad (\text{II-44})$$

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

$$A = 410 \text{ et } S = 0.2$$

$$V = 17.6 \text{ et } B = 0.85$$

$Z_1 Z_2$: sont les charges ionique et la charge cationique, respectivement.

$Z_1 Z_2 = 4$ pour les semiconducteurs (II-VI).

II-5-4 Module de cisaillement G :

Le module de cisaillement G est une grandeur physique propre à chaque matériau [29], qui est appelé le module de glissement, le module de coulomb ou encore le module de rigidité est une grandeur physique propre à chaque matériau et intervient dans la caractérisation des déformations causées par les efforts de cisaillement, il est défini comme une constante qui relie la contrainte de

cisaillement et la déformation pour un matériau élastique isotrope. Le module de cisaillement est relié aux constantes élastiques par la relation [30, 31]:

$$G = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2} \quad (\text{II-45})$$

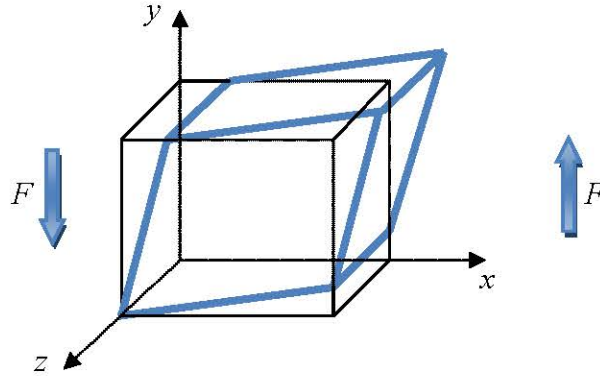


Figure II-9 : principe du cisaillement d'un matériau.

II-5-5-Module de Young Y:

Le module de Young (noté E) ou module d'élasticité longitudinale ou encore module de traction, est la constante qui relie la contrainte de traction (ou de compression) et la déformation pour un matériau élastique isotrope [32], il exprime la rigidité du matériau (exprime la force de liaisons atomique) [33,34] veut dire la valeur élevée de ce module indique que la matière subira une déformation plus faible et la valeur petite de ce module indique que la matière subira une déformation plus forte [35], est utilisé pour fournir une mesure de la rigidité du solide [36], c'est une constante propre à chaque matériau. Il est donné comme suite [31]:

$$Y = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{II-46})$$

Ce module dépend de [11] :

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

II-5-6-Le coefficient de poisson ν :

Ce coefficient a été mis en évidence analytiquement par Denis Poisson, mathématicien Français (1781-1840), auteur de travaux sur la physique mathématique et la mécanique, qui en détermina la valeur à partir de la théorie moléculaire de la constitution de la matière [29].

Le coefficient de Poisson (aussi appelé coefficient principal de Poisson) fait partie des constantes élastiques. Ce coefficient permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué. Le coefficient de Poisson est défini comme le rapport de la déformation latérale et la déformation axiale [32]. Dans le cas d'un matériau isotrope permet de relier directement le module de cisaillement G au module de Young E [3]. Le module de poisson utilisé dans notre travail est présenté par la relation suivante [37]:

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{II-47})$$

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

Le facteur d'anisotropie (A) a une valeur critique ($A=1$) qui sépare les matériaux isotropique ($A < 1$) et anisotropiques où ($A > 1$) [31], est donné par la relation suivante [32]:

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (\text{II-48})$$

II-5-8-Le facteur d'ionocité f_i :

L'étude des tendances et de la liaison chimique en semi-conducteurs apparaît ainsi comme une partie extrêmement utile de recherche de nouveaux matériaux. Dans ce modèle nous avons utilisé le facteur d'ionocité [25], qui est lié à la répartition de la charge entre les constituants et il est définit par Pauling comme une différence d'électronégativité entre les deux constituants d'un composé binaire [38]. Le calcul de facteur d'ionocité est basé sur la relation suivante :

$$f_i = \frac{0.87891 d^{0.24}}{(Z_1 Z_2)^{0.4}} \quad (\text{II-49})$$

II-5-9-Paramètre de Kleinman ξ :

Pour le système cubique le paramètre de Kleinman ξ peut être aussi exprimé comme une combinaison des deux constantes élastiques C_{11} et C_{12} [37,25] qui donné par x est le paramètre de

kleinman. La relation entre le paramètre κ et les constantes élastiques, Il est relié au tenseur de déformation interne ,qui donnée par [39]:

$$\kappa = \frac{C_{11} + 8C_{12}}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (\text{II-50})$$

Références:

- [1] V. Trinite, thèse de doctorat en physique, école polytechnique (France) 2006.
- [2] M. Benhamida, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie) 2014.
- [3] S. Daoud, thèse de doctorat, université Ferhat abbas- Sétif (Algérie) 2012.
- [4] K.A. Gschneidner Jr, A. Russell, A. Pecharsky, et al, Nat. Mater. **2** (2003) 587.
- [5] M. F. Ashby et D. R. H. Jones, matériaux propriétés et applications Dunod, (Paris) 1998.
- [6] B. Jacquout, Support de Cours, Propriétés mécaniques des Biomatériaux utilisés en Odontologie, université médicale virtuelle francophone (France) 2009.
- [7] F. Saad Saoud, thèse de doctorat, université Ferhat abbas- Sétif (Algérie) 2010.
- [8] N. Sebihi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie).
- [9] A. Saoudi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie) 2014.
- [10] D. Maillard, polycopies du cours vibrations et ondes, chapitre IX, université Paris Diderot, Paris 7, (France) 2007.
- [11] C. Kittel, physique de l'état solide, Dunod, 7ème édition, 1998.
- [12] A. Wüstefeld, thèse de doctorat, Université Montpellier II, Montpellier (France) 2007.
- [13] J. M. Baranowski, J. Phys. C **17** (1984) 6287.
- [14] D. Royer, Ondes élastiques dans les solides, Masson (1996).
- [15] L. Bendjaballah, mémoire de magister, université de Constantine, (Algérie) 2010.
- [16] P. Navi, propriétés acoustique des matériaux : propagation des ondes planes harmoniques, Presses polytechniques et universitaires romandes, 2006.
- [17] L. Landau, E. Lifchitz, théorie de l'élasticité, tom VII, Mir Moscou 1967.
- [18] F. khediri, mémoire de magister, université de Tébessa, (Algérie) 2012.
- [19] H. Morkoç, U. Ozgur, zinc oxide : fundamentals, materials and device technology, Wiley-VCH 2009.
- [20] M. Grundmann, The Physics of Semiconductors, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006.
- [21] P. Vogl, J. Phys. C **11** (1978) 251.
- [22] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer Series in Solid-State Sciences, 1988.
- [23] E. Schreiber, O.L. Anderson and N. Soga, "Elastic Constants and their Measurement". Mc Graw-Hill, New York (1973).
- [24] S. G. Shen, J. Phys. Condens. Matter. **6** (1994) 8733.
- [25] A. S. Verma, B. K. Sarkar, V. K. Jindal, Physica B **405** (2010) 1737.
- [26] W. Nakwaski, Physica B **210** (1995) 1.

- [27] F. Kang, S. Zhong-Ci, *Mathematical Theory of Elastic Structures*, Springer New York, (1981).
- [28] G. Mavko, T. Mukerji, J. Dvorkin, *The Rock Physics Handbook*, Cambridge University Press, (2003).
- [29] B. Mayer, H. An Ton, E. Bott, M. Methfessel, J. STicht, P. C. Schmidt, *Intermetallics* **11** (2003) 23.
- [30] M. Levinshtein, Rumyantsev and M. shur (EdS), *Hand-book Series on Semiconductors parameters*, World Scientific pub. CO Inc, Singapore, Vol **2** (1999).
- [31] Z. Tian, thèse de doctorat, université de Martin- Luther, Halle-Wittenberg, (Germany), 2008.
- [32] R. Haichour, thèse de doctorat, université de Sétif, U.F.A. S (Algérie) 2011.
- [33] A. Kellou, H.I. Feraoun , T. Grosdidier , C. Coddet , H. Aourag, *Acta Materialia* **52** (2004) 3263.
- [34] A. Sekkal, A. Benzair, H. Aourag, H. I. Faraoun, G. Merad, *Physica B* **405** (2010) 2831.
- [35] M. W. Barsoum, T. El-Raghi, W.D. poter, H. Wang, S. chakra borty, *J. Appl. phys.***88** (2000) 6313.
- [36] H.Langueur, thèse de doctorat en physique, Université Sétif I (Algérie) 2014.
- [37] E. Schreiber, O. L. Anderson and N. Soga, *Elastic Constants and their Measurement*, Mc Graw-Hill, New York (1973).
- [38] S. Yousfi, mémoire de magister, Université de M'Sila, (Algérie) 2004.
- [39] K. Kleinman, *phys. Rev.* **128** (1962) 2614.



Chapitre III
Résultats et
discussion

Résultats et discussions

III-1-Introduction :

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

La fabrication de nombreux dispositifs électroniques et dispositifs de détection étaient des composés semi-conducteurs II-VI cristallisés dans la structure du mélange de zinc soumis à spéculation et stabilité notamment en raison de ses applications potentielles dans la réalisation et le développement de dispositifs optiques et optiques comme appareils émetteurs de lumière blanche [2,3], éléments de cellules solaires, ou des divans conductrices transparentes ailettes de tampons (films) [4].

III-2-Les propriétés élastiques :

Il existe plusieurs méthodes qui sont utilisées pour calculer les propriétés des solides. Dans ce travail nous avons utilisé la méthode des pseudopotentiels empirique local (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui introduit l'effet du désordre compositionnel, et combinée avec le model des orbitales liées de Harrison (BOM), elle est utilisée pour étudier les propriétés élastiques telle que les constantes élastiques, le module de Young, de cisaillement ...etc, en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ [5].

Le pseudopotentiel est défini comme étant une superposition des pseudopotentiels atomiques de la forme suivante [6]:

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

V_L : la partie locale du pseudopotentiel.

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

Dans nos calculs, on néglige les parties non locales et on a considéré les composants de Fourier de $V_L(\vec{r})$ comme des paramètres du pseudopotentiel [7].

Donc :

$$V_P(\vec{r}) = V_L(\vec{r}) = \sum_G V(\vec{G}) S(\vec{G}) \exp(i\vec{G}\vec{r}) \quad (\text{III-2})$$

Avec $V(\vec{G})$ est le facteur de forme donné par [8]:

$$V(\vec{G}) = xV_{AB}(\vec{G}) + (1-x)V_{AC}(\vec{G}) - P[x(1-x)]^{1/2} [V_{AB}(\vec{G}) - V_{AC}(\vec{G})] \quad (\text{III-3})$$

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

Ces facteurs de formes ont été utilisés pour le calcul des constantes élastiques de l'alliage ternaire semiconducteur $Mg_xZn_{1-x}Te$ en faisant varier la valeur du paramètre p jusqu'à avoir un bon accord avec les valeurs expérimentales. La valeur de p dans notre étude est égal à ($p = 0.34501031$) correspondant à un bowing optique expérimental ($c = 0.67\text{eV}$). Les facteurs de forme de cet alliage sont calculés selon l'expression :

$$V_{Mg_xZn_{1-x}Te} = xV_{MgTe}(G) + (1-x)V_{ZnTe}(G) - P[x(1-x)]^{1/2} [V_{MgTe}(G) - V_{ZnTe}(G)] \quad (\text{III-4})$$

Les composés de Fourier $V(\vec{G})$ sont les paramètres du pseudopotentiel ou les facteurs de formes. Ces derniers ont été tirés de la littérature et ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [10] nommée le modèle d'optimisation de Kobayasi et Nara [9] où tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carré de l'écart des gaps d'énergies calculés par la méthode du pseudopotentiel par rapport à ceux trouvés expérimentalement, définit par [11]:

$$\delta = \left[\frac{\left(\sum_{i,j}^m (\Delta E_{ij})^2 \right)}{m-n} \right]^{1/2} \quad (\text{III-5})$$

δ doit être minimal.

$$\text{Avec :} \quad \Delta E_{ij} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}} \quad (\text{III-6})$$

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

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

Les facteurs de formes du pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques et aussi les paramètres du réseau des composés binaires semiconducteurs $MgTe$ et $ZnTe$ dans la phase zinc blende sont présentés 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°).

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°)
MgTe	-0.3302	0.2038	-0.0285	0.2085	0.0	0.03194	11.9998(u. a) 6.350 (Å°)

III-3-Les propriétés élastiques de l'alliage semiconducteur $Mg_xZn_{1-x}Te$:

La connaissance des constantes élastiques jouent un rôle important pour obtenir des informations sur les propriétés élastiques et la stabilité d'un solide [12].

Les propriétés élastiques définies la capacité d'un matériau à subir les contraintes à la limite d'élasticité et regagner la forme initiale [13]. Les deux binaires MgTe et ZnTe forment une bonne hétérostructure, car ils possèdent des paramètres de maille presque identique [14]. On peut utiliser les informations concernant les propriétés élastiques pour comprendre le type de liaison atomique, le module de compressibilité peut être aussi utilisé pour prédire les forces en absence d'imperfection.

III-3-1-Les constantes élastiques:

Les constantes élastiques C_{ij} sont des grandeurs macroscopiques reliant dans les solides homogènes, les contraintes aux déformations. On utilise l'approche de Baranowski pour calculer les constantes élastiques et voir l'effet de la concentration x de Magnésium [19]. Nos résultats concernent les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) pour les composés binaires MgTe, ZnTe et leurs alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$, pour les deux cas (VCA et VCAA) sont indiqués dans le tableau III-2 qui contient également les données expérimentales et théoriques disponibles pour la comparaison. On voit que nos valeurs calculées pour (C_{11} , C_{12}) sont en bon accord avec les résultats rapportés dans les Réfs [19-23], aussi il y'a un bon accord entre nos calculs pour C_{44} et ceux rapportés dans les Réfs [18-20,24].

Tableau III-2: Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dyne/cm²) de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Matériaux	Constantes élastiques (10^{11} dyne/cm ²)								
	C_{11}			C_{12}			C_{44}		
	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres
ZnTe	9.9808	7.13 ^(a)	6.105 ^(b) 7.149 ^(e) 9.98 ^(f) 9.8 ^(g) 8.2 ^(h) 7.13 ⁽ⁱ⁾	4.28121	4.07 ^(a) 4.28 ^(f) 3.18 ^(g) 4.2 ^(h) 4.07 ⁽ⁱ⁾	2.035 ^(b) 4.212 ^(e)	4.04277	3.12 ^(a)	2.654 ^(b) 2.33 ^(c) 3.772 ^(e) 4.04 ^(f) 5.5 ^(h)
Mg _{0,1} Zn _{0,9} Te	9.60992 ^{**} 9.78565 ^{***}	-	-	4.12613 ^{**} 4.19741 ^{***}	-	-	3.89104 ^{**} 3.96376 ^{***}	-	-
Mg _{0,25} Zn _{0,75} Te	8.87346 ^{**} 9.32406 ^{***}	-	6.318 ^(e)	3.82051 ^{**} 4.00342 ^{***}	-	3.873 ^(e)	3.58884 ^{**} 3.77528 ^{***}	-	3.598 ^(e)
Mg _{0,3} Zn _{0,7} Te	8.58912 ^{**} 9.13066 ^{***}	-	-	3.70286 ^{**} 3.92276 ^{***}	-	-	3.47203 ^{**} 3.69608 ^{***}	-	-
Mg _{0,5} Zn _{0,5} Te	7.31362 ^{**} 8.14232 ^{***}	-	5.58 ^(e)	3.17587 ^{**} 3.51302 ^{***}	-	3.572 ^(e)	2.9477 ^{**} 3.29036 ^{***}	-	3.406 ^(e)
Mg _{0,7} Zn _{0,3} Te	5.90682 ^{**} 6.81076 ^{***}	-	-	2.59441 ^{**} 2.96341 ^{***}	-	-	2.36932 ^{**} 2.74276 ^{***}	-	-
Mg _{0,75} Zn _{0,25} Te	5.54721 ^{**} 6.42412 ^{***}	-	5.069 ^(e)	2.44554 ^{**} 2.80393 ^{***}	-	3.298 ^(e)	2.22152 ^{**} 2.58369 ^{***}	-	3.205 ^(e)
Mg _{0,9} Zn _{0,1} Te	4.47298 ^{**} 5.10843 ^{***}	-	-	1.99983 ^{**} 2.26078 ^{***}	-	-	1.78027 ^{**} 2.04238 ^{***}	-	-
MgTe	3.77397	-	6.124 ^(d) 4.689 ^(e) 3.77 ^(f) 1.85 ^(j) 6.12 ^(d) 9.6 ^(k)	1.70866	-	2.817 ^(d) 3.081 ^(e) 1.71 ^(f) 2.9 ^(j) 2.81 ^(d) 1.76 ^(k)	1.49343	-	4.827 ^(d) 3.014 ^(e) 1.49 ^(f) 3.18 ^(j)

** Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

(a) Réf. [15], (b) Réf. [16], (c) Réf. [17], (d) Réf. [18], (e) Réf. [19], (f) Réf. [20], (g) Réf. [21], (h) Réf. [22], (i) Réf. [23], (j) Réf. [24], (k) Réf. [25].

La figure III-1 représente les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium dans l'intervalle $[0,1]$ avec et sans désordre. Nous notons que tous ces constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} diminuent non linéairement avec l'augmentation de la composition x en allant de ZnTe où ($x=0$) vers MgTe où ($x=1$) de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Les courbes de la figure III-1 correspondent à des interpolations quadratiques de la forme suivante :

$$C_{ij} = a + bx + cx(x-1) \quad (\text{III-7})$$

c: est le paramètre de courbure.

Leurs expressions analytiques sont d'écrites comme suites:

Sans désordre :

$$C_{11} = 10.0699502 - 4.6330332x - 1.7450682x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-8})$$

$$C_{12} = 4.3167477 - 1.9169189x - 0.7237999x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-9})$$

$$C_{44} = 4.0798241 - 1.9020975x - 0.7184494x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-10})$$

Avec désordre :

$$C_{11} = 9.929977 - 1.0244776x - 4.9746258x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-11})$$

$$C_{12} = 4.2593387 - 0.4473871x - 2.0371596x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-12})$$

$$C_{44} = 4.0220723 - 0.4103616x - 2.0540027x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-13})$$

D'après ces équations ,on peut noter que l'effet du désordre affecte fortement toutes les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} sans changement des signes des paramètres de courbure, et il augmente ces constantes élastiques dans tout l'intervalle $[0,1]$ de la concentration x de Magnésium.

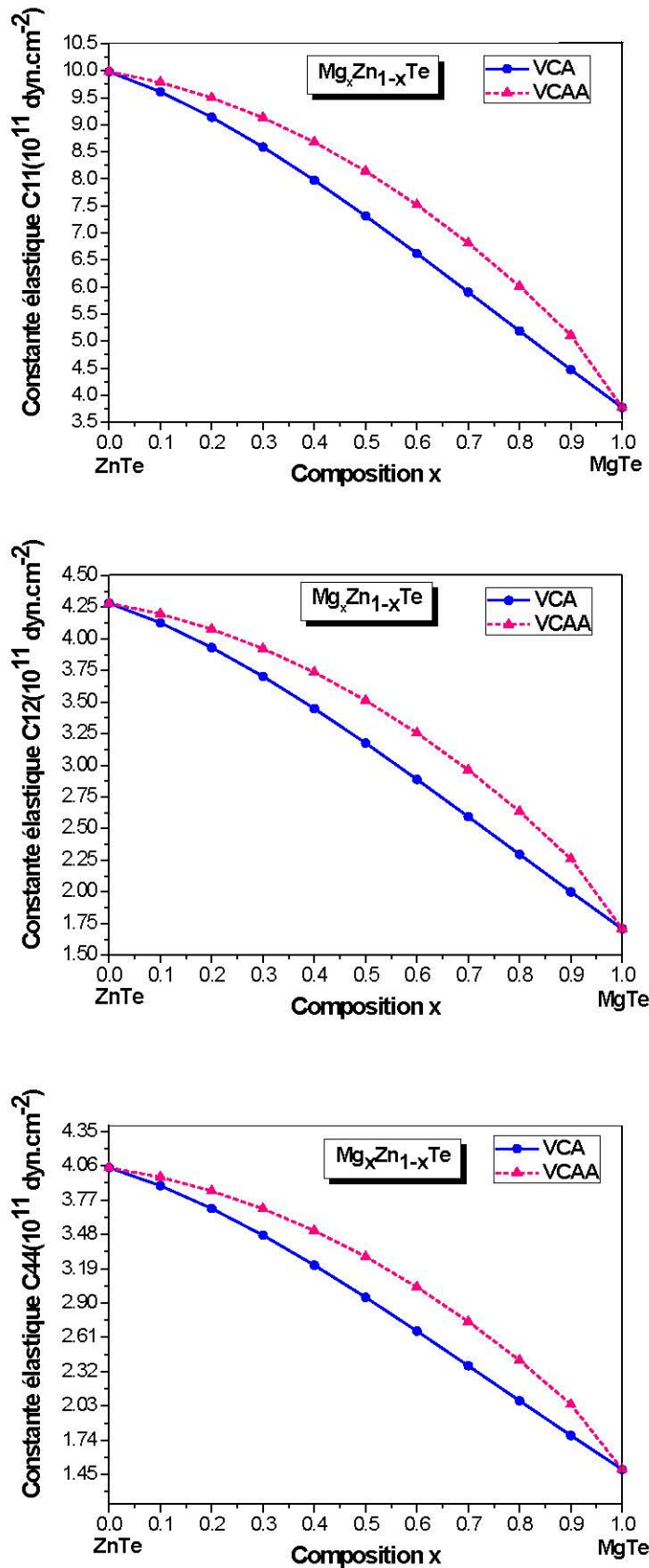


Figure III-1: Les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} en fonction de la concentration x de Magnésium: sans désordre (—) et avec désordre (- - - - -) de l'alliage ternaire.

La figure III-2 montre les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} avec et sans désordre en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$.

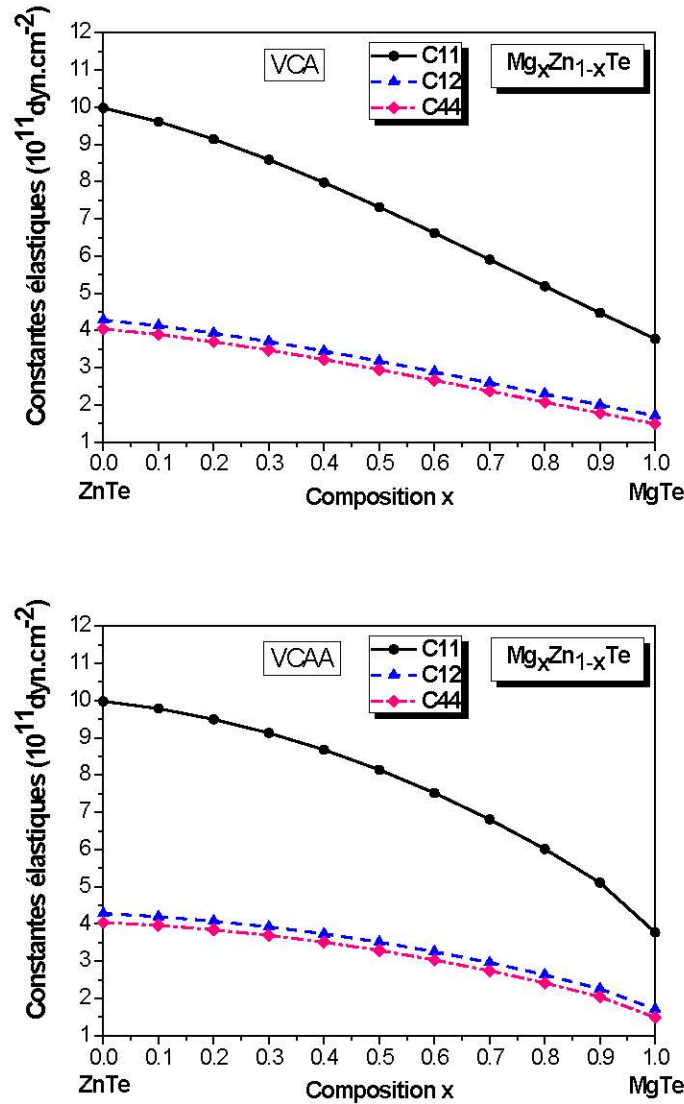


Figure III-2: Les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, avec et sans désordre.

La figure III-2 illustre les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} avec et sans désordre en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$, qualitativement ces constantes élastiques montrent un comportement similaire. On note qu'ils présentent tous un comportement non linéaire par rapport à la composition x avec différents taux de variation et que les vitesses de diminutions des constantes élastiques C_{12} et C_{44} sont presque similaire et plus faible par rapport à celle de C_{11} .

III-4-2-Le module de compressibilité et les constantes de force :

Le module de compressibilité élastique B est défini comme étant le rapport du changement de la pression agissante sur un volume au changement de la fraction du volume (le facteur d'élasticité volumique). Il décrit la réponse du matériau à une pression uniforme [26]. Pour déterminer les valeurs du module de compressibilité B et les constantes de force α et β , de l'alliage ternaire semiconducteur en tenant et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nous avons appliqué les formules (II-42), (II-43) et (II-44).

Le tableau III-3 représente les valeurs calculées du module de compressibilité B et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$.

D'une manière Générale, l'accord entre nos résultats pour les composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$ et les valeurs connues dans la littérature sont raisonnablement bons.

Tableau III-3 : Le module de compressibilité B en (10^{11} dyne / cm^2) et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en (N/m) de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Matériaux	B (10^{11} dyne/cm ²)			α (N/m)		β (N/m)	
	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
ZnTe	6.1811	5.09 ^(a)	3.391 ^(b) 2.61 ^(c) 5.191 ^(g) 6.18 ^(h) 5.1 ⁽ⁱ⁾ 5.09 ^(j)	29.30315672	18.61 ^(b) 21.9 ^(c) 29.51 ^(f) 39.02 ^(m) 39.028 ⁽ⁿ⁾ 32.04 ^(o)	3.097292446	6.203 ^(b)) 4.88 ^(c) 4.66 ^(f) 3.52 ^(m) 3 534 ⁽ⁿ⁾) 4 47 ^(o)
Mg _{0,1} Zn _{0,9} Te	5.9541* 6.0602*	-	-	28.97523338* 29.31464418*	-	3.062631522* 3.09850665**	-
Mg _{0,25} Zn _{0,75} Te	5.5048* 5.777***	-	4.688 ^(g)	28.48334838* 28.97324566*	-	3.010640137* 3.062421424*	-
Mg _{0,3} Zn _{0,7} Te	5.3316* 5.6587*	-	-	28.31938671* 28.83784526*	-	2.993309675* 3.048109838*	-
Mg _{0,5} Zn _{0,5} Te	4.5551* 5.0561*	-	4.2413 ^(g)	27.66354003* 28.22922469*	-	2.923987828* 2.983779708*	-
Mg _{0,7} Zn _{0,3} Te	3.6985* 4.247***	-	-	27.00769335* 27.52615191*	-	2.85466598* 2.909466143*	-
Mg _{0,75} Zn _{0,25} Te	3.4794* 4.2459*	-	3.8883 ^(g)	26.84373169* 27.33362897*	-	2.837335518* 2.889116805*	-
Mg _{0,9} Zn _{0,1} Te	2.8242* 3.2100*	-	-	26.35184668* 26.69125748*	-	2.785344133* 2.821219261*	-
MgTe	2.3971	3.87 ^(d)	3.76 ^(e) 3.617 ^(g) 4.11 ^(h) 4.35 ^(k) 4.38 ^(l)	26.02392334	30.07 ^(m) 29.834 ⁽ⁿ⁾) 25.40 ^(p)	2.750683209	2.65 ^(m) 2.555 ⁽ⁿ⁾) 2.69 ^(p)

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

^(a) Réf. [15], ^(b) Réf. [16], ^(c) Réf. [17], ^(d) Réf. [27], ^(e) Réf. [18], ^(f) Réf. [28], ^(g) Réf. [19], ^(h) Réf. [20], ⁽ⁱ⁾ Réf. [29], ^(j) Réf. [22], ^(k) Réf. [30], ^(l) Réf. [25], ^(m) Réf. [31], ⁽ⁿ⁾ Réf. [32], ^(o) Réf. [33], ^(p) Réf. [34].

La figure III-3 représente la variation des constantes de force α et β avec et sans désordre en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$. Cette figure, nous montre une diminution presque linéaire des deux constantes lorsque on ne tient pas compte de

l'effet de désordre (VCA), et non linéaire lorsque on prend en considération l'effet de désordre (VCAA) avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium.

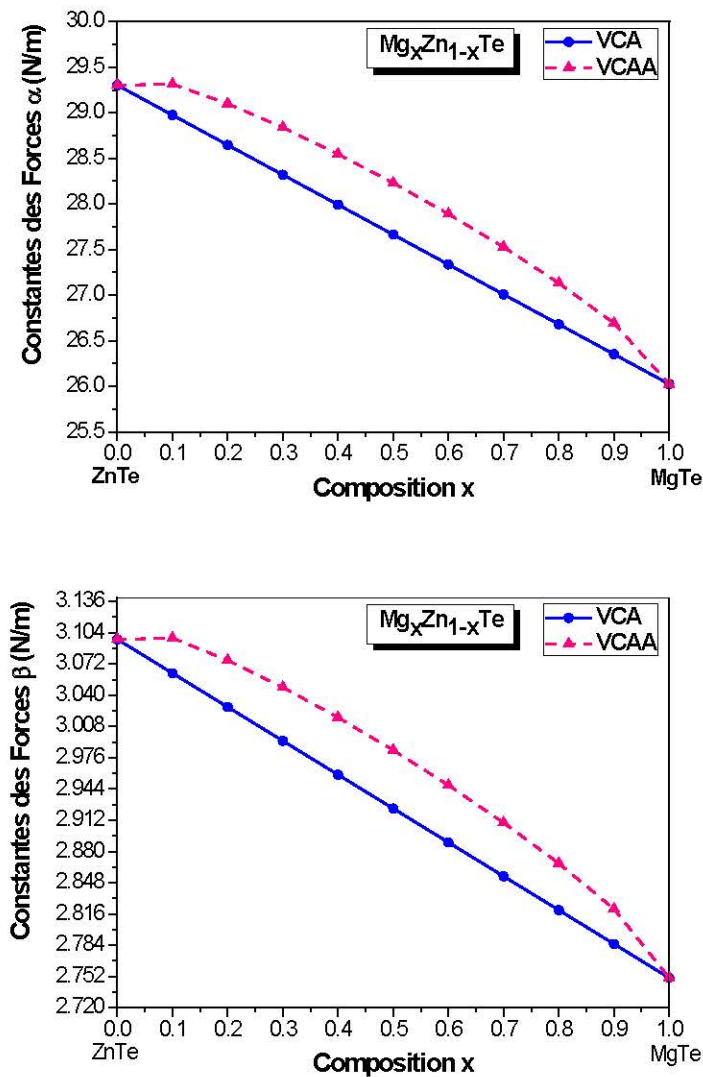


Figure III-3: Les variations des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium: sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

Les expressions analytiques de la figure III-3 sont d'écrites comme suites:

Sans désordre :

$$\alpha = 29.3031604 - 3.2792358x + 5.8275059 \times 10^{-6} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-14})$$

$$\beta = 3.0972938 - 0.3466081x - 5.8275058 \times 10^{-7} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-15})$$

Avec désordre :

$$\alpha = 29.3669373 - 1.1014258x - 2.1777424x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-16})$$

$$\beta = 3.1040352 - 0.1164204x - 0.2301818x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-17})$$

D'après ces équations dans les deux cas avec et sans désordre, on peut remarquer que l'effet du désordre affecte fortement les constantes de force α et β avec un changement de signe de paramètre de courbure de la constante de force α , et il augmente ces constantes de force dans tout l'intervalle $[0,1]$ de la concentration x de Magnésium.

La figure III-4, représente les variations des constantes de force α et β en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans désordre.

D'après cette figure, on remarque que la constante de force de recourbement β est moins élevée que celle de la constante de force d'élongation α sur tout l'intervalle allons de ($x = 0$) jusqu'à ($x = 1$), donc on constate qu'il y'a une dilatation des liaisons.

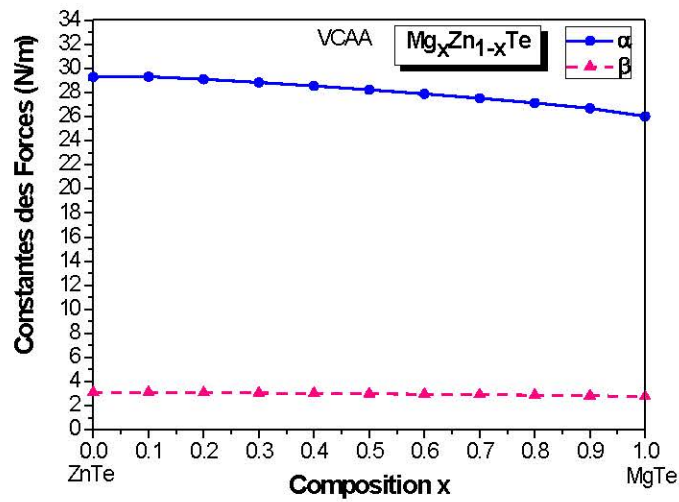
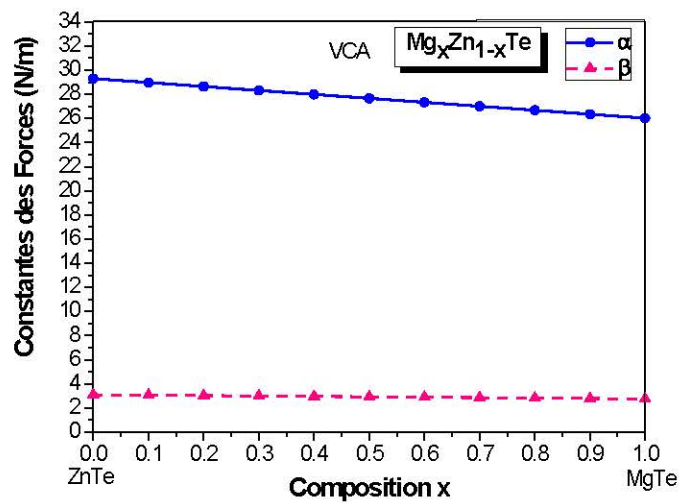


Figure III-4: La variation des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium, avec et sans désordre.

La figure III-5 représente la variation du module de compressibilité B avec et sans désordre en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$, notons que lorsqu'on varie x

de $x=0$ (ZnTe) à $x=1$ (MgTe), le module de compression diminue non linéairement de $(6.1811 \text{ à } 2.3971)10^{11} \text{ dyne/cm}^2$. Nous remarquons aussi que les valeurs du module de compressibilité pour le composé binaire $MgTe$ est plus petit que celle du composé binaire ZnTe. Comme le module de compressibilité B des matériaux cristallin donne la mesure de la rigidité, on peut en conclure que le composé ZnTe est plus rigide que celui de MgTe cela veut dire que l'addition de Magnésium rend l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ moins rigide.

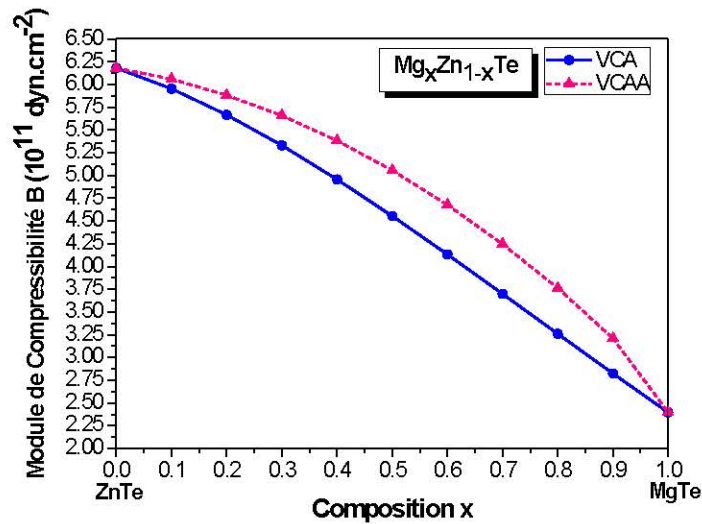


Figure III-5: La variation du module de compressibilité B avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium.

Les expressions analytiques pour le module de compressibilité B sont:

Sans désordre :

$$B = 6.2344822 - 2.8222918x - 1.0642216x^2 \quad \text{(VCA)} \quad \text{(III-18)}$$

Avec désordre :

$$B = 6.149552 - 0.6397533x - 3.0163125x^2 \quad \text{(VCAA)} \quad \text{(III-19)}$$

D'après ces équations dans les deux cas avec et sans désordre, on peut dire que l'effet du désordre augmente le paramètres de courbure d'une valeur égale à $c = 1.0642216$ sans désordre à une valeur égale à $c = 3.0163125$ avec désordre sans changement de signe, Les valeurs de B calculées pour ZnTe ($6.1811 \cdot 10^{11} \text{ dyne/cm}^2$) et MgTe ($2.3971 \cdot 10^{11} \text{ dyne/cm}^2$) sont en accord avec les valeurs expérimentales [15,27] (5.09 et 3.87) $10^{11} \text{ dyne/cm}^2$ respectivement et les valeurs théoriques [16-20,22,29]

III-4-3-Les modules de cisaillement G , de Young Y , le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A :

Les calculs des modules de cisaillement G , de Young Y , et le coefficient de Poisson ν ainsi que le facteur d'anisotropie A , sont basés sur les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} des alliages [35]. Les valeurs des modules de cisaillement G , de Young Y , le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ obtenues sont rassemblés dans le tableau III-4.

Tableau III-4: les modules de cisaillement (G), Young (Y) en (10^{11} dyne/cm²) le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie (A) de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Matériaux	G (10^{11} dyne/cm ²)		Y (10^{11} dyne/cm ²)		ν		A	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
ZnTe	2.8498	1.4685 ^(a) 2.86 ^(b) 2 ^(c)	7.4105	6.6492 ^(a)	0.30018273	0.286 ^(a)	0.70491199	0.410 ^(a)
Mg _{0,1} Zn _{0,9} Te	2.7419* 2.7941***	-	7.1311* 7.2657***	-	0.30038659* 0.30017827***	-	0.70467084* 0.70491727***	-
Mg _{0,25} Zn _{0,75} Te	2.5265* 2.6603***	1.2225 ^(a)	6.5737* 6.9189***	6.0101 ^(a)	0.30097034* 0.30038827***	0.287 ^(a)	0.70398073* 0.70466885***	0.340 ^(a)
Mg _{0,3} Zn _{0,7} Te	2.4431* 2.6040***	-	6.3582* 6.7730***	-	0.30124204* 0.30051574***	-	0.70365974* 0.70451811***	-
Mg _{0,5} Zn _{0,5} Te	2.0689* 2.3146***	1.004 ^(a)	5.3905* 6.0246***	5.3917 ^(a)	0.30276698* 0.30140885***	0.288 ^(a)	0.70186062* 0.70346273***	0.295 ^(a)
Mg _{0,7} Zn _{0,3} Te	1.6562* 1.9237***	-	4.3233* 5.0138***	-	0.30518055* 0.30318813***	-	0.69902171* 0.7013645***	-
Mg _{0,75} Zn _{0,25} Te	1.5508* 1.8101***	0.8855 ^(a)	4.0507* 4.7202***	4.9485 ^(a)	0.30596984* 0.30384842***	0.289 ^(a)	0.6980956* 0.7005873***	0.276 ^(a)
Mg _{0,9} Zn _{0,1} Te	1.2366* 1.4238***	-	3.2372* 3.7213***	-	0.30895884* 0.30678787***	-	0.69459859* 0.69713695***	-
MgTe	1.0327	0.804 ^(a) 1.03 ^(b) 3.9 ^(d)	2.709	4.5936 ^(a)	0.31164957	0.291 ^(a)	0.69146417	0.267 ^(a)

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

^(a) Réf. [19], ^(b) Réf. [20], ^(c) Réf. [22], ^(d) Réf. [25].

Dans le tableau III-4 nous avons inséré les calculs obtenus des modules de cisaillement G et de Young Y en ($dyne/cm^2$), le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie A avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec d'autres calculs disponibles.

En faisant la comparaison entre les calculs obtenus avec d'autres résultats, nous pouvons dire que nos valeurs trouvées sont d'une manière générale en accord avec d'autres travaux disponibles. Nous avons constaté qu'il y a une augmentation de coefficient de Poisson ν par contre il y a une diminution des facteurs d'anisotropie A , ainsi que le module de cisaillement G et de Young Y avec

l'augmentation de la fraction molaire x de Magnésium. Nous avons remarqué aussi que l'effet du désordre fait augmenter les valeurs des modules de cisaillement G , de Young Y et le facteur d'anisotropie A , par contre il fait diminuer les valeurs de coefficient de Poisson ν .

Les variations des modules de cisaillement G et de Young Y en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, sont représentés dans les figures III-6 et III-7.

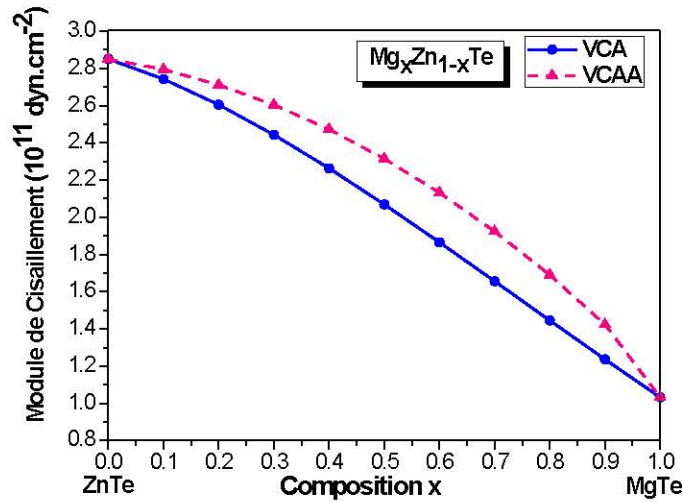


Figure III-6: La variation du module de cisaillement (G) en ($\text{dyne} / \text{cm}^2$), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium.

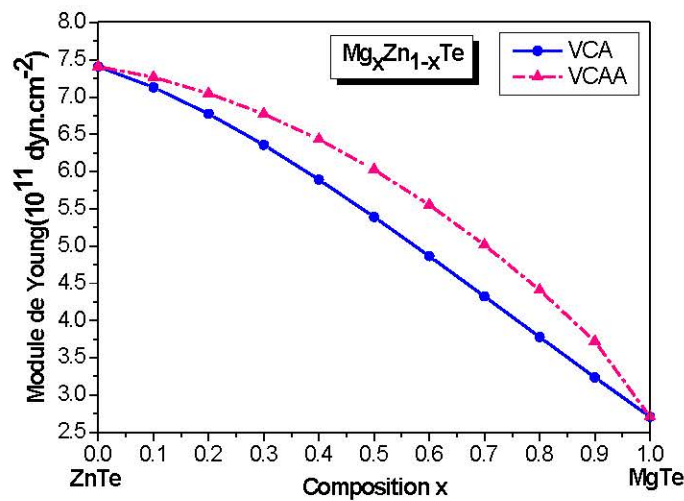


Figure III-7 : La variation du module de Young (Y) en ($\text{dyne} / \text{cm}^2$), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium.

A partir des figures III-6 et III-7 qui représentent les variations des modules de cisaillement G et de Young Y respectivement, avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium, nous remarquons qu'il ya une diminution non linéaire de ces modules avec l'augmentation de la concentration x sur tout l'intervalle $[0, 1]$ en allant du composé

$ZnTe$ lorsque ($x=0$) au composé $MgTe$ où ($x=1$), et nous pouvons dire aussi que l'effet de désordre fait augmenter les modules de cisaillement G et de Young Y .

Les variations du coefficient de Poisson ν et du facteur d'anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium sont représentées dans les figures III-8 et III-9

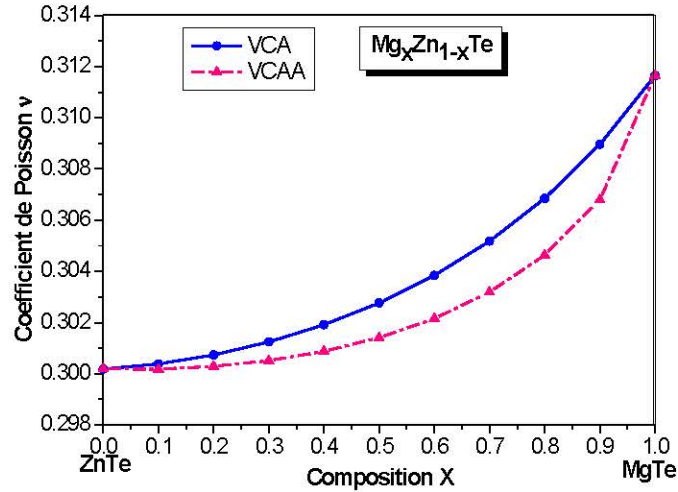


Figure III-8 : La variation de coefficient de Poisson ν avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium.

A partir de la figure III-8, nous remarquons qu'il y a une augmentation non linéaire dans les valeurs du coefficient de poisson avec l'augmentation de la concentration x , et nous avons remarqué aussi que l'effet de désordre fait diminuer le coefficient de Poisson ν .

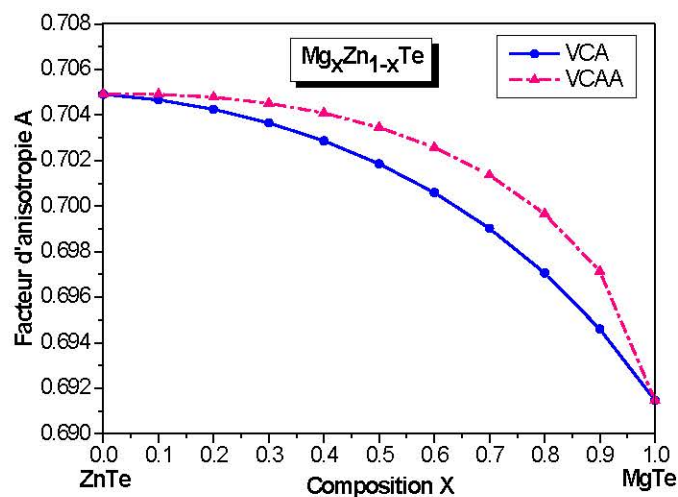


Figure III-9 : La variation du facteur d'anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, en fonction de la concentration x de Magnésium.

La figure III-9 montre qu'il y'a une diminution non linéaire du facteur d'anisotropie avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium, et que l'effet du désordre augmente le facteur d'anisotropie A .

Les expressions analytiques des modules de cisaillement G et de Young Y , aussi le coefficient de poisson ν et le facteur d'anisotropie A sont d'écrites comme suites:

Avec désordre :

$$G = 2.876601 - 1.3580554x - 0.5106359x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-20})$$

$$Y = 7.4793866 - 3.510717x - 1.3232435x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-21})$$

$$\nu = 0.3004166 - 0.0016949x + 0.0125834x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-22})$$

$$A = 0.7046429 + 0.001891x - 0.0146781x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-23})$$

Sans désordre :

$$G = 2.8353188 - 0.288543x - 1.4687353x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-24})$$

$$Y = 7.3727079 - 0.7508985x - 3.7948714x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-25})$$

$$\nu = 0.3008308 - 0.008165x + 0.0175672x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-26})$$

$$A = 0.704157 + 0.0095145x - 0.0205636x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-27})$$

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

Le facteur de l'ionicté f_i est lié à la répartition de la charge entre les constituants et il est définit par Pauling comme une différence d'électronégativité entre les deux constituants d'un composé binaire [36]. Pour calculer le facteur de l'ionicté, nous avons utilisé la relation suivante [37]:

$$f_i = \frac{0.87891 d^{0.24}}{(Z_1 Z_2)^{0.4}} \quad (\text{III-28})$$

Le tableau III-5 illustre les valeurs calculées du facteur de l'ionicté f_i et du paramètre de Kleinman ξ de l'alliage $Mg_x Zn_{1-x} Te$, on note que nos résultats pour les composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$ sont d'une manière générale en accord avec d'autres résultats disponibles.

Tableau III-5 : Facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Matériaux	f_i		ξ	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres
ZnTe	0.637415948	0.361 ^(a) 0.609 ^(b) 0.678 ^(f)	0.56396261	0.478 ^(a) 0.596 ^(d) 0.701 ^(e)
Mg _{0,1} Zn _{0,9} Te	0.638024013 ^{**} 0.637394647 ^{***}	-	0.56432672 ^{**} 0.56395464 ^{***}	-
Mg _{0,25} Zn _{0,75} Te	0.638936111 ^{**} 0.638027699 ^{***}	-	0.56537007 ^{**} 0.56432973 ^{***}	0.718 ^(e)
Mg _{0,3} Zn _{0,7} Te	0.639240143 ^{**} 0.638278771 ^{***}	-	0.56585606 ^{**} 0.56455745 ^{***}	-
Mg _{0,5} Zn _{0,5} Te	0.640456274 ^{**} 0.63940733 ^{***}	-	0.56858823 ^{**} 0.56615456 ^{***}	0.739 ^(e)
Mg _{0,7} Zn _{0,3} Te	0.641672404 ^{**} 0.640711031 ^{***}	-	0.57292805 ^{**} 0.56934412 ^{***}	-
Mg _{0,75} Zn _{0,25} Te	0.641976436 ^{**} 0.641068024 ^{***}	-	0.57435143 ^{**} 0.5705304 ^{***}	0.747 ^(e)
Mg _{0,9} Zn _{0,1} Te	0.642888534 ^{**} 0.642259168 ^{***}	-	0.57976033 ^{**} 0.57582878 ^{***}	-
MgTe	0.643496599	0.554 ^(b) 0.525 ^(c) 0.685 ^(f)	0.58465489	0.753 ^(e)

^{**}Nos calculs sans désordre.

^{***}Nos calculs avec désordre.

^(a) Réf. [16], ^(b) Réf. [38], ^(c) Réf. [39], ^(d) Réf. [17], ^(e) Réf. [19], ^(f) Réf. [40].

Les figures III-10 et III-11 représentent les variations du facteur d'ionicté et du paramètre de Kleinman ξ successivement avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de la concentration x de Magnésium.

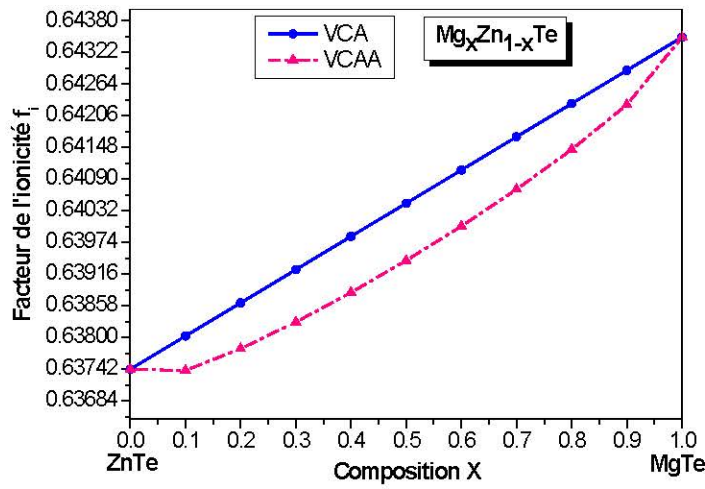


Figure III-10: La variation de facteur d'ionicté f_i avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de concentration x de Magnésium.

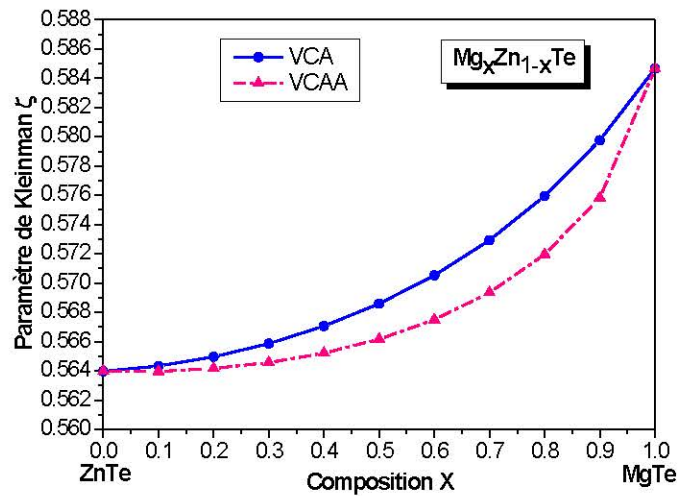


Figure III-11: La variation du facteur de Kleinman ξ avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ en fonction de concentration x de Magnésium.

A partir des figures (III-10, III-11), on peut voir, qu'il y a une augmentation non linéaire du facteur d'ionicté f_i et non linéaire du paramètre de Kleinman ξ avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium, et on constate aussi que l'effet du désordre est très clair.

Références :

- [1] K.S.A. Butcher et T.L. Tansley, *Superlattices and Microstructures* **38** (2005) 1.
- [2] V. Tomashyk, P. Feychuk, L. Shcherbak, *Ternary Alloys Based on II–VI Semiconductor Compounds*, second ed, CRC Press, New York, 2014.
- [3] M.C. Tamargo, *II–VI semiconductors materials and their applications optoelectronic properties of semiconductors and superlattices*, Taylor and Francis, vol **12** (2002).
- [4] I. Hernandez-Calderon, in: M.C.Tamargo (Ed.), *II-VI Semiconductor Materials and their Applications*, Taylor and Francis, New York(2002) 113.
- [5] F. Mezrag, mémoire de magister, université de M'Sila (Algérie) 2003.
- [6] N.Richard, rapport CEA-R-6603 actinides et terres rares sous pression: approche pseudopotentiel CEA/DAM. Direction Ile de France, 2002.
- [7] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, université de Constantine (Algérie) 2006.
- [8] A. Kan Garlu, *Phys. Rev.* **B38** (1988) 9790.
- [9] A. Mujica, A. Munoz, S. Radescu, R.J. Needs, *Phys. Stat.Sol. B* **211** (1999) 345.
- [10] T. Kobayasi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci., Tohoku. Univ.* **2** (1993) 7.
- [11] J. M. Baranowski, *J.Phys. C* **17** (1984) 6287.
- [12] C. Kittel, *physique de l'état solide*, Dunod, 7^{ème} édition, 1998.
- [13] P. Herve and L. K. J. Vandamme, *J. Appl. Phys.* **77** (1995) 5476.
- [14] J. R. Meyer Vurgaftman and L. R. Ram-Mohan, *J.Appl. Phys*, Vol. **89** (2001) 11.
- [15] O. Madelung and Landolt-Börnstein (eds), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, New Series, Group III, Vol **17**, Pts a and b (Springer, Berlin, 1982) ; Group III, Vol. **22**, Pt a (Springer, Berlin, 1987).
- [16] A. E. Merad , H. Aourag, B. Khelifa, C. Mathieu and G. Merad, *Superlattices and Microstructures*, Vol. **30** (2001) 5
- [17] J. San-Guo Shen, *Phys. Condens. Matter* **6** (1994) 8733.
- [18] F. Drief, A. Tadjer, D. Mesri, H. Aourag, *Catalysis Today* **89** (2004) 343.
- [19] U. Sarkar, B. Debnath, M. Debbarma, D. Ghosh, S. Chanda, R. Bhattacharjee, S. Chattopadhyaya, *Mater. Chem. Phys.* **230** (2019) 54.
- [20] S. Mnasri, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, N. Bouarissa and M. Said, *Semicond. Sci. Technol.* **24** (2009) 095008 (8pp).
- [21] J-G. Shen, *J. Phys: Condens. Matter* **6** (1994) 8733.
- [22] R. Khenata, A. Bouhemadou, M. Sahnoun, A. H. Reshak, H. Baltache and M. Rabah, *Comput. Mater. Sci.* **38** (2006) 29.
- [23] B. H. Lee, *J. Appl. Phys.* **41** (1970) 2988.
- [24] P. Bhardwaj, S. Singh and N. K. Gaur, *Turk. J. Phys.* **32** (2008) 85.

- [25] D. Varshney, N. Kaurav, U. Sharma and R. K. Singh, *J. Phys. Chem. Solids* **69** (2008) 60.
- [26] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, World Scientific, Singapore, vol. **2** (1999).
- [27] B. Freytag, *J. Phys. Condens. Matter* **6** (1994) 9875.
- [28] Y. Cai and M. F. Thorpe, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 15872.
- [29] Y. Al-Douri, *Res. Lett. Mater. Sci.* **1** (2007) 57143.
- [30] M. Rabah, D. Rached, N. Benkhetou, R. Khenata, H. Baltache, B. Soudini, M. Ameri ad H. Abid, *Comput. Mater. Sci.* **37** (2006) 603.
- [31] V. Kumar, *J. Phys. Chem Solids* **61** (2000) 91.
- [32] R. R. Reddy, Y. Nazeer Ahammed, P. Abdul Azeem, K. Rama Gopal, B. Sasikala Devi, T. V. R. Rao, and S. H. Becher *Indian J. Phys. A* **77** (2003) 237.
- [33] H. Neumann *Cryst. Res. Technol.* **20** (1985) 773.
P. K. Keating *Phys. Rev.* **145** (1966) 637.
H. Neumann *Helv. Phys. Acta* **58** (1985) 337.
H. Neumann *Cryst. Res. Technol.* **24** (1989) 325.
- [34] D. S. Yadav and Chakresh Kumar, *International Journal of Physical Sciences* **8** (2013) 1174.
- [35] G. Gokoglu, *J. Alloy. Comp.* **478** (2009) 653.
- [36] M. W. Barsoum, T. El-Raghi, W.D. poter, H. Wang, S. chakra borty, *J. Appl. Phys.* **88** (2000) 6313.
- [37] A. S. Verma , B. K. Sarkar, V. K. Jindal, *Physica B* **405** (2010) 1737.
- [38] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in semiconductors*, Academic Press, New York, 1973.
- [39] A. Garcia and M. L. Cohen, *Phys. Rev B* **47** (1993) 4221.
- [40] V. Kumar, *J. Phys. Chem. Solids* **48** (1987) 827.



*Conclusion
générale*

Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés élastiques des composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$ et leurs alliages ternaires semiconducteurs $Mg_xZn_{1-x}Te$.

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

Nous avons calculé les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}), le module de compressibilité B , le module de cisaillement G , le module de Young Y , le coefficient de poisson ν , le facteur d'anisotropie A , l'ionicté f_i , le paramètre de Kleinman ξ et les constantes de force α et β pour les composés binaires et leurs alliages ternaires.

La dépendance de la concentration x de Magnésium, sur les propriétés élastiques des alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$ et ces composés binaires $ZnTe$, $MgTe$ a été étudiée sur toute la gamme de la composition [0-1].

Les résultats acquis, nous ont permis de tirer les conclusions suivantes :

- ✓ Les valeurs des constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}), les modules de cisaillement G , de Young Y , de compressibilité B et le facteur d'anisotropie A diminuent non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium avec et sans désordre.
- ✓ qualitativement les constantes élastiques montrent un comportement similaire mais sur le plan quantitatif on constate que la constante C_{11} est plus élevée que les constantes C_{12} et C_{44} qui sont presque identique.
- ✓ le coefficient de Poisson ν , l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ augmentent non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium avec et sans désordre.
- ✓ Les constantes de force α et β diminuent presque linéairement en fonction de la concentration x on négligeant l'effet de désordre, et elle est non linéaire lorsqu'on prend en considération cet effet. La constante de force d'élongation α est très élevée que celle de la constante de force de recourbement β sur tout l'intervalle allons de ($x=0$) jusqu'à ($x=1$).
- ✓ l'effet du désordre affecte fortement toutes les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} sans changement des signes des paramètres de courbure, et il augmente ces constantes élastiques dans tout l'intervalle [0,1] de la concentration x de Magnésium.

- ✓ l'effet de désordre fait augmenter aussi le module de compressibilité, les valeurs des modules de cisaillement G , de Young Y et le facteur d'anisotropie A , par contre il fait diminuer les valeurs de coefficient de Poisson ν , le facteur d'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ .

En générale, nos résultats pour les composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$ sont en accord raisonnable avec les ressources disponibles des données expérimentales et théoriques. Pour les quantités physiques des alliages ternaires semiconducteurs $Mg_xZn_{1-x}Te$ d'intérêt lorsque les données ne sont pas disponibles dans la littérature, nos résultats sont des prévisions et peuvent servir de références pour les futurs travaux.