



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université de Larbi Tébessi – Tébessa



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

Département des Sciences de la matière

**MEMOIRE DE MASTER**

Domaine: Sciences de la matière

Filière: Physique

Option: Physique des matériaux

*Thème:*

**Etude de l'effet de l'Aluminium sur les propriétés  
mécaniques de l'alliage ternaire (Al, Ga) As.**

*Présenté par:*

*Nadjet Bouras*

*Devant le jury:*

Toufik Ziar	Professeur	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Amel Kaibi	MCB	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le dimanche 05 juin 2022 à 9 :30



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université Larbi Tébessa –Tébessa  
Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie  
Département des Sciences de la matière  
Filière de Physique  
Année universitaire 2021/2022



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

Je, soussigné(e)

Nom, prénom: ..... **Bouras Nadjet**.....

N° de carte d'étudiant: ..... **171734022010**.....

Régulièrement inscrit (e) en **Master au Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2021/2022**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: ..... **Physique des matériaux**.....

Intitulé du mémoire: ..... **Etude de l'effet de l'Aluminium sur les propriétés  
mécaniques de l'alliage ternaire (Al, Ga)** .....

*Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni copié 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:*

*L'étudiant (e) sera convoqué (e) devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:*

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

2022 جوان 21



Fait à Tébessa le: 21 juin 2022...

Signature de l'étudiant (e):



ملخص

## المخلص :

في هذا العمل درسنا الخصائص المرونية لأنصاف النواقل III-V ذات البنية زنك-بلاند للمركبات الثنائية GaAs و AlAs و سبائكها الثلاثية  $Al_xGa_{1-x}As$ ، مستخدمين في ذلك طريقة شبه الكمون التجريبية (E.P.M) المرتبطة بتقريب البلورة الإقتراضية (VCA) والذي يتضمن تأثير العشوائية ككمون فعال مقرون بنموذج المدارات المرتبطة ل-Harisson.

حسبنا الثوابت المرونية  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  ومعامل الإنطغاط B، معامل القص G، معامل يونغ Y، معامل بواسون  $\nu$ ، معامل التباين المناحي A و الأيونية  $f_i$  و معامل  $\xi$  Kleinmen، بالإضافة إلى ثوابت قوة الإستطالة  $\alpha$  و الإنحاء  $\beta$ .

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

**الكلمات المفتاحية :** أنصاف النواقل III-V، السبيكة الثلاثية  $Al_xGa_{1-x}As$ ، الخواص المرونية طريقة شبه الكمون التجريبية، تقريب البلورة الإقتراضية، نموذج المدارات المرتبطة، فعل العشوائية.

A dark blue rectangular graphic with rounded corners and a light blue border, designed to look like a scroll. It features decorative scroll-like elements at the top-left and bottom-left corners. The word "Résumé" is centered within the graphic in a white, italicized serif font.

# *Résumé*

**Résumé :**

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés élastiques des semiconducteurs III-V, cristallisés dans la structure zinc-blende des composés binaires GaAs, AlAs et leurs alliages. Nos calculs sont basés sur l'utilisation de la méthode de pseudopotentiel empirique (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA), qui introduit l'effet du désordre comme un potentiel effectif, et combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM).

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

La dépendance de la concentration  $x$  de l'Aluminium sur les propriétés élastiques de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  et ces composés binaires  $GaAs, AlAs$  a été étudiée 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 III-V, alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ , les propriétés élastiques, méthode du pseudopotentiel empirique, approximation du cristal virtuel, modèle des orbitales liées, effet du désordre.*

A dark blue rectangular graphic with rounded corners and a light blue border, designed to look like a scroll. It features decorative scroll-like details at the top-left and bottom-left corners. The word "Abstract" is centered within the graphic in a white, italicized serif font.

*Abstract*

**Abstract:**

In this work we have studied the elastic properties of semiconductors III-V crystallizing in zinc-blend structure of binary compounds GaAs and AlAs and ternary alloy  $Al_xGa_{1-x}As$ . Using empirical pseudopotential method (EPM) coupled with the Virtual Crystal Approximation (VCA), which includes the disorder effect as an effective potential, and combined with the bond-orbital model of Harrison (BOM).

We calculated the elastic constants  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{33}$  and  $C_{44}$  and the bulk modulus  $B$ , the shear modulus  $G$  and Young's modulus  $Y$ , Poisson's ratio  $\nu$ , the anisotropy factors  $A$  and ionicity  $f_i$ , the Kleinman's parameter  $\xi$ , as well as the force constants of elongation  $\alpha$  and bending  $\beta$ .

The dependence of the concentration  $x$  of Aluminium on the elastic properties of the ternary alloy and these binary compounds has been studied over the entire range of composition [0-1].

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

*Key words:* III-V semiconductors, alloy  $Al_xGa_{1-x}As$ , elastic properties, empirical pseudopotential method, virtual crystal approximation, bond-orbital model, disorder effect.

# Remerciements

*Avant tout ; Nous devons remercier Dieu le tout puissant qui m'a donnée la force, le courage de mener à terme ce travail.*

*Je remercie le bon dieu de m'avoir montré le chemin de la science et m'avoir donner le courage de le suivre.*

*Je tiens particulièrement à exprimer ma gratitude à mon encadreur **Dr. Abderrachid Béchiri**, Professeur à l'université de Tébessa, pour m'avoir proposé ce thème de recherche et pour m'avoir dirigé ce mémoire et pour son apport substantiel dans la réalisation de ce modeste travail ainsi que pour l'ensemble de ses consultations, tout le long de ce travail, qui ont inspiré et nourri mon savoir.*

*Je remercie Dr. **Toufik Ziar** Professeur à l'université de Tébessa pour avoir accepté de présider mon jury.*

*Je remercie sincèrement Dr. **Amel Kaïbi**, 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, qui ont contribués à ma formation et à l'enrichissement de mon enseignement.*

*Enfin que tous ceux qui m'ont aidé de loin ou de près puissent trouver ici le témoignage de ma profonde reconnaissance.*





## *Dédicace*

*Je dédie le présent mémoire :*

*A tous ceux qui font de moi une personne meilleure chaque jour*

*Mes parents*

*A mes Sœur: Amel et warda et oulaya*

*A mes Frères : Akrem et sadjed*

*A ma proche amie : Habiba*

*A toute ma famille et à mes amis mes camarades de promo*

*A tous ceux qui me connaissent et m'apprécient, je leurs dédie ce modeste travail*

**Bouras Nadjet**



A dark blue rectangular graphic with rounded corners and a light blue border, designed to look like a scroll. It features decorative scroll-like elements at the top-left and bottom-left corners. The word "Sommaire" is centered within the graphic in a white, italicized serif font.

# *Sommaire*

## Sommaire

المُلخَص

Résumé

Abstract

Remerciements

Dédicace

Sommaire

Liste des tableaux	<i>i</i>
Liste des figures	<i>ii</i>
Liste des symboles	<i>iv</i>
Introduction générale .....	1
Références .....	3

## Chapitre I

### La méthode du pseudopotentiel

I-1-Introduction .....	4
I-2-La méthode du pseudopotentiels (P.M) .....	4
I-3-Le principe de cette méthode .....	5
I-4-Le formalisme mathématique .....	5
I-5-Les caractéristiques du pseudopotentiel .....	6
I-6- Les modèles de pseudopotentiel .....	7
I-6-1-Le modèle local .....	7
I-6-1-a-Le modèle de Heine et Abarenkov .....	8
I-6-1-b-Le modèle d' Ashcroft .....	8
I-6-2-Le modèle non local .....	8
I-6-2-a- La fonction de Heine Abarenkov .....	8
I-6-2-b- La fonction de Gauss .....	9
I-6-2-c-La fonction d'Ashcroft .....	9

I-7-La méthode empirique de pseudopotentiel [E.P.M] .....	10
I-8- La procédure de calcul de la méthode E.P.M .....	11
Références .....	13

## **Chapitre II**

### **Les propriétés mécaniques**

II-1-Introduction .....	15
II-2- Propriétés élastiques .....	15
II-3- Tenseurs .....	16
II-3-a - Tenseur des contraintes .....	16
II-3-b - Tenseur de déformation .....	17
II-3-c - Tenseur de dilatation .....	21
II-4- Relation contrainte-déformation .....	23
II-4-a- La loi de Hooke généralisée .....	23
II-5-Densité d'énergie élastique (U) .....	24
II-6- Les méthodes de calcul des propriétés élastiques .....	26
II-6-1- Le calcul des constants élastiques .....	26
I-6-2-Le module de compressibilité (B) .....	28
II-6-3-Le Module de cisaillement (G) .....	28
II-6-4-Le Module de Young (Y) .....	28
II-6-5- Le coefficient de poisson .....	29
II-6-6- Le facteur d'anisotropie A .....	29
II-6-7- Le facteur d'ionicité $f_i$ .....	29
Références .....	29

## **Chapitre III**

### **Résultat et discussion**

III-1-Introduction .....	31
III-2-Les propriétés élastiques .....	31

III-3-Les propriétés élastiques de l'alliage semiconducteur $Al_xGa_{1-x}As$ .....	32
III-3-1- Les constantes élastiques et le module de compressibilité .....	32
III-3-2-Les constantes des forces .....	38
III-3-3-Les module de cisaillement G, de Young Y, coefficient de Poisson $\nu$ et le facteur d'anisotropie A .....	41
III-3-4-Le facteur de l'ionicté $f_i$ et le paramètre de Kleinman $\xi$ .....	44
Références .....	48
Conclusion générale .....	50



*Liste des tableaux*

## Liste des tableaux

<b>Tableau</b>	<b>Titre</b>	<b>page</b>
Tableau III-1	<i>Les facteurs de forme symétriques (<math>V_S</math>) et antisymétriques (<math>V_A</math>) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs GaAs et AlAs dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau <math>a</math> en (<math>\text{u. a}</math>) et en (<math>^\circ</math>).</i>	32
Tableau III-2	<i>Les constantes élastiques <math>C_{11}</math>, <math>C_{12}</math> et <math>C_{44}</math> en (<math>10^{11}</math> dyne/cm<math>^2</math>) de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math>.</i>	33
Tableau III-3	<i>Le module de compressibilité <math>B</math> en (<math>10^{11}</math> dyne/cm<math>^2</math>) et les constantes de force d'élongation <math>\alpha</math> et de recourbement <math>\beta</math> en (N/m) de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math>.</i>	37
Tableau III-4	<i>les modules de cisaillement (<math>G</math>), Young (<math>Y</math>) en (<math>10^{11}</math> dyne/cm<math>^2</math>) le coefficient de Poisson <math>\nu</math> et le facteur d'isotropie (<math>A</math>) de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math>.</i>	41
Tableau III-5	<i>Facteur de l'ionicté <math>f_i</math> et le paramètre de Kleinman <math>\xi</math> de l'alliage <math>Al_xGa_{1-x}As</math>.</i>	47



*Liste des figures*

## Liste des figures

<b>Figure</b>	<b>Titre</b>	<b>Page</b>
Figure I-1	<i>Fonction de Heine-Abarenkov.</i>	9
Figure I-2	<i>Fonction de Gauss.</i>	9
Figure I-3	<i>Modèle d'Ashcroft.</i>	10
Figure I-4	<i>L'organigramme de la méthode EPM.</i>	12
Figure II-1	<i>Tenseur <math>T(M)</math> liant deux grandeurs physiques (<math>u</math> et <math>v</math>) dans un repère donné.</i>	16
Figure II-2	<i>Une force s'exerce sur l'unité de surface du solide.</i>	16
Figure II-3	<i>Les composantes du tenseur de contraintes.</i>	17
Figure II-4	<i>Axes des coordonnées avant et après la déformation.</i>	18
Figure II-5	<i>L'élément tensoriel de déformation.</i>	21
Figure II-6	<i>Le changement du volume de l'échantillon sous l'effet d'une contrainte.</i>	22
Figure II-7	<i>rotation de <math>2\pi/3</math> autour de l'axe numéroté 3 change <math>x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x</math></i>	25
Figure III-1	<i>Les variations des constantes élastiques <math>C_{11}, C_{12}, C_{44}</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium: sans désordre (—) et avec désordre (- - - - -) de l'alliage ternaire.</i>	35
Figure III-2	<i>La variation du module de compressibilité <math>B</math> avec et sans désordre de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	36
Figure III-3	<i>Les variations des constantes élastiques <math>C_{11}, C_{12}, C_{44}</math> et <math>B</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math>, avec et sans désordre.</i>	38
Figure III-4	<i>La variation des constantes de force <math>\alpha</math> et <math>\beta</math> de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium, avec et sans désordre.</i>	39
Figure III-5	<i>Les variations des constantes de force <math>\alpha</math> et <math>\beta</math> de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium: sans désordre (—) et avec désordre (- - - - -) de l'alliage ternaire.</i>	40
Figure III-6	<i>La variation du module de cisaillement (<math>G</math>) en (<math>\text{dyne}/\text{cm}^2</math>), avec et sans désordre de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	42
Figure III-7	<i>La variation du module de Young (<math>Y</math>) en (<math>\text{dyne}/\text{cm}^2</math>), avec et sans désordre de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	43
Figure III-8	<i>La variation de coefficient de Poisson <math>\nu</math> avec et sans désordre de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	43
Figure III-9	<i>La variation du facteur d'anisotropie <math>A</math> avec et sans désordre de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math>, en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	44

Figure III-10	<i>La variation de facteur d'ionicté <math>f_i</math> avec et sans désordre de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	46
Figure III-11	<i>La variation du facteur de Kleinman <math>\xi</math> avec et sans désordre de l'alliage ternaire <math>Al_xGa_{1-x}As</math> en fonction de concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	46



## *Liste des symboles*

Liste des symboles

Symboles	
$\psi$	La fonction d'onde
$\phi$	La fonction d'onde plane
$\phi_c$	Les états atomiques qui occupent le cœur
H	Le Hamiltonien
E	L'énergie propre
$V_R$	Le potentiel répulsif
$V_C$	Le potentiel attractif
$V_P$	Le pseudo potentiel
$\hbar$	La constante réduite de Planck
M	La masse de l'électron
$E_V$	L'énergie de valence
$E_C$	L'énergie du cœur
Z	Le nombre d'électrons
$r_C$	Le rayon du cœur
A	Le potentiel constant dans la région du cœur
$V_L(r)$	Le potentiel local
$V_{NL}$	Le potentiel non local
$A_I(E)$	L'énergie des états profonds
$f_I(r)$	La fonction qui représente l'effet de l'état du cœur
$P_I$	L'opérateur de projection de la 1 <sup>ème</sup> composante du moment angulaire
$\vec{R}$	Le vecteur du réseau direct
$\vec{\tau}$	Le vecteur de translation du réseau direct
$V_a(G)$	Le facteur de forme
$S(G)$	Le facteur de structure
$N_a$	Le nombre d'atomes de base
$\sigma_{ij}$	Le tenseur de la contrainte
F	La force
S	La surface
$\vec{r}$	Le vecteur de position
$\vec{u}$	le vecteur du déplacement
$\epsilon_{ij}$	Les constantes de proportionnalité
$[\epsilon_{ij}]$	Le tenseur des petits déplacements
$\vec{\Delta u}$	Le vecteur des petits déplacements
$e_{ij}$	Le tenseur symétrique
$\omega_{ji}$	Le tenseur antisymétrique
V	Le volume de l'échantillon avant la dilatation
V'	le nouvel volume après la dilatation

$\delta$	La dilatation
$e^{(1)}, e^{(2)}, e^{(3)}$	Les coefficients de déformation principaux
$(C_{ijkl})$	Les modules élastiques
$C_{11}, C_{12}, C_{44}$	Les constantes élastiques
U	La densité d'énergie élastique
$C_{\alpha\beta}$	La matrice des constantes élastiques du 2 <sup>ème</sup> ordre
$C_{\alpha\beta\gamma}$	La matrice des constantes élastiques du 3 <sup>ème</sup> ordre
$\alpha_p$	La polarité
$V_a(3)$	Les facteurs de formes antisymétriques à G(111)
$V_s(3)$	Les facteurs de formes symétriques à G(111)
d	La distance entre les plus proches voisins
a	Le paramètre du réseau
B	Le module de compressibilité
$\alpha$	La constante de force d'élongation
$\beta$	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
$\nu$	Le coefficient de Poisson
A	Le facteur d'anisotropie
$f_i$	Le facteur d'ionicité
$\xi$	Le paramètre de Kleinman



*Introduction générale*

## **Introduction Générale**

La physique des matériaux joue un rôle très important à cause de leurs utilisations technologiques dans des dispositifs divers. Parmi ceux-ci, les semiconducteurs qui sont des matériaux clés des techniques actuelles, vu la richesse de leur comportement vis-à-vis des sollicitations auxquelles ils sont soumis [1].

Les semi-conducteurs ont une importance considérable en technologie. Ils forment la base de la plupart des dispositifs électroniques et optoélectroniques modernes pour le traitement de l'information et de la communication. Leur importance est née avec la découverte en 1948, du transistor [2]. Les propriétés physiques (électroniques, structurales, ...) des systèmes complexes ont attiré l'intérêt considérable pour la physique fondamentale et appliquée ; alors qu'une grande quantité de travail a été concentrée sur la compréhension théorique d'une variété de semi-conducteurs composés et de leurs propriétés relatives.

Les semi-conducteurs binaires de la famille III-V qui font apparaître des éléments des colonnes III et V du tableau périodique, sont récemment intensivement étudiés et ils sont devenu le sujet de plusieurs recherches expérimentales et théoriques, soit à des conditions ambiantes ou à haute pression, en raison qu'ils sont largement utilisés pour la réalisation des dispositifs électroniques et optoélectroniques. Les cristaux III-V ont un caractère moins ionique que ceux de type I-VII et II-VI. Ils adoptent presque tous la structure zinc-blende caractéristique des cristaux covalents. La plupart des semi-conducteurs se comportent comme des isolants ; autrement dit, leurs bandes interdites sont relativement petites. Les composés III-V sont donc de bons exemples de substances qui sont partiellement ioniques et partiellement covalentes [3].

L'arséniure d'aluminium et de gallium est un semiconducteur de formule général  $Al_xGa_{1-x}As$  où la valeur de  $x$  varie entre 0 et 1, le composé est donc un mélange aléatoire de GaAs et d'arséniure d'aluminium,  $AlAs$ .

L'arséniure de gallium est un composé de gallium et est généralement appelé composé (III-V) car le gallium et l'arsenic appartiennent respectivement au group III et au group V du tableau périodique. L'arséniure de gallium est connu pour être l'un des semiconducteurs vitaux qui est largement utilisé dans la fabrication de dispositifs tels que les diodes émettrices infrarouges, et ce composé a des propriétés électroniques distinctes par rapport au silicium,

car il a une vitesse d'électron saturée plus élevée et une mobilité électronique plus élevée, qui lui permet de fonctionner à des fréquences microondes, et est utilisé dans diodes laser et les cellules photovoltaïques. Le gallium a trois électrons dans sa coque externe, tandis que l'arsenic manque de trois électrons, de sorte que l'arséniure de gallium peut être formé comme isolant en transférant trois électrons du gallium à l'arsenic, mais cela ne se produit pas.

GaAs peut être utilisé pour divers processus de fabrication de dispositifs comme la fabrication de circuits intégrés microondes monolithiques. L'utilisation principale de l'arséniure de gallium (GaAs) a été trouvée dans : les ordinateurs et les cellules photovoltaïques, en plus des composants optoélectroniques, et il est utilisé dans la fabrication de diodes électroluminescentes (DEL), que l'on trouve dans les systèmes de communication et de contrôle optiques.

L'aluminium AlAs est l'un des semiconducteurs électroniques et optoélectroniques les plus importants. Ce matériau présente les excellentes propriétés physiques qui le rendent attrayant pour l'application de dispositifs, en raison de son utilisation fréquente dans les hétérostructures basées sur GaAs [4-6].

La structure de ce mémoire est comme suite :

Après l'introduction générale, le premier chapitre est consacré à présenter la méthode utilisée dans nos calculs qui est la méthode du pseudopotentiel. Le deuxième chapitre est consacré à une petite rappelle sur les propriétés mécaniques des semiconducteurs dans la structure zinc blende, et le troisième chapitre présente les résultats de nos calculs et leur interprétation. Le mémoire est achevé par une conclusion générale.

**Références**

- [1] E. Fermi, *Nuovo Cimento* **11**, 157 (1934).
- [2] S. Daoud, thèse de doctorat en sciences, Université Ferhat Abbas-Sétif (Algérie) 2013.
- [3] M. B. Kanoun, thèse de doctorat, Université Abou-Baker Belkaid, Tlemcen (Algérie) 2004.
- [4] J. Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures*, Cambridge University Press, New York, 2003.
- [5] F. Annane, H. Meradji, S. Ghemid, F. El Haj Hassan, *Comput. Mater. Sci.* **50**, 274 (2010).
- [6] B. Amrani, *Superlatt. Microstruct.* **40**, 65 (2006).

# *Chapitre I*

## **La méthode du pseudopotentiel**

## Chapitre I

### La méthode du pseudopotentiel

#### I-1- Introduction :

La technique du pseudopotentiel, introduite pour la première fois par Fermi (1934) s'est avérée très efficace dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides. Hellman [1] a proposé par suite une approximation du pseudopotentiel utilisé dans les métaux alcalins. Plusieurs autres suggestions [2-4] sont apparues dans la littérature des états solides mais c'est à partir des années cinquante que la théorie de la matière condensée a connu une évolution rapide. Le pseudopotentiel a été utilisé pour première fois en 1958 pour le calcul de la relation de dispersion  $E(k)$  et a montré ses capacités pour la prédiction de plusieurs propriétés physiques [5-8].

Une variante de cette méthode appelée, méthode empirique du pseudopotentiel, utilise les données expérimentales telles que le spectre de réflexion ou encore le spectre de la partie imaginaire du constant diélectrique. Deux variantes de cette méthode ont pris naissance :

1. la première, appelée méthode du pseudo-potentiel local, qui ne tient pas compte de l'effet du cœur ionique,
2. la seconde, appelée méthode du pseudo-potentiel non local, qui prend en considération l'effet du cœur ionique.

#### I-2- La méthode du pseudopotentiel (P.M):

La méthode du pseudopotentiel, comme méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW), utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et conduction avec les états du cœur. Mais dans le formalisme du pseudopotentiel l'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel.

L'effet d'orthogonalité aux états de cœur revient à extraire du potentiel cristallin la contribution rapidement variable de la région du cœur. Le pseudopotentiel est alors lentement variable et se prête bien à une approche du problème en termes de perturbation [7].

Le calcul est basé sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW). L'idée de base de cette méthode 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. Les électrons du cœur seront supposés gelés et seulement les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électrique. Les coefficients utilisés dans la méthode OPW pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur, peuvent être utilisés pour construire un potentiel qui est répulsif, et on obtient par l'effet d'annulation un potentiel faible ou pseudopotentiel. On

applique cette méthode pour les calculs des structures électroniques des solides et liquides, les vibrations des réseaux, les liaisons et les structures des cristaux,...etc.

### I-3- Le principe de cette méthode:

Dés le XIX<sup>ème</sup> siècle, les physiciens ont su démontrer qu'une grande partie des propriétés physique et chimiques des matériaux ne dépendent que du comportement des électrons de valence. En effet, les orbitales de cœur sont les plus basses en énergie, sont localisées près du noyau, sont très peu sensible à l'environnement et ne participent pas aux liaisons chimiques. En outre, elles sont difficiles à représenter sur une base d'ondes planes car elles possèdent généralement de fortes oscillations autour des noyaux. En revanche, les orbitales de valence sont peu localisées et s'étendent donc loin du noyau. Ce sont elles qui déterminent au premier ordre les propriétés physico-chimiques [9]. C'est sur cette propriété que se base l'approximation dite cœur gelé.

Cette méthode remplace l'effet des électrons du cœur par un pseudopotentiel effectif. Le système que l'on traite a présent n'est plus le système {noyau nu + électrons} mais {[noyau nu + électrons de cœur] + électrons de valence} qui est équivalente à {"ions" + électrons de valence}[9].

La méthode des ondes planes orthogonales est considérée comme l'ancêtre directe de la notion du pseudopotentiel. La méthode du pseudopotentiel de Phillips Kleinman est la première à montrer que la condition d'orthogonalité dans la région de cœur entre les états de cœur et de valence agit comme potentiel répulsif qui tend à s'opposer au potentiel nucléaire attractif ressenti par les électrons de valence, ainsi, par effet d'annulation on obtient un potentiel faiblement répulsif ou pseudopotentiel [10, 11]. Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres pour résoudre l'équation de Schrödinger. L'avantage de cette approximation est que le nombre d'électrons apparaissant de manière explicite dans les calculs se trouve fortement réduit, seuls les électrons de valence sont pris en compte.

### I-4- Le formalisme mathématique :

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

$$\psi = \phi + \sum_C b_C \phi_C \quad (\text{I-1})$$

La fonction d'onde doit être orthogonale aux états du cœur, veut dire :

$$\langle \phi_C | \psi \rangle = 0 \quad (\text{I-2})$$

On peut dire :

$$\psi = \phi \sum_C \langle \phi_C | \phi \rangle \phi_C \quad (\text{I-3})$$

$\psi$ : est la fonction d'onde.

Reportant cette expression dans l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{I-4})$$

En remplaçant la fonction d'onde par son expression dans l'équation de Schrödinger on obtient :

$$H\phi + \sum_C (E - E_C) \phi_C \langle \phi_C | \phi \rangle = E\phi \quad (\text{I-5})$$

D'une façon condensée, on peut écrire:

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

Où ( $V_R$ ): est le potentiel répulsif défini comme suit:

$$V_R\phi = \sum_C (E - E_C) \phi_C \langle \phi_C | \phi \rangle \quad (\text{I-7})$$

Dans l'équation (I-6), il est important de noter que la valeur propre de l'énergie  $E$  n'est pas un pseudo énergie mais la vraie énergie correspondant à la vraie fonction d'onde  $\psi$ .

Donc cette équation devient :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} + V_C + V_R \right) \phi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \right) \phi = E\phi \quad (\text{I-8})$$

On pose que :

$$V_P = V_C + V_R \quad (\text{I-9})$$

$V_P$ : est un potentiel faible.

$V_C$  : Un potentiel attractif dans la région du coeur.

$V_R$  : Un potentiel répulsif dans la région des électrons de valence.

$V_P$  devient faiblement attractif dans la région du cœur et faiblement répulsif dans la région des électrons de valence.

### I-5- Les caractéristiques du pseudo potentiel:

Le pseudopotential  $V_P$  est un opérateur qui n'a pas une expression locale ( $r$ ). Il est considéré comme une perturbation, pour le connaître et l'introduire dans les calculs, il suffit de connaître ses éléments de matrice du potentiel  $V_R$  déterminés sur une base complète de fonctions [12] :

$$\psi V_R \psi = \sum_C (E_V - E_C) \int dr |\psi_C^* \psi|^2 \quad (\text{I-10})$$

Etant donné que  $E_V$  est légèrement supérieur à  $E_C$ , donc  $V_R$  est toujours positif, ainsi  $V_P = V_C + V_R$  est très faible, d'où l'utilisation de la théorie des électrons presque libres pour le calcul des niveaux de valence.

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

$$V_R = V(r, r') = \sum_C (E - E_C) |\phi_C(r)\rangle \langle \phi_C(r)| \phi \rangle \quad (\text{I-11})$$

Où la fonction  $\phi$  dépend de  $r$ .

Si on tient compte de l'effet du cœur le pseudo potentiel devient non local [14].

### I-6- Les modèles de pseudopotentiel :

L'approche de Philips-Klienman n'a pas une large application comme méthode de calcul pour obtenir la structure de bande d'un cristal, malgré la dépendance du moment angulaire des états du cœur. Ce qui fait que des modèles et des potentiels empiriques étaient utilisés pour résoudre un certain nombre de problèmes. Dans certains cas le pseudopotentiel est ajusté par rapport aux données atomiques expérimentales, puis il est utilisé dans le calcul de structure de bandes d'un solide [15].

En supposant que l'interaction d'échange des électrons n'est pas explicitement traitée ce qui justifie d'ignorer la non localité du pseudopotentiel et de le supposer comme fonction simple de la position. C'est le pseudopotentiel local.

#### I-6-1- Le modèle local :

Le pseudo Hamiltonien pour un électron dans un cristal est donné par :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad (\text{I-12})$$

Dans cette méthode, pour déterminer les fonctions propres et les valeurs propres de l'équation de Schrödinger, on s'attend nécessairement que l'on ait toujours une forme du potentiel.

En fait, un potentiel local dépendant de la variable  $r$ , reste le modèle le plus simple pour ce fait, plusieurs formes du potentiel ont été proposées

Le premier modèle consiste en un potentiel de coulomb à une large distance et un potentiel constant dans la région du cœur. Le potentiel  $V(r)$  est donné par la relation [16]:

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

Avec  $Z$  : est le nombre des électrons de valence atomique.

Et  $r_c$  : est le rayon du cœur, il sert à ajuster les données atomiques.

**I-6-1-a- Le modèle de Heine et Abarenkov :**

Heine et Abarenkov ont introduit un potentiel  $A$  considéré comme constant dans la région du cœur pour plus de flexibilité, aura la forme suivante :

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

**I-6-1-b- Le modèle d'Ashcroft:**

Ashcroft a proposé dans son modèle une autre forme de potentiel similaire qui est beaucoup utilisé, c'est le potentiel du cœur inoccupé « the empty core potential » donnée par [17]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{z_e}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-15})$$

**I-6-2- Le modèle non local :**

De la même façon, le potentiel (pseudopotentiel) peut être non local en choisissant des constantes différentes dans la région du cœur pour chaque  $l$  ( $l$  : nombre quantique) la dépendance en énergie peut être ainsi incluse en remplaçant la constante  $A$  par  $A_l(E)$ . On peut donc écrire le pseudopotentiel non local sous la forme suivante [18].

$$V_P = V_{NL}(r, E) = \sum A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{I-16})$$

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

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

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

La forme carrée de la fonction de Heine et Abarenkov [19], est très utilisée à cause de sa simplicité,

$$f_l(r) = \begin{cases} 1 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \quad (\text{I-17})$$

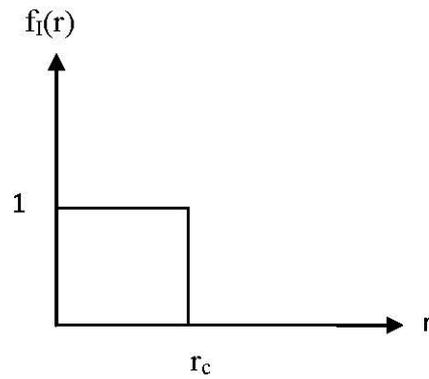


Figure I-1 : Fonction de Heine-Abarenkov

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

La forme gaussienne est représentée sur la Figure (II.2) et est donnée par l'expression suivante : [20]

$$f_I = \exp\left(-\frac{r^2}{r_c^2}\right) \quad (\text{I-18})$$

Le pseudopotentiel écrit sous la forme suivante :

$$V_{NL} = A_1 \exp\left(-\frac{r^2}{R_1^2}\right) \quad (\text{I-19})$$

$A_1$  : La profondeur de puits.

$R_1$  : Le rayon du cœur ionique.

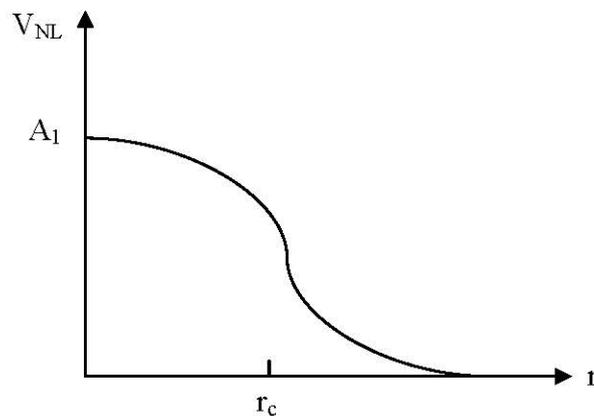


Figure I-2 : Fonction de Gauss.

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

Dans ce modèle  $f_I(r) = 0$  [21] (Figure II.3), le potentiel répulsif dû à l'orthogonalisation de la fonction d'onde des électrons de conduction sur les états du cœur, annule très exactement le potentiel coulombien à l'intérieur du cœur ionique.

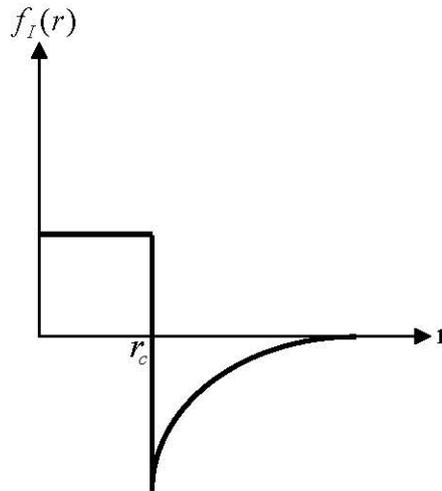


Figure I-3: Modèle d'Ashcroft.

### I-7-La méthode empirique de pseudopotentiel [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. [22]

L'E.P.M est la méthode empirique la plus utilisée dans le calcul de la structure de bandes. La méthode empirique des pseudopotentiels est appliquée dans les semiconducteurs [23] de structure diamant ou zinc blende [24]. Les ajustements théoriques aux observations sur les expériences de la réflexion et l'absorption des cristaux déterminent des paramètres entrants dans le calcul de la structure de bandes comme  $V(\mathbf{G})$ .

La méthode empirique des pseudopotentiels (EPM) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux  $V(\mathbf{G})$  [25] du pseudopotentiel  $V_p(\mathbf{r})$  qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques. [26]

$$V_p(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}, \vec{\tau}} V_a(\vec{r} - \vec{R} - \vec{\tau}) \quad (\text{I-20})$$

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

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

Dans le réseau réciproque, le potentiel  $V_p(\mathbf{r})$  prend la forme suivante :

$$V_p(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} S(\vec{G}) V_a(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (\text{I-21})$$

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

$S(\vec{G})$  : est le facteur de structure. Ce facteur a la forme: [27]

$$S(\vec{G}) = \frac{1}{N_a} \sum_r e^{i\vec{G}r} \quad (\text{I-22})$$

$N_a$ : étant le nombre d'atome de base.

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

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

$n$  : représente l'indice de la bande.

Les fonctions  $\psi_{n,k}(r)$  ont la forme d'une fonction de Bloch et peuvent être développées en une série d'ondes planes.

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

Le procédé de calcul de l'E.P.M comme le montre le diagramme suivant est choisi  $V(G)$ . La structure est incluse par le facteur de structure et l'équation de Schrödinger est résolue pour les valeurs propres  $E(k)$  d'énergie et les pseudofonctions d'ondes  $\psi_k(r)$ .

Ces énergies sont comparées avec l'expérience et  $V(G)$  est altéré si on n'obtient pas un bon accord entre l'expérience et la théorie. Le procédé est répété jusqu'à l'obtention d'un bon accord entre l'expérience et la théorie. Généralement un petit nombre d'itération suffit pour concorder entre la théorie et l'expérience [28].

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

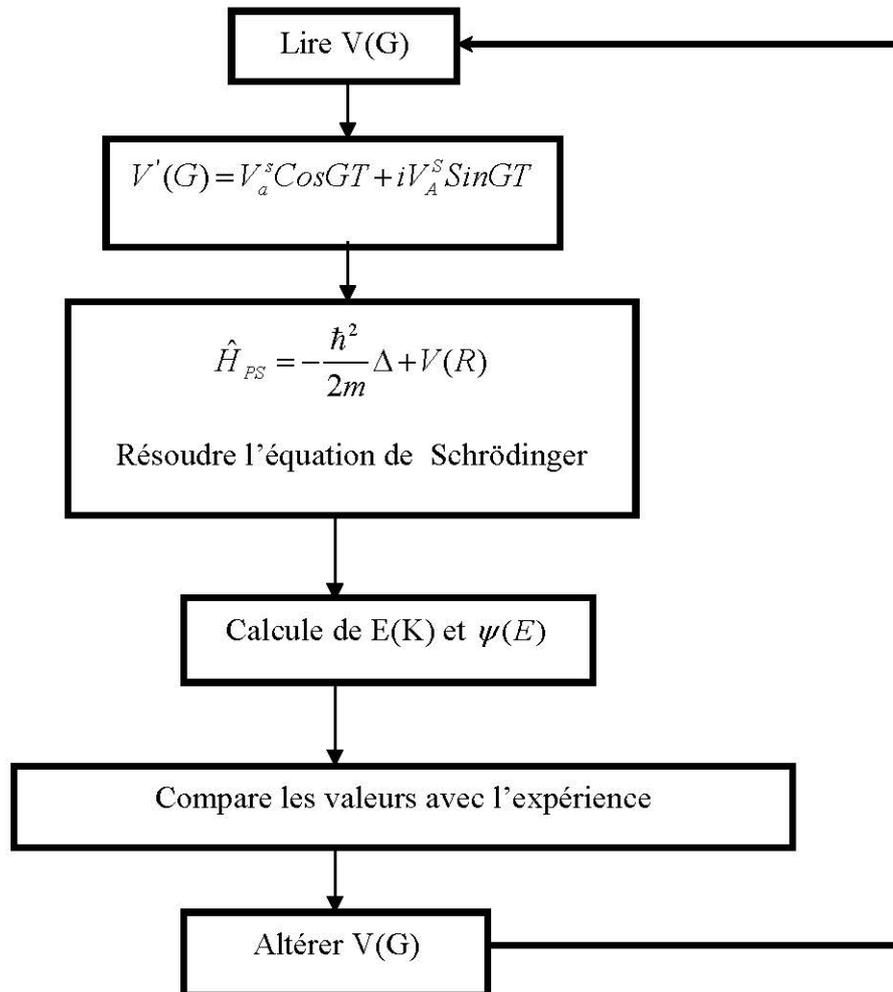


Figure I-4: L'organigramme de la méthode EPM. [27]

## Références

- [1] H. Hellmann, W. Kassatotschkin, Acta Physicochim. U.R.S.S. **5**, 23 (1936).
- [2] F. Seitz, The modern theory of solids, New-York (1964).
- [3] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
- [4] D. L. Greenway and G. Harbeke, in international school of monographs in the science of the solid state on, Vol. 1 (1968).
- [5] J. C. Phillips, L. Kleinman, Phys. Rev. **116**, 287 (1959).
- [6] J. C. Phillips. Phys. Rev. **112**, 685 (1958);  
F. Bassani and V. Celli, J. Phys. Chem. Solid **20**, 64 (1961);  
M. L. Cohen and V. Heine, Phys. Rev. **122**, 1821 (1961);  
B. I. Austin, V. Heine and L. I. Shen, Phys. Rev. **127**, 276 (1962).
- [7] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Dunod université (2001).
- [8] F. Gautier, Journal de physique **C3**, 3 (1967).
- [9] N. Richard « Actinides et terres rares sous pression : approche pseudopotentiel » Rapport CEA, France, (2002).
- [10] J.C. Phillips, L. Kleinman, Phys. Rev. **116**, 287 (1959).
- [11] E. Antoncik , J. Phys. Chem. Solids **10**, 314 (1959).
- [12] R. Mouici, mémoire de magister, université de Tébessa (Algérie), 2012.
- [13] A. Kan Garlu, Phys.Rev. B **38**, 9790 (1988).
- [14] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, université de Constantine (Algérie) 2006.
- [15] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70 th ed, edited by R.C. Weast, D.R. Lide, M.J. Astle, and W.H. Beyen, ( Chemical Rubber, Boca Raton, 1990).
- [16] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences, Ed. Springer, New York, (1989).
- [17] G. Böhan, K. Unger, Phys. Stat .Sol. B **216**, 961 (1999).
- [18] H. Aourag, Pseudopotentiel Method theory and practice, Winter College on Computational condensed matter physics, Université de Sidi-Bel-Abbes (1995).
- [19] L. Hannachi, thèse de doctorat en sciences, université de Sétif 1 (Algérie), 2010.
- [20] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [21] W. A. Harrison, Pseudopotential Theory of Metals, Benjamin, New York, 1966.
- [22] M. Bescond, thèse de doctorat en sciences, Université de Provence (Aix-Marseille I), France (2004).
- [23] A. Zaoui, thèse de doctorat en sciences, université de Metz (France) 1999.
- [24] F. Khediri, mémoire de magister, université de Tébessa, (Algérie) 2012.

- [25] M. M. Diarra, thèse de doctorat en sciences, université des sciences et Technologies de Lille, (France) 2009.
- [26] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **61**, 4869 (1987).
- [27] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors*, Springer Series in Solide-State Siences, 1989.
- [28] D. Beeman, *J. Comput. Phys.* **20**, 130 (1976).



## *Chapitre II*

### **Les propriétés mécaniques**

## Chapitre II

### Les propriétés mécaniques

#### II-1- Introduction :

L'élasticité des solides (c'est-à-dire la réponse du matériau aux forces appliquées) est prise en compte dans l'étude des comportements mécaniques d'un matériau. Les forces sont décrites par des tenseurs appelés tenseurs des contraintes qui déterminent la direction des forces et le plan sur lequel elles s'appliquent. Le rapport contrainte/déformation est appelé module élastique. Pour de petites contraintes, ce module est constant et le matériau se comporte de manière élastique, et retourne aux conditions initiales une fois les contraintes sont supprimées. La proportionnalité entre contrainte et déformation dans la limite des faibles déformations, sont décrites respectivement par les deux tenseurs symétriques de 2<sup>ème</sup> ordre  $\sigma_{ij}$  et  $\varepsilon_{ij}$ . La proportionnalité entre les deux tenseurs introduit deux constantes caractéristiques du matériau.

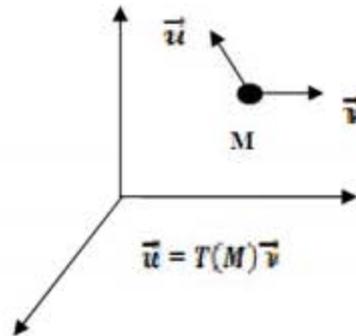
- Pour un matériau isotrope (un polycristal), plusieurs équivalents de ces constantes sont possibles [1] : on utilise souvent le module de Young E et le coefficient de Poisson  $\nu$  ou le module de compressibilité B et le module de cisaillement G ou les deux constantes de Lamé  $\lambda$  et  $\mu$ .
- Pour les monocristaux nous utiliserons les constantes d'élasticité  $C_{ij}$  ou de déformabilité  $S'_{ij}$  [1]. La détermination de ces différentes paramètres nous permet de déduire et d'estimer d'autres propriétés fondamentales liées au comportement élastique tel que, les vitesses d'ondes élastiques (vitesses acoustiques), la température de Debye  $\theta_D$ , l'anisotropie élastique, la stabilité mécanique, etc. [2-3].

#### II-2- Propriétés élastiques :

L'élasticité des solides c'est la réponse du matériau aux sollicitations appliquées, ces sollicitations peuvent provoquer des déformations réversibles (retour à l'état initial). La loi de Hooke s'applique seulement aux faibles déformations et établit que dans un solide élastique, la déformation est proportionnelle à la contrainte. Les forces sont décrites par des tenseurs ou tenseurs des contraintes. Les réponses sont appelés déformations qui sont données aussi par des tenseurs [4]. On a aussi que la théorie de l'élasticité traite le comportement des substances qui ont la propriété de reprendre leurs dimensions et leurs formes lorsque les forces qui produisent les déformations sont supprimées [5].

### II-3- Les Tenseurs :

Un tenseur est un opérateur liant dans un même repère deux grandeurs physiques (par exemple  $\vec{u}$  et  $\vec{v}$  dans la figure II.1) en un même point d'un espace de dimension  $d$ . Ses composantes dans un repère donné ne dépendent que du  $M$  [6].



**Figure II-1:** Tenseur  $T(M)$  liant deux grandeurs physiques ( $u$  et  $v$ ) dans un repère donné [4].

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

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

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

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

$T^{(3)}$  Tenseur de Rang 3 : Vecteur à  $d^{(3)}$ , composantes  $T_{ij\dots n}(M)$ .

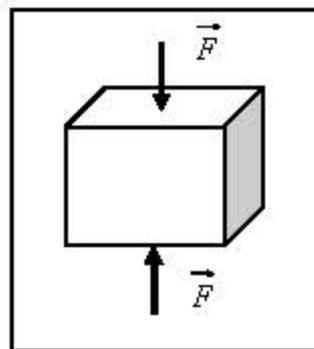
#### II-3-a Tenseur des contraintes :

La contrainte est définie comme l'intensité d'une force élémentaire appliquée  $df$  à un point donnée du matériau, sur une surface infinitésimale  $ds$ . Son unité dans le système internationale [7] est le Pascal (1 Pascal=1N/m<sup>2</sup>), ou méga pascal (1MPa=10<sup>6</sup> N/m<sup>2</sup>).

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

$F$  : est la force exercée.

$S$  : est la surface d'un matériau solide.



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

Pour étudier la déformation d'un élément de volume infinitésimal du solide sous l'effet d'une contrainte [8]. Elle est définie par  $\sigma_{ij}$  où  $i, j = x, y, z$  [9].

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

Les éléments  $\sigma_{ii}$  sont appelés contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement à la face. Les éléments  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  avec ( $i \neq j$ ) sont les contraintes tangentielles puisqu'elles agissent sur le plan de la surface.

Nous définissons le tenseur des contraintes par la matrice suivante :

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

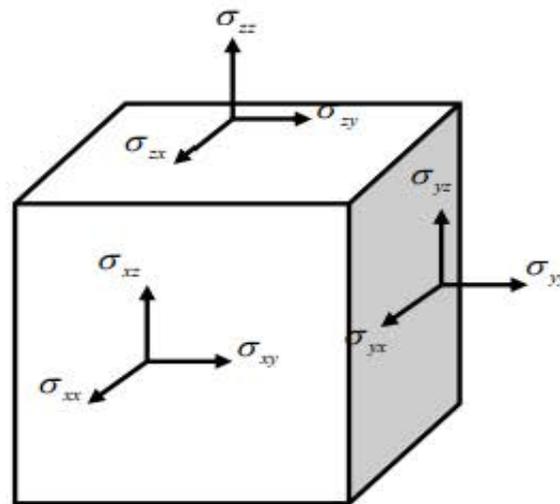


Figure II-3: Les composantes du tenseur de contraintes [10].

### II-3-b- Le tenseur de déformation :

Sous l'action de forces appliquées, les corps solides se déforment [11]. Ils changent de la forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position de repos de l'objet dans laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet. Pour représenter les déformations que subit un matériau sous l'action d'une contrainte, supposons que trois vecteurs orthogonaux  $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$  de longueur unité soient liés au solide non déformés. Une petite déformation uniforme du solide fait changer l'orientation et la longueur des axes (voir Figure II-3).

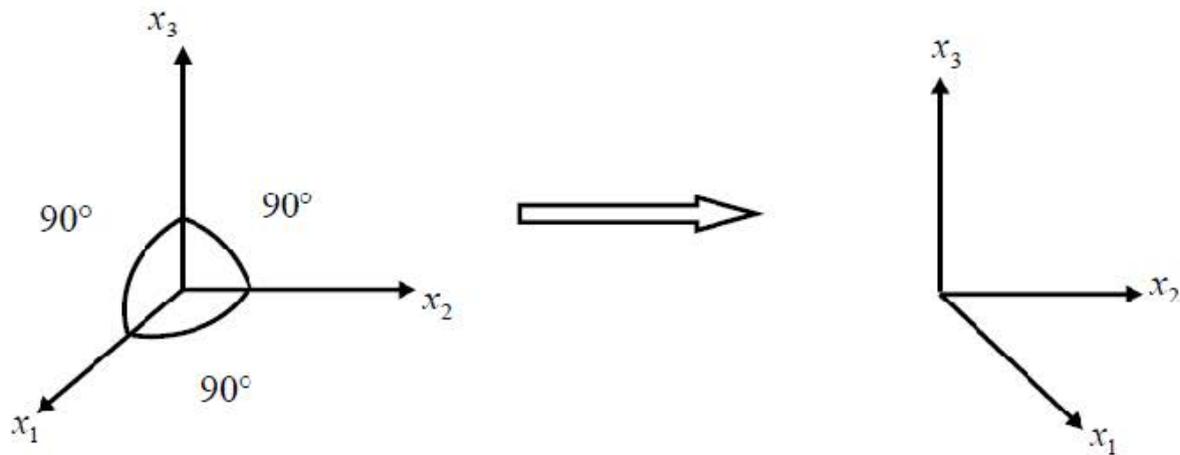


Figure II-4 : Axes des coordonnées avant et après la déformation [10].

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

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

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

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

$\vec{u}$  Le déplacement est une fonction pour les coordonnées :

$$\vec{u} = u(x_1, x_2, x_3)$$

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

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

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

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

Où :

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

Ou bien

$$\vec{u} = \vec{\varepsilon} \vec{r} \tag{II-7}$$

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

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

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

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

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

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

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

$\varepsilon_{ij}$  : définie par la formule suivante :

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

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

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

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

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

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

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

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

$e_{ij}$  : Le tenseur symétrique.

$\omega_{ij}$  : Le tenseur antisymétrique.

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

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

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

Alors nous obtenons:

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

Avec la combinaison et la multiplication par  $dx_i$  nous obtenons :

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

En appliquant les conditions du tenseur antisymétrique. Le coté gauche de l'équation (II-16) 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 pour 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 [12]:

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

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

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

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

Les composés diagonaux du tenseur  $[e_{ij}]$  et des composés diagonaux du tenseur de déplacement petit  $[\varepsilon_{ij}]$  ont la même signification qui décrit dilatation et longitudinal. Tandis que les composés non diagonaux décrivant le déplacement angulaire [13].

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

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

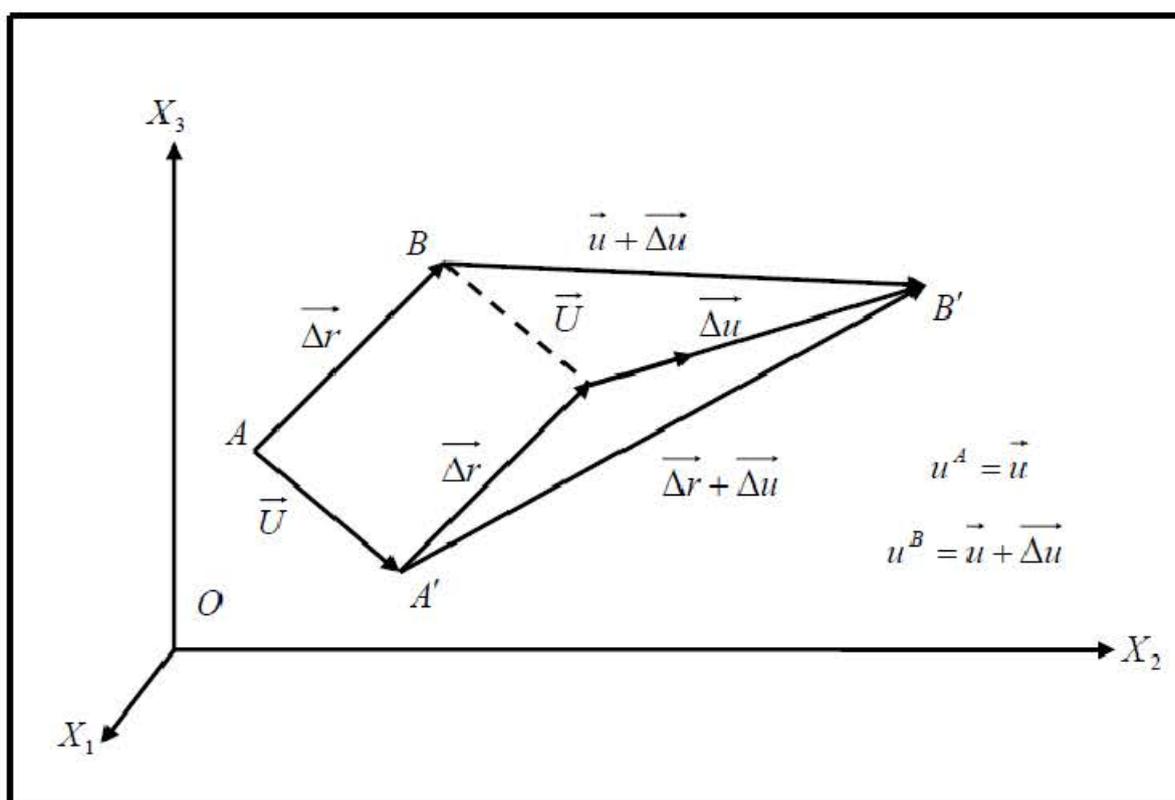


Figure II-5 : L'élément tensoriel de déformation [13].

### II-3-c- Tenseur de dilatation :

La dilatation c'est l'augmentation relative de volume associée à la déformation, elle est négative dans le cas d'une pression hydrostatique [10].

Sous l'influence de cette contrainte, le volume du parallélépipède (échantillon) va changer de la quantité  $V = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$  à  $V' = \Delta x_1' \Delta x_2' \Delta x_3'$  (en supposant qu'aucun changement des angles entre les caractères applicables à coordonnées cartésiennes). Comme  $e_{ii}$  et la déformation relative longitudinale sous l'extension [14], alors :

$$e_{ii} = \frac{\Delta x'_i - \Delta x_i}{\Delta x_i} \quad (\text{II-24})$$

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

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

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

On peut aussi définir le nouvel volume comme suit [10] :

$$V' = \begin{bmatrix} 1 + \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & 1 + \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & 1 + \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = [1 + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}] \quad (\text{II-26})$$

Nous avons négligé les produits de deux composantes de déformation (terme du deuxième ordre). La dilatation  $\delta$  est donc donnée par la relation suivante [14] :

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

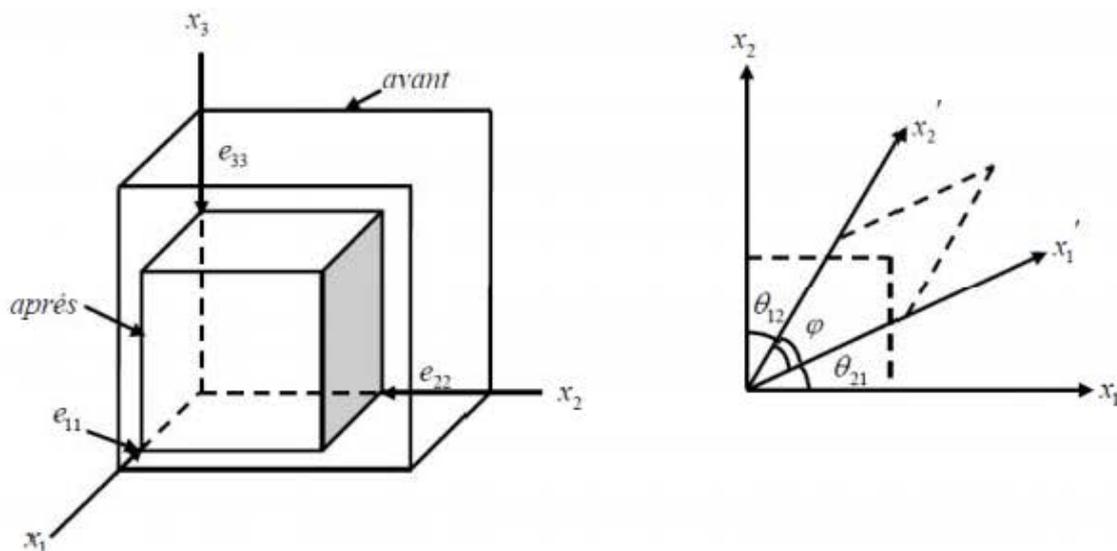


Figure II-6 : Le changement du volume de l'échantillon sous l'effet d'une contrainte [10].

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

**II-4- Relation contrainte-déformation :**

En théorie de l'élasticité linéaire, il existe une relation linéaire entre  $\sigma_{ij}$  et  $\varepsilon_{kl}$  donnée par la loi de Hooke généralisée [6]:

**II-4-a-La loi de Hooke généralisée:**

R. Hooke a été le premier à étudier expérimentalement les lois principales du comportement des matériaux dans le domaine élastique, il a établi qu'en traction d'un corps isotrope (pour un corps isotrope toutes les directions sont identiques) lorsque les déformations et les contraintes sont assez faibles, la déformation est proportionnelle à la contrainte appliquée, cela implique que le tenseur de déformation peut être relié au tenseur de la contrainte par une loi linéaire (loi de Hooke) [15].

$$\sigma = C \cdot \varepsilon \tag{II-29}$$

La théorie macroscopique des propriétés élastiques des solides est décrite en détail dans la notation de tenseur par J. F. Nye [16], d'après cette théorie, on trouve que le tenseur des déformations d'un cristal peut être relié au tenseur des contraintes par une loi linéaire. On définit ainsi un tenseur de rang 4, C de composantes  $C_{ijkl}$  où i, j, k et l varient de 1 à 3 tel que [5]:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1,3} \sum_{l=1,3} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \tag{II-30}$$

$C_{ijkl}$  est un tenseur d'ordre 4 appelé tenseur de rigidité élastique et il définit les constantes élastiques du matériau. Le nombre de combinaisons possibles de quatre indices ijkl est de  $3^4 = 81$  éléments. Dans le cas le plus général et par raison de symétrie de  $\sigma_{ij}$  et de  $\varepsilon_{kl}$  et en appliquant la relation de Maxwell  $C_{ijkl} = C_{klij}$ , les éléments  $C_{ijkl}$  se réduisent à 21 éléments indépendants. En outre, la symétrie du solide cristallin réduit notablement ce nombre.

Les symétries des tenseurs de contraintes et de déformations font que ce tenseur de rang 4  $C_{ijkl}$  se ramène généralement à une matrice  $C_{\alpha\beta}$  (notation de Voigt [16]) [5]:

Notation tensorielle	Xx	Yy	Zz	Yz	Xz	Xy
Notation matricielle	1	2	3	4	5	6

Le tenseur des contraintes devient un vecteur  $\sigma_{\alpha}$  [5]:

$$\alpha = 1, 2, \quad \sigma = \sigma_{\alpha}$$

Le tenseur des déformations devient un vecteur  $\varepsilon_{\beta}$  :

$$\beta = 1, 2, \quad \varepsilon = \varepsilon_\beta$$

La loi de Hooke s'exprime alors :

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

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

Pour un cristal cubique le nombre de constantes élastique est égal à  $3C_{11}, C_{12}$  et  $C_{44}$  les autres composantes sont nulles, la matrice des constantes élastiques s'écrit dans ce cas :

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

### II-5-Densité d'énergie élastique (U) :

La densité d'énergie élastique est une fonction quadratique des déformations dans l'approximation de la loi de Hooke, nous pouvons donc écrire [10]:

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

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

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

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

$$c_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\tilde{c}_{\alpha\beta} + \tilde{c}_{\beta\alpha}) = c_{\beta\alpha} \quad (II-35)$$

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

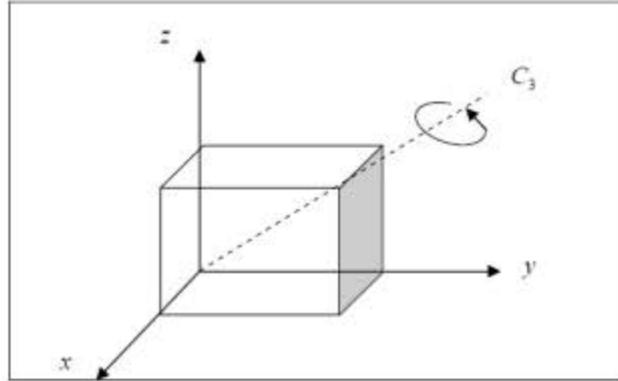
$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\partial U}{\partial e_{\alpha\beta}} \quad ; \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, \dots, 6 \quad (II-36)$$

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

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

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

$$(e_{xx}e_{yy} + \dots), (e_{yy}e_{zz} + \dots), (e_{xx}e_{zz} + \dots) \quad (\text{II-38})$$



**Figure II-7:** Une rotation de  $2\pi/3$  autour de l'axe numéroté 3 change  $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$  [10].

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

$$\begin{aligned} x \rightarrow y \rightarrow z, -x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow -x \\ x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow x, -x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow -x \end{aligned} \quad (\text{II-39})$$

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

$$e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2 \rightarrow e_{yy}^2 + e_{zz}^2 + e_{xx}^2 \quad (\text{II-40})$$

On peut vérifier l'exactitude de l'équation

$$\sigma_{\tilde{y}} = \frac{\partial U}{\partial e_{\tilde{y}}} \quad (\text{II-41-a})$$

On calcule comme un exemple  $\sigma_{xx}$  :

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

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

Après la comparaison entre le tenseur de contrainte dans la matrice (II-30) et la relation (II-39-c) on obtient :

$$C_{12} = C_{13} \text{ et } C_{14} = C_{15} = C_{16} = 0 \quad (\text{II-42})$$

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

De plus :

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

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

En comparant avec (II-30), nous obtenons :

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

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

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

Pour un cristal cubique, les modules d'élasticité sont définis en fonction des constantes d'élasticité [10]:

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

## II-6-Les méthodes de calcul des propriétés élastiques:

### II-6-1-Le calcul des constants élastiques:

L'ajustement des facteurs de forme, nous a permis de calculer la polarité  $\alpha_p$  définie par Vogl [17]:

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

Où  $V_s(3)$  et  $V_a(3)$  sont les facteurs de formes symétrique et antisymétrique à  $G(111)$  respectivement.

Plusieurs approches ont été envisagées pour calculer les constants élastiques des semi-conducteurs.

Les constantes élastiques  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont calculées en utilisant les interactions covalentes et se chevauchent dans les composés de liaison tétraédrique et amélioré la description par Baranowski [18]:

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

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

La constante élastique  $C_{44}$  est obtenue avec le modèle de champ de force de la valence [19]:

$$C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha + \beta) - 0.136SC_0 - C\zeta^2 \quad (\text{II-50})$$

Où  $d = \frac{\sqrt{3}}{4}a$  est la distance du plus proche voisin ( $a$  est la constante de réseau) et  $\lambda$  est un paramètre sans dimension avec valeur constant de 0.738 [20].

$$S = \frac{z^{*2}}{\varepsilon} \quad (\text{II-51})$$

$\varepsilon$  est la constante diélectrique statique égale à 11.8369 pour GaAs et 9.3261 pour AlAs.

Et

$$C_0 = \frac{e^2}{d^4} \quad (\text{II-52})$$

$e$  la charge de l'électron  $1.6 \times 10^{-19}C$ .

$Z^*$  est la charge effective qui calculée de la relation suivant [21, 22].

$$z^* = e_T^* - \frac{8}{3}\alpha_p(1 - \alpha_p^2) \quad (\text{II-53})$$

Avec  $e_T^*$  est la charge effective transversale.

$$2e_T^* = -\Delta Z + \frac{8\alpha_p}{1 + \alpha_p^2} \quad (\text{II-54})$$

Pour  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

$$\Delta Z = x.Z_{\text{Al}} + (1 - x).Z_{\text{Ga}} + Z_{\text{As}}$$

$Z_{\text{Al}}$ ,  $Z_{\text{Ga}}$  et  $Z_{\text{As}}$  sont les valences des atomes.

$C$  qui apparaît dans l'Eq. (II-50) est donné par [23].

$$C = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha + \beta) - 0.266SC_0 \quad (\text{II-55})$$

Les quantités  $\alpha$  et  $\beta$  représentent les paramètres des constantes de forces d'élongation, et de recourbement, respectivement. En utilisant la relation entre  $C_{11}$  et  $C_{12}$  donnée dans [23], et après avoir fait simplification,  $\alpha$  et  $\beta$  pourraient être représentés par:

$$\alpha = \frac{d}{\sqrt{3}}(C_{11} + 3C_{12}) + \frac{d}{3\sqrt{3}}(1.473SC_0) \quad (\text{II-56})$$

$$\beta = \frac{d}{\sqrt{3}}[(C_{11} - C_{12}) - 0.053SC_0] \quad (\text{II-57})$$

$\xi$  est le paramètre de déformation interne défini par Kleinman [24] et lié au tenseur de déformation interne [24]. La relation entre  $\xi$  et les constantes élastiques données dans [23], nous a permis après pour écrire  $\xi$  comme :

$$\xi = \frac{2C_{12} - 0.314SC_0}{C_{11} + C_{12} - 0.314SC_0} \quad (\text{II-58})$$

#### II-6-2- Le module de compressibilité(B) :

$B$  est le module de compressibilité qui mesure la résistance à une modification du volume dans les solides et donne ainsi une estimation de la réponse élastique d'un matériau à une pression hydrostatique,  $B$  sa dérivée par rapport à la pression.

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{II-59})$$

#### II-6-3- Module de cisaillement G :

Le module de cisaillement  $G$  est une grandeur physique propre à chaque matériau [25], qui est appelé le module de glissement, le module de coulomb ou encore le module de rigidité. Ce dernier 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 [26, 27]:

$$G = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2} \quad (\text{II-60})$$

#### II-6-4- Le Module de Young (Y):

C'est la constante de proportionnalité entre la contrainte qu'un matériau subit et sa déformation unitaire. C'est une constante propre à chaque matériau.

Ce module dépend de : [11]

- L'énergie des liaisons entre atomes.
- La nature des forces élastiques de rappel.

- La structure du matériau (amorphe, cristallin).

$$Y = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (\text{II-61})$$

#### II-6-5-Le coefficient de poisson :

Le coefficient de poisson noté par la lettre grecque  $\nu$  a été mis en évidence analytiquement par Siméon Denis Poisson, mathématicien Français (1781-1840) [25]. On définit le coefficient de Poisson comme étant :

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{II-62})$$

#### II-6-6-Le facteur d'anisotropie $A$ :

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

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (\text{II-63})$$

#### II-6-7-Le facteur d'ionicité $f_i$ :

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

$$f_i = \left( 1 - \left( 1 - \alpha_p \right)^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II-64})$$

## Références

- [1] K. Haddadi, thèse de doctorat en sciences, université de Sétif, (Algérie) 2013.
- [2] E. Schreiber, O. L. Anderson et N. Soga, Elastic constants and their measurement (Mc. Graw-Hill, Inc, USA, 1973).
- [3] M. F. Ashby et D. R. H. Jones, matériaux propriétés et applications, Dunod, Paris 1998.
- [4] F. Gatt, mémoire de magister, université Med Khider Biskra, (Algérie) 2014.
- [5] N. Lebga, thèse de doctorat en sciences, université Ferhat Abbas-Sétif, (Algérie) 2011.
- [6] S. Daoud, thèse de doctorat en sciences, université Ferhat Abbas-Sétif, (Algérie) 2013.
- [7] A. Bilek, thèse doctorat, UMMTO, (Algérie) 2007.
- [8] M. Benhamida, thèse de doctorat en sciences, université de Sétif, (Algérie) 2014.
- [9] L. Landau, E. Lifchitz, théorie de l'élasticité, Tom VII, Mir Moscou (1967).
- [10] C. Kittel, physique de l'état solide, Dunod, 7ème édition (1998).
- [11] W. E. Pikett, Computer Physics Repport **9**, 115 (1989).
- [12] J. M. Baranowski, J. Phys. C**17**, 6287 (1984).
- [13] L. Bendjaballah, mémoire de magister, université de Constantine, (Algérie) (2010).
- [14] H. Zouai, mémoire de master, université de Tébessa, (Algérie) (2012).
- [15] D. Royer, Ondes élastiques dans les solides, ed. Masson (1996).
- [16] J. F. Nye, Physical Properties of Crystals, (Clarendon, Oxford) (1972).
- [17] P. Vogl, J. Phys C **11**, 251 (1978).
- [18] E. Schreiber, O. L. Anderson and N. Soga, Elastic Constants and their Measurement. Mc Graw-Hill, New York (1973).
- [19] A. S. Verma, B. K. Sarkar, V. K. Jindal, Physica B **405**, 1737 (2010).
- [20] J. M. Baranowski, J. Phys. C **17**, 6287 (1984).
- [21] W. A. Harrison, S. Ciraci, Phys. Rev. B **10**, 1516 (1974).
- [22] W.A. Harrison, Electronic Structure and the Properties of Solids, Freeman, San Francisco, CA, 1980.
- [23] R. M. Martin, Phys. Rev. B **1**, 4005 (1970).
- [24] L. Kleinman, Phys. Rev. **128**, 2614 (1962).
- [25] B. Mayer, H. An Ton, E. Bott, M. Methfessel, J. STicht, P. C. Schmidt, Intermetallics **11**, (2003) 23.
- [26] M. Levinshtein, Rumyantsev and M. shur (EdS), Hand-book Series on Semiconductors parameters, World Scientific pub. CO Inc, Singapore, Vol 2 (1999).
- [27] Z. Tian, thèse de doctorat en sciences, université de Martin- Luther, Halle-Wittenberg, (Germany), 2008.
- [28] R. Haichour, thèse de doctorat en sciences, université de Sétif, (Algérie) 2011.
- [29] W. A. Harrison, S. Civaci, phys. Rev. B **10**, 1516 (1974).

# *Chapitre III*

## *Résultats et discussion*

## Chapitre III

## Résultats et discussion

## III -1- Introduction

Les semiconducteurs II-VI sont des composés formés par les éléments des groupes II et VI du tableau périodique, dont les propriétés sont généralement similaires à celles des semiconducteurs des groupes III-V. Ils représentent actuellement une classe importante de matériaux dans le domaine technologique. Ils sont très intéressants dans le domaine de l'optoélectronique.

Dans ce chapitre nous allons discuter les résultats qu'on a obtenu des propriétés mécaniques des composés binaires GaAs et AlAs et leurs alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  qui possèdent la structure zinc blende.

## III-2-Les propriétés élastiques :

Les propriétés élastiques des solides ont un grand intérêt pour connaître des informations importantes sur la mécanique et les propriétés dynamiques des matériaux. Les propriétés élastiques sont également liées thermodynamiquement avec la chaleur spécifique, la température de Debye, point de fusion, etc. Elles jouent un rôle très important dans la détermination de la résistance des matériaux. Différentes techniques expérimentales sont disponibles, aujourd'hui, pour mesurer les constantes élastiques, tels que la propagation des ondes ultrasonore, la diffusion neutronique et de diffusion de Brillouin [1, 2] etc.

Le pseudopotentiel est défini comme étant une superposition des pseudopotentiels atomiques de la forme suivante [3]:

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

$V_L$  : 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 [4].

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

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

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

Les composés de Fourier  $V(\vec{G})$  sont les paramètres du pseudopotentiel ou les facteurs de formes. Ces derniers ont été tirés de la littérature et ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [5] nommée le modèle d'optimisation de Kobayasi et Nara [6] 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 [7] :

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

$\delta$  doit être minimal.

Avec

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}}$$

Où  $E_{ij}^{\text{exp}}$  et  $E_{ij}^{\text{cal}}$  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 facteurs de formes du pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques et aussi les paramètres du réseau des composés binaires semiconducteurs GaAs et AlAs 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 GaAs et AlAs dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau  $a$  en (u. a) et en ( $\text{\AA}$ ).

Composé	$V_S(3)$	$V_A(3)$	Paramètre du réseau $a$
GaAs	-0.235393	0.073883	10.6833 (u. a)
			5.6533 ( $\text{\AA}$ )
AlAs	-0.208490	0.071961	10.6981 (u. a)
			5.6611 ( $\text{\AA}$ )

### III-3-Les propriétés élastiques de l'alliage semiconducteur $Al_xGa_{1-x}As$ :

Les propriétés élastiques définies la capacité d'un matériau à subir les contraintes à la limite d'élasticité et regagner la forme initiale [8].

#### III-3-1- Les constantes élastiques:

On utilise l'approche de Baranowski [7] pour calculer les constants élastiques et voir l'effet de la concentration  $x$  de l'Aluminium (Tableau III-2).

Tableau III-2: Les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  en ( $10^{11}$  dyne/cm<sup>2</sup>) de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ .

Matériaux	Constantes élastiques ( $10^{11}$ dyne /cm <sup>2</sup> )								
	$C_{11}$			$C_{12}$			$C_{44}$		
	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres
GaAs	12.5638	11.90 <sup>(a)</sup> 12.11 <sup>(b)</sup> 11.93 <sup>(f)</sup>	12.42 <sup>(g)</sup> 12.30 <sup>(h)</sup> 11.877 <sup>(i)</sup> 13.320 <sup>(k)</sup>	5.4366	5.38 <sup>(a)</sup> 5.48 <sup>(b)</sup> 5.72 <sup>(f)</sup>	5.14 <sup>(g)</sup> 5.53 <sup>(h)</sup> 5.372 <sup>(i)</sup> 5.74 <sup>(k)</sup>	5.8046	5.95 <sup>(a,b)</sup> 6.04 <sup>(c)</sup> 5.94 <sup>(f)</sup>	5.791 <sup>(d)</sup> 6.04 <sup>(e)</sup> 6.34 <sup>(g)</sup> 6.62 <sup>(h)</sup> 5.944 <sup>(j)</sup> 6.16 <sup>(k)</sup>
Al <sub>0,1</sub> Ga <sub>0,9</sub> As	12.5175 <sup>*</sup> 12.5353 <sup>***</sup>	-	-	5.4175 <sup>*</sup> 5.4248 <sup>***</sup>	-	-	5.7894 <sup>*</sup> 5.7947 <sup>***</sup>	-	-
Al <sub>0,3</sub> Ga <sub>0,7</sub> As	12.4216 <sup>*</sup> 12.4504 <sup>***</sup>	-	-	5.3781 <sup>*</sup> 5.3898 <sup>***</sup>	-	-	5.7597 <sup>*</sup> 5.7674 <sup>***</sup>	-	-
Al <sub>0,5</sub> Ga <sub>0,5</sub> As	12.3208 <sup>*</sup> 12.3542 <sup>***</sup>	-	-	5.3366 <sup>*</sup> 5.3502 <sup>***</sup>	-	-	5.7195 <sup>*</sup> 5.7341 <sup>***</sup>	-	-
Al <sub>0,7</sub> Ga <sub>0,3</sub> As	12.2146 <sup>*</sup> 12.2473 <sup>***</sup>	-	-	5.2929 <sup>*</sup> 5.3062 <sup>***</sup>	-	-	5.6723 <sup>*</sup> 5.6869 <sup>***</sup>	-	-
Al <sub>0,9</sub> Ga <sub>0,1</sub> As	12.1025 <sup>*</sup> 12.1255 <sup>***</sup>	-	-	5.2469 <sup>*</sup> 5.2562 <sup>***</sup>	-	-	5.6194 <sup>*</sup> 5.6305 <sup>***</sup>	-	-
AlAs	12.0441	11.99 <sup>(a)</sup> 12.02 <sup>(b)</sup> 11.88 <sup>(f)</sup>	11.31 <sup>(g)</sup> 11.60 <sup>(i)</sup> 11.63 <sup>(j)</sup> 12.35 <sup>(k)</sup>	5.2229	5.75 <sup>(a)</sup> 5.70 <sup>(b)</sup> 5.38 <sup>(f)</sup>	5.55 <sup>(g)</sup> 5.50 <sup>(i)</sup> 5.76 <sup>(j)</sup> 5.35 <sup>(k)</sup>	5.5916	5.66 <sup>(a)</sup> 5.85 <sup>(b)</sup> 5.42 <sup>(c)</sup> 5.72 <sup>(f)</sup>	5.598 <sup>(d)</sup> 5.52 <sup>(e)</sup> 5.47 <sup>(g)</sup> 5.70 <sup>(i)</sup> 5.41 <sup>(j)</sup> 5.75 <sup>(k)</sup>

\* Nos calculs sans désordre.

\*\*\* Nos calculs avec désordre.

<sup>(a)</sup>Ref. [9], <sup>(b)</sup>Ref. [10], <sup>(c)</sup>Ref. [11], <sup>(d)</sup>Ref. [12], <sup>(e)</sup>Ref. [13], <sup>(f)</sup>Ref. [14], <sup>(g)</sup>Ref. [15], <sup>(h)</sup>Ref. [16]

<sup>(i)</sup>Ref. [17], <sup>(j)</sup>Ref. [18], <sup>(k)</sup>Ref. [19].

La figure III-1 représente les variations des constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium dans l'intervalle  $[0, 1]$  avec et sans désordre.

On remarque que tous ces constantes élastiques diminuent non linéairement avec l'augmentation de la composition  $x$  en allant de GaAs où  $x=0$  vers AlAs où  $x=1$  de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ .

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

$$C_{ij} = a + bx + cx(1-x) \quad (\text{III-4})$$

$c$  : est le paramètre de courbure.

Les expressions analytiques sont d'écrites comme suit:

Sans désordre :

$$C_{11} = 12.56341 - 0.45158x - 0.06735x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-5})$$

$$C_{12} = 5.43644 - 0.18604x - 0.02735x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-6})$$

$$C_{44} = 5.8041 - 0.12551x - 0.0881x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-7})$$

Avec désordre :

$$C_{11} = 12.56526 - 0.31889x - 0.19587x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-8})$$

$$C_{12} = 5.43722 - 0.1321x - 0.07965x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-9})$$

$$C_{44} = 5.80273 - 0.06853x - 0.13939x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-10})$$

D'après la comparaison entre ces équations dans les deux cas (VCA et VCAA), nous trouvons que l'effet de désordre affecte faiblement les termes quadratiques et les signes des paramètres de courbure restent inchangeables, mais le paramètre de courbure avec désordre est plus important. L'effet de désordre augmente légèrement ces constantes élastiques dans tout l'intervalle  $[0, 1]$  de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

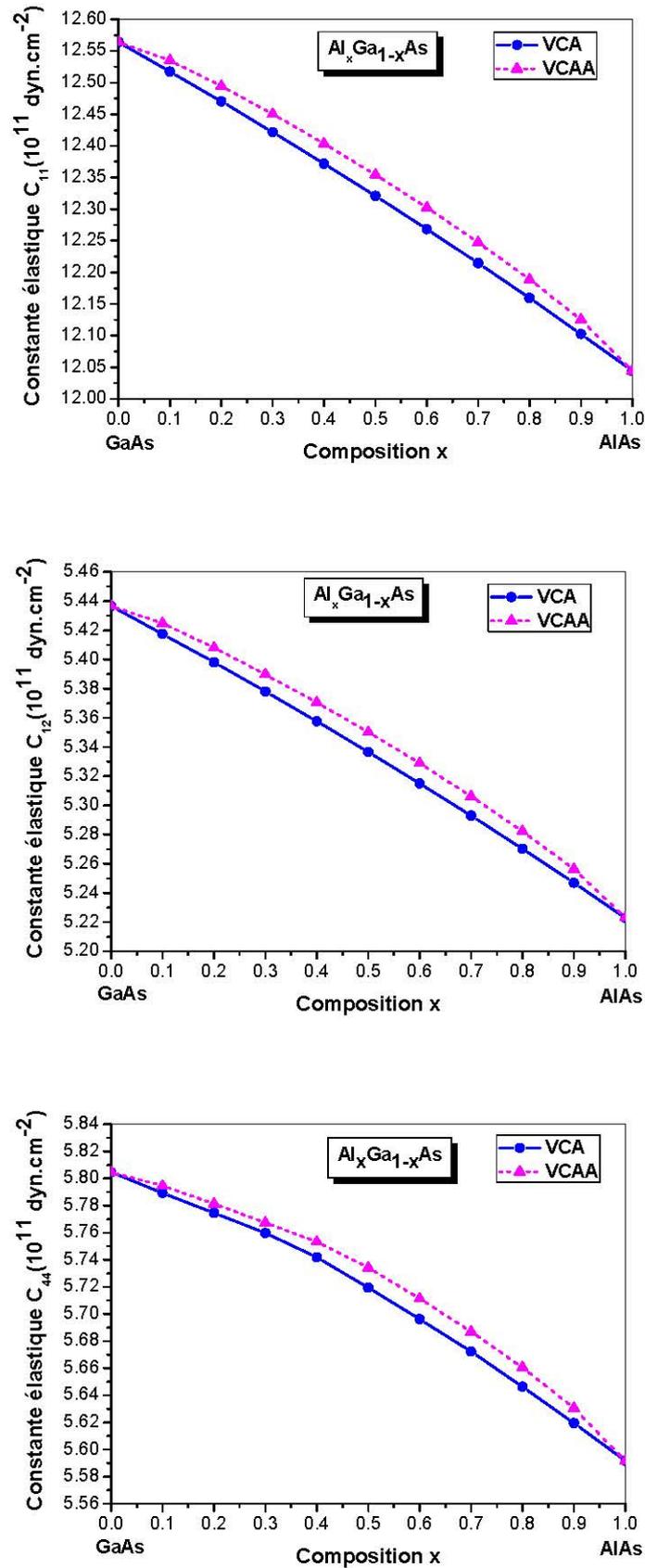


Figure III-1: Les variations des constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium: sans désordre (—) et avec désordre (- - - - -) de l'alliage ternaire.

La figure III-2 représente la variation du module de compressibilité  $B$  avec et sans désordre en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$ , notons que lorsqu'on varie  $x$  de  $x=0$  (GaAs) à  $x=1$  (AlAs), le module de compressibilité diminue non linéairement de  $(7.8123$  à  $7.4966) \cdot 10^{11}$  dyne/cm<sup>2</sup> (tableau III-3). Nous remarquons aussi que les valeurs du module de compressibilité pour le composé binaire AlAs est plus petit que celle du composé binaire GaAs. 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 [20]. Autrement dit le module de compressibilité  $B$  des matériaux cristallin donne la mesure de la rigidité, On peut dire que le composé GaAs est plus rigide que le composé AlAs.

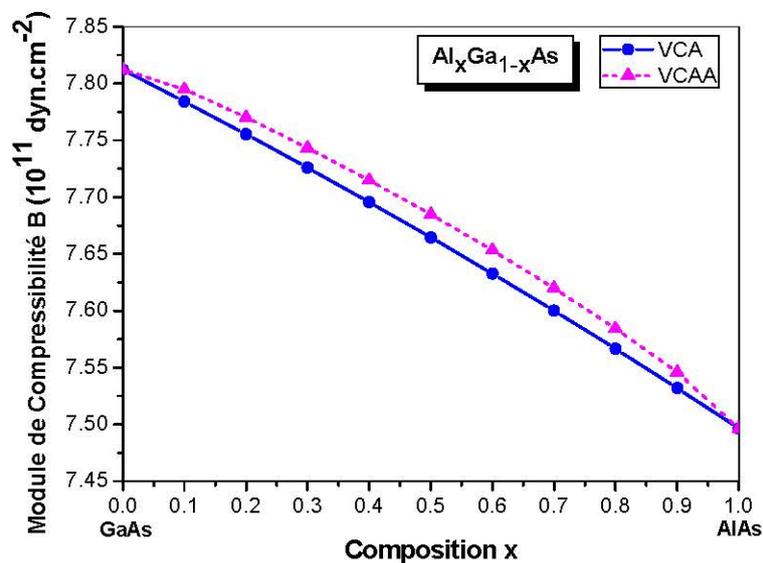


Figure III-2: La variation du module de compressibilité  $B$  avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

Les expressions analytiques pour le module de compressibilité  $B$ :

Sans désordre :

$$B = 7.8121 - 0.27456x - 0.0407x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-11})$$

Avec désordre :

$$B = 7.81321 - 0.19421x - 0.11854x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-12})$$

L'effet de désordre influe légèrement les termes quadratiques et les signes des paramètres de courbure restent inchangés. Mais le paramètre de courbure avec désordre est plus important. L'effet de désordre augmente légèrement le module de compressibilité  $B$  dans tout l'intervalle  $[0, 1]$  de la concentration  $x$  de l'Aluminium (tableau III-3).

Tableau III-3: Le module de compressibilité  $B$  en ( $10^{11}$  dyne/cm<sup>2</sup>) et les constantes de force d'élongation  $\alpha$  et de recourbement  $\beta$  en (N/m) de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ .

Matériaux	B ( $10^{11}$ dyne/cm <sup>2</sup> )			$\alpha$ (N/m)		$\beta$ (N/m)	
	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
GaAs	7.8123	7.54 <sup>(a)</sup> 7.69 <sup>(c)</sup> 7.55 <sup>(f)</sup>	3.76 <sup>(d)</sup> 7.69 <sup>(e)</sup> 7.5 <sup>(m)</sup>	40.8076	40.895 <sup>(b)</sup> 42.04 <sup>(g)</sup> 43.34 <sup>(h, i)</sup> 43.27 <sup>(j)</sup> 44.6 <sup>(k)</sup> 42.098 <sup>(l)</sup> 43.79 <sup>(n)</sup>	10.0730	9.159 <sup>(b)</sup> 7.74 <sup>(g)</sup> 8.88 <sup>(h, i)</sup> 7.75 <sup>(j)</sup> 9.55 <sup>(k)</sup> 7.794 <sup>(l)</sup> 10.64 <sup>(n)</sup>
Al <sub>0,1</sub> Ga <sub>0,9</sub> As	7.7842 <sup>*</sup> 7.7950 <sup>***</sup>	-	-	40.6671 <sup>*</sup> 40.7230 <sup>***</sup>	-	10.0360 <sup>*</sup> 10.0509 <sup>***</sup>	-
Al <sub>0,3</sub> Ga <sub>0,7</sub> As	7.7259 <sup>*</sup> 7.7433 <sup>***</sup>	-	-	40.3753 <sup>*</sup> 40.4658 <sup>***</sup>	-	9.9589 <sup>*</sup> 9.9831 <sup>***</sup>	-
Al <sub>0,5</sub> Ga <sub>0,5</sub> As	7.6646 <sup>*</sup> 7.6849 <sup>***</sup>	-	-	40.0679 <sup>*</sup> 40.1729 <sup>***</sup>	-	9.8777 <sup>*</sup> 9.9058 <sup>***</sup>	-
Al <sub>0,7</sub> Ga <sub>0,3</sub> As	7.6001 <sup>*</sup> 7.6199 <sup>***</sup>	-	-	39.7434 <sup>*</sup> 39.8462 <sup>***</sup>	-	9.7920 <sup>*</sup> 9.8195 <sup>***</sup>	-
Al <sub>0,9</sub> Ga <sub>0,1</sub> As	7.5321 <sup>*</sup> 7.5460 <sup>***</sup>	-	-	39.4002 <sup>*</sup> 39.4724 <sup>***</sup>	-	9.7013 <sup>*</sup> 9.7206 <sup>***</sup>	-
AlAs	7.4966	7.4 <sup>(a)</sup> 7.727 <sup>(c)</sup> 7.79 <sup>(f)</sup>	3.66 <sup>(d)</sup> 7.727 <sup>(e)</sup> 7.72 <sup>(m)</sup>	39.2211	44.10 <sup>(g)</sup> 44.34 <sup>(i)</sup> 45.6 <sup>(k)</sup> 44.278 <sup>(l)</sup> 41.05 <sup>(n)</sup>	9.6539	8.15 <sup>(g)</sup> 7.94 <sup>(i)</sup> 10.17 <sup>(k)</sup> 8.236 <sup>(l)</sup> 8.82 <sup>(n)</sup>

\* Nos calculs sans désordre.

\*\*\* Nos calculs avec désordre.

<sup>(a)</sup>Ref. [9], <sup>(b)</sup>Ref. [21], <sup>(c)</sup>Ref. [11], <sup>(d)</sup>Ref. [12], <sup>(e)</sup>Ref. [13], <sup>(f)</sup>Ref. [14], <sup>(g)</sup>Ref. [22]

<sup>(h)</sup>Ref. [23], <sup>(i)</sup>Ref. [24], <sup>(j)</sup>Ref. [25], <sup>(k)</sup>Ref. [26], <sup>(l)</sup>Ref. [27], <sup>(m)</sup>Ref. [18], <sup>(n)</sup>Ref. [19].

La figure III-3 illustre les variations des constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  et  $B$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  avec et sans désordre, qualitativement ces constantes élastiques montrent un comportement similaire. Sur le plan quantitatif, on constate

que la constante  $C_{11}$  est plus élevée que les constantes  $C_{12}$  et  $C_{44}$ . On remarque aussi que le module de compressibilité  $B$  est plus important que les constantes élastiques  $C_{12}$  et  $C_{44}$ .

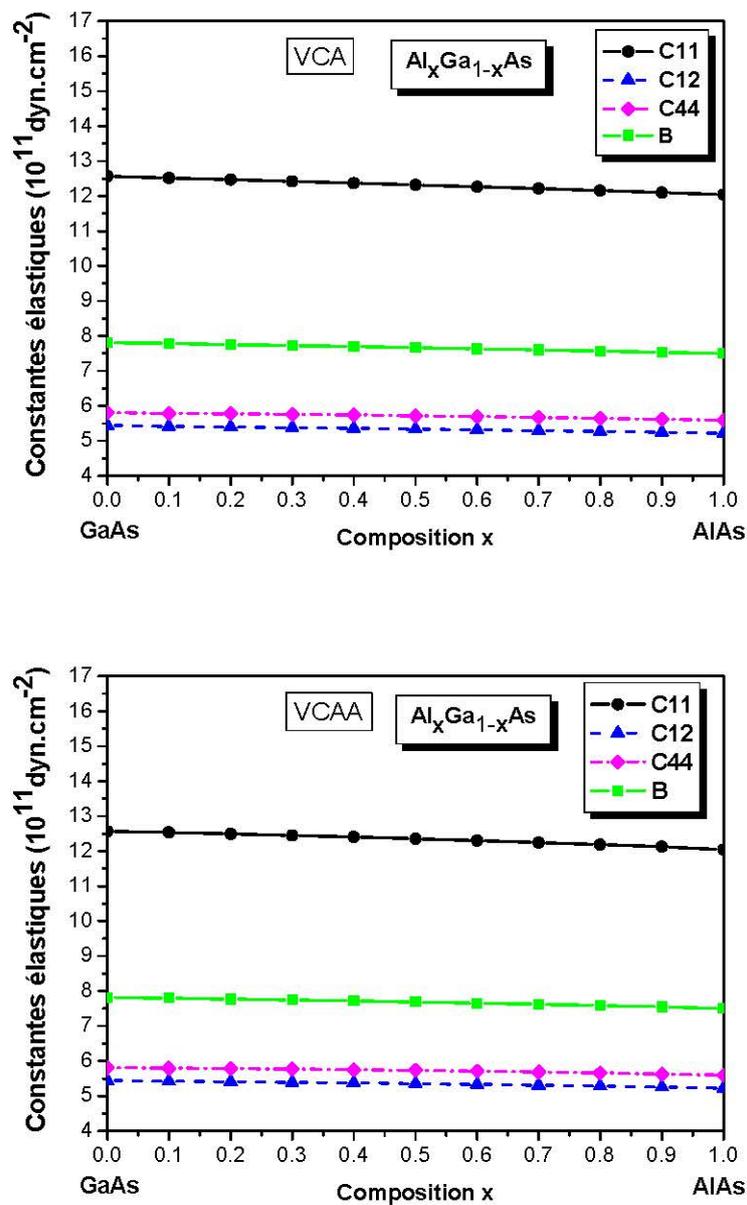


Figure III-3: Les variations des constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  et  $B$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ , avec et sans désordre.

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

Pour déterminer les valeurs des constantes de force  $\alpha$  et  $\beta$ , de l'alliage ternaire semiconducteur en tenant et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel, nous avons utilisé le modèle des orbitales liées de Harrison.

La figure III-4 représente la variation des constantes de force  $\alpha$  et  $\beta$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ . Cette figure, nous montre une diminution presque linéaire. La variation de ces constantes avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium sont similaire avec et sans désordre compositionnel. Mais la constante de force d'élongation  $\alpha$  est très élevée que celle de la constante de force de recourbement  $\beta$  sur tout l'intervalle allons de  $x = 0$  jusqu'à  $x = 1$ . On constate peut dire qu'il y'a une dilatation des liaisons. L'effet de désordre est clair et on ne peut pas le négligé (figure III-5).

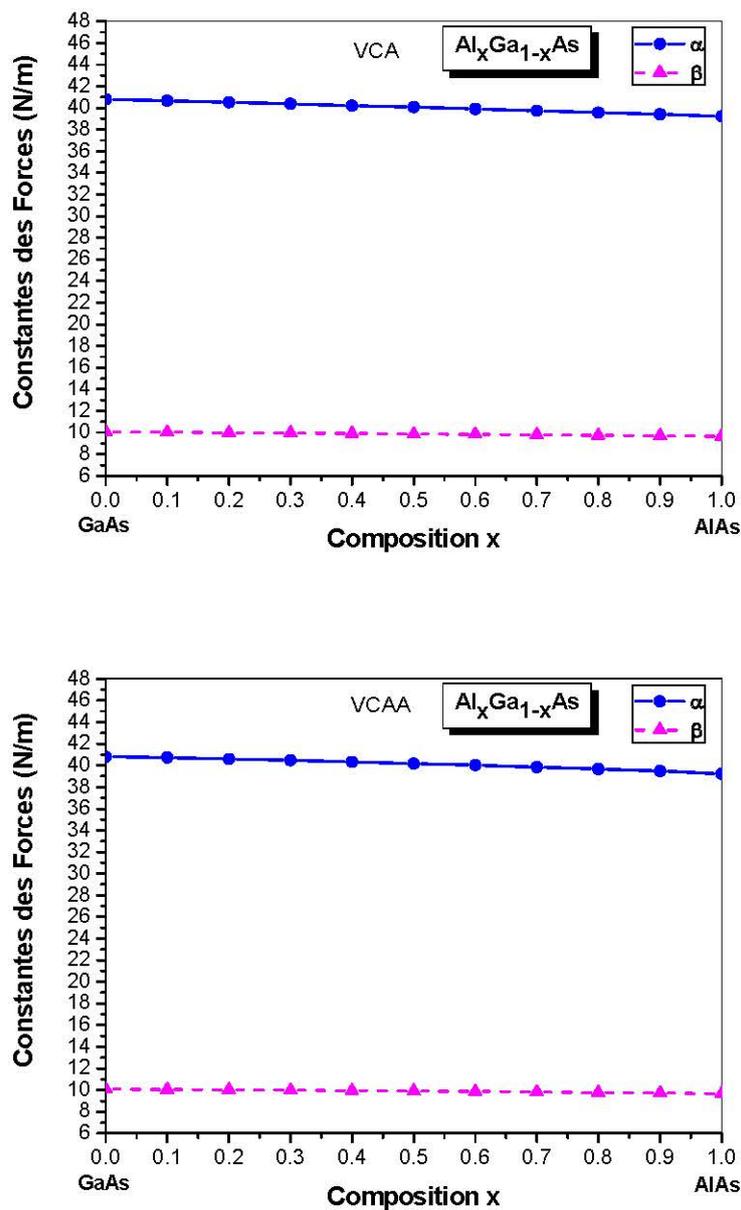


Figure III-4: La variation des constantes de force  $\alpha$  et  $\beta$  de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium, avec et sans désordre.

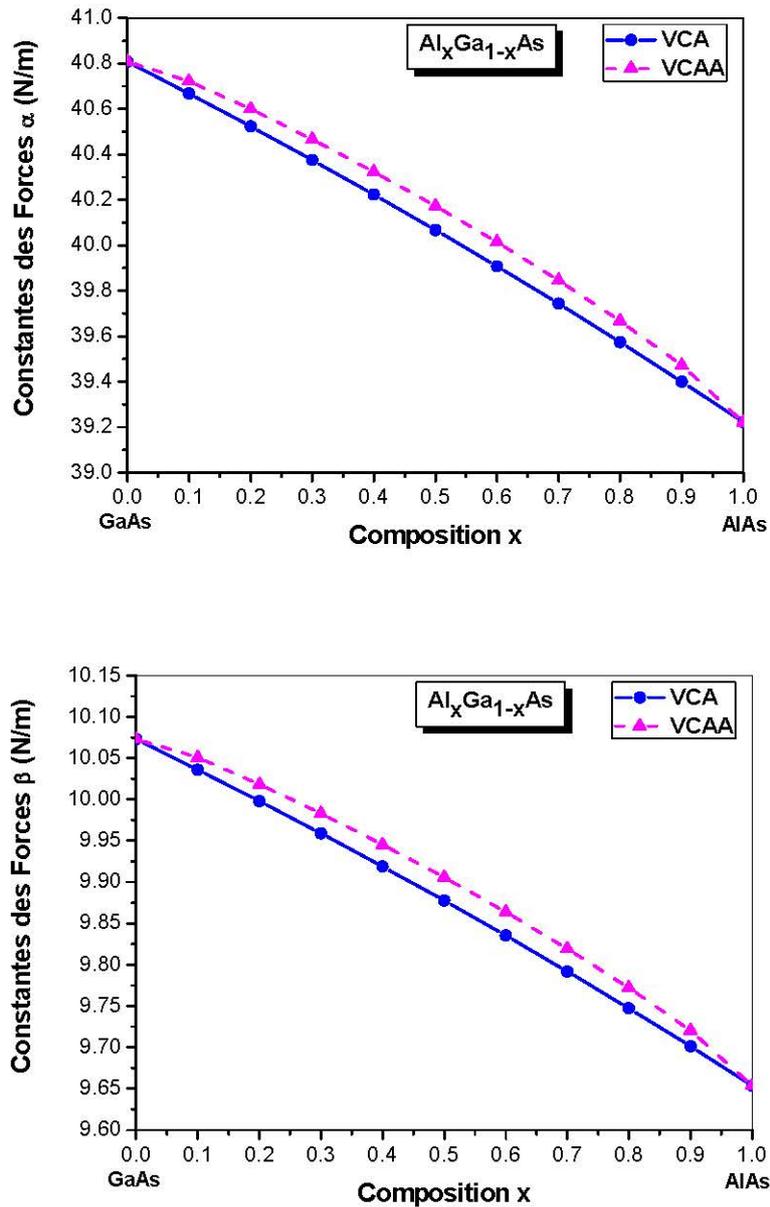


Figure III-5: Les variations des constantes de force  $\alpha$  et  $\beta$  de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium: sans désordre (—) et avec désordre (- - - -) de l'alliage ternaire.

### III-3-3-Les module de cisaillement G, de Young Y, coefficient de Poisson $\nu$ et le facteur d'anisotropie A :

Les calculs des modules de cisaillement G, de Young Y, du coefficient de Poisson  $\nu$  ainsi que le facteur d'anisotropie A, sont basés sur les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ .et  $C_{44}$ .des alliages [28].

Les valeurs des modules de cisaillement G et de Young Y, le coefficient de Poisson  $\nu$  et le facteur d'anisotropie A obtenues sont rassemblés dans le tableau III-4.

Tableau III-4: les modules de cisaillement (G), Young (Y) en ( $10^{11}$  dyne/cm<sup>2</sup>) le coefficient de Poisson  $\nu$  et le facteur d'anisotropie (A) de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ .

Matériaux	G ( $10^{11}$ dyne/cm <sup>2</sup> )		Y ( $10^{11}$ dyne/cm <sup>2</sup> )		$\nu$		A	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
GaAs	3.5636	3.25 <sup>(a)</sup> 3.64 <sup>(b)</sup> 4.66 <sup>(c)</sup>	9.2798	8.53 <sup>(a)</sup> 9.41 <sup>(b)</sup> 11.6 <sup>(c)</sup>	0.302026	0.312 <sup>(a)</sup> 0.293 <sup>(b)</sup> 0.24 <sup>(c)</sup>	0.613929	0.547 <sup>(a)</sup> 0.574 <sup>(b)</sup>
$Al_{0,1}Ga_{0,9}As$	3.5500* 3.5553***	-	9.2446** 9.2583***	-	0.302064* 0.302046***	-	0.613184** 0.613542***	-
$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$	3.5218* 3.5303**	-	9.1717** 9.1938***	-	0.302144* 0.302114**	-	0.611453** 0.612112***	-
$Al_{0,5}Ga_{0,5}As$	3.4921* 3.5020**	-	9.0950** 9.1206***	-	0.302230* 0.302195**	-	0.610556* 0.610731**	-
$Al_{0,7}Ga_{0,3}As$	3.4608* 3.4705**	-	9.0142** 9.0393***	-	0.302323* 0.302289**	-	0.610129* 0.610264**	-
$Al_{0,9}Ga_{0,1}As$	3.4278* 3.4346**	-	8.9290** 8.9465***	-	0.302424* 0.302399**	-	0.609995* 0.610010**	-
AlAs	3.4106	3.11 <sup>(a)</sup> 2.88 <sup>(b)</sup> 4.24 <sup>(c)</sup>	8.8845	8.22 <sup>(a)</sup> 7.66 <sup>(b)</sup> 10.8 <sup>(c)</sup>	0.302477	0.324 <sup>(a)</sup> 0.329 <sup>(b)</sup> 0.27 <sup>(c)</sup>	0.609955	0.543 <sup>(a)</sup> 0.527 <sup>(b)</sup>

\* Nos calculs sans désordre.

\*\*\* Nos calculs avec désordre.

(a)Ref. [14], (b)Ref. [15], (c)Ref. [18].

Dans ce tableau III-4, nous avons inséré les calculs obtenus des modules de cisaillement  $G$  et de Young  $Y$  en ( $\text{dyne}/\text{cm}^2$ ), le coefficient de Poisson  $\nu$  et le facteur d'anisotropie  $A$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec d'autres valeurs disponibles. En faisant la comparaison entre nos calculs obtenus avec d'autres résultats connus dans les littératures, nous pouvons dire que nos calculs sont d'une manière générale en accord avec ces travaux disponibles.

Les variations des modules de cisaillement  $G$  et de Young  $Y$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , sont représentés dans les figures III-6 et III-7. D'après ces figures, Nous observons clairement une diminution non linéaire de  $G$  et  $Y$  avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium dans l'intervalle  $[0-1]$ . Ces variations des deux modules en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium ont un comportement similaire avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Et l'effet du désordre est presque négligeable.

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

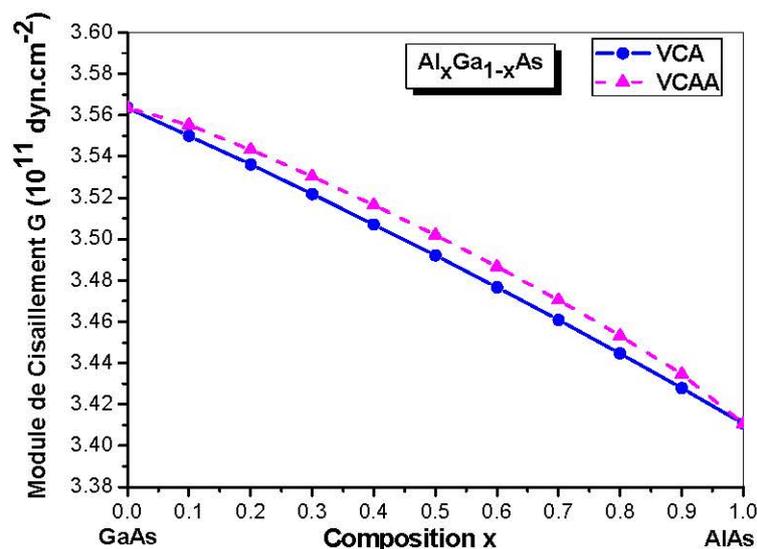


Figure III-6: La variation du module de cisaillement ( $G$ ) en ( $\text{dyne}/\text{cm}^2$ ), avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

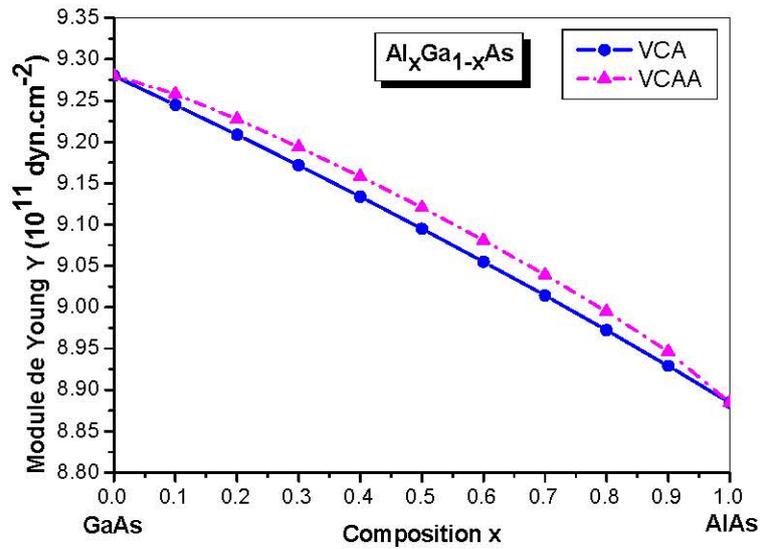


Figure III-7: La variation du module de Young ( $Y$ ) en ( $\text{dyne} / \text{cm}^2$ ), avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

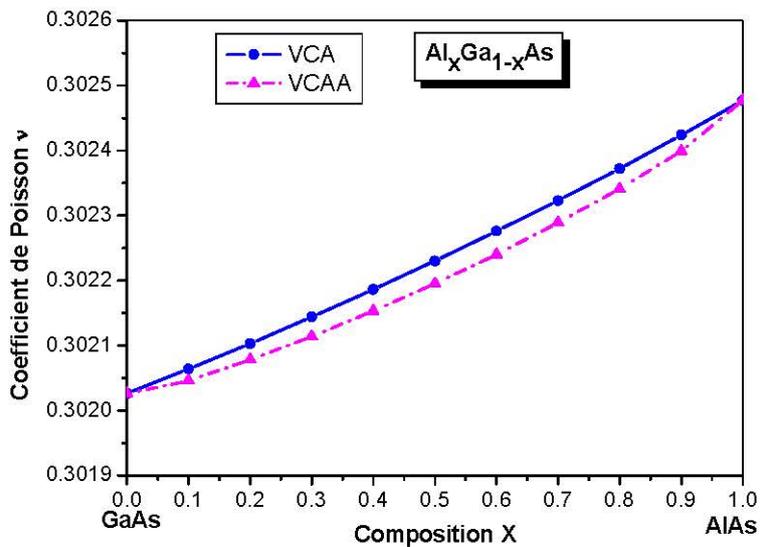


Figure III-8: La variation de coefficient de Poisson  $\nu$  avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

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

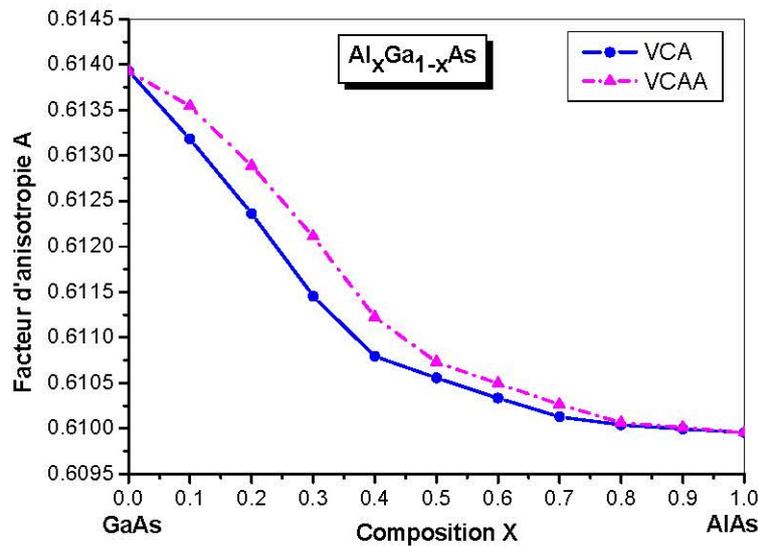


Figure III-9: La variation du facteur d'anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$ , en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

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

Sans désordre :

$$G = 3.5635 - 0.13278x - 0.02001x^2 \quad \text{(VCA)} \quad \text{(III-13)}$$

$$Y = 9.27951 - 0.34319x - 0.05152x^2 \quad \text{(VCA)} \quad \text{(III-14)}$$

Avec désordre :

$$G = 3.56405 - 0.09354x - 0.05802x^2 \quad \text{(VCAA)} \quad \text{(III-15)}$$

$$Y = 9.28094 - 0.24156x - 0.15001x^2 \quad \text{(VCAA)} \quad \text{(III-16)}$$

### III-3-4-Le facteur de l'ionicté $f_i$ et le paramètre de Kleinman $\xi$ :

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 [29].

Le calcul du facteur de l'ionicté exige la connaissance de la polarité donnée par la relation suivante [30]:

$$f_i = \left( 1 - \left( 1 - \alpha_p \right)^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{(III-17)}$$

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

Le tableau III-5 illustre les valeurs calculées du Facteur de l'ionicté  $f_i$  et du paramètre de Kleinman  $\xi$  de l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ , on note que nos résultats sont en accord avec d'autres résultats disponibles.

Les figures III-10 et III-11 représentent les variations du facteur d'ionicté  $f_i$  et du paramètre de Kleinman  $\xi$  successivement avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

La figure III-10 qui représente la variation du facteur d'ionicté  $f_i$  avec et sans désordre de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium. On remarque que l'ionicté  $f_i$  augmente avec l'augmentation de la concentration de l'Aluminium, on note aussi que l'effet de désordre fait diminuer ce paramètre.

La figure III-11 représente la variation du paramètre de Kleinman  $\xi$  avec et sans désordre de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium. On peut constater que la variation des valeurs du paramètre de Kleinman  $\xi$  diminue non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium avec et sans désordre. Même constatation a été faite pour le paramètre de Kleinman  $\xi$ , que l'influence de l'effet du désordre est claire et on ne peut pas le négligé. Ce dernier augmente le paramètre de Kleinman  $\xi$ .

Tableau III-5: Facteur de l'ionicité  $f_i$  et le paramètre de Kleinman  $\xi$  de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$ .

Matériaux	$f_i$		$\xi$	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres
GaAs	0.379567	0.310 <sup>(a)</sup>	0.59587	0.530 <sup>(c)</sup>
		0.47 <sup>(b)</sup>		0.500 <sup>(g)</sup>
		0.31 <sup>(c)</sup>		0.506 <sup>(h)</sup>
		0.316 <sup>(d)</sup>		0.600 <sup>(i)</sup>
		0.37 <sup>(e)</sup>		0.597 <sup>(j)</sup>
		0.339 <sup>(f)</sup>		
Al <sub>0,1</sub> Ga <sub>0,9</sub> As	0.382866*	-	0.59531*	-
	0.381306***		0.59558***	
Al <sub>0,3</sub> Ga <sub>0,7</sub> As	0.389692*	-	0.59400*	-
	0.387205***		0.59450***	
Al <sub>0,5</sub> Ga <sub>0,5</sub> As	0.396837*	-	0.59343*	-
	0.393998***		0.59350***	
Al <sub>0,7</sub> Ga <sub>0,3</sub> As	0.404323*	-	0.59331*	-
	0.401594***		0.59334***	
Al <sub>0,9</sub> Ga <sub>0,1</sub> As	0.412177*	-	0.59347*	-
	0.410296***		0.59341***	
AlAs	0.416249	0.274 <sup>(a)</sup>	0.59358	0.580 <sup>(c)</sup>
		0.44 <sup>(b)</sup>		0.459 <sup>(g)</sup>
		0.367 <sup>(c)</sup>		0.592 <sup>(h)</sup>
		0.375 <sup>(d)</sup>		0.595 <sup>(j)</sup>
		0.37 <sup>(e)</sup>		
		0.415 <sup>(f)</sup>		

\* Nos calculs sans désordre.

\*\*\* Nos calculs avec désordre.

<sup>(a)</sup>Ref. [31], <sup>(b)</sup>Ref. [32], <sup>(c)</sup>Ref. [33], <sup>(d)</sup>Ref. [34], <sup>(e)</sup>Ref. [35], <sup>(f)</sup>Ref. [36], <sup>(g)</sup>Ref. [12]<sup>(h)</sup>Ref. [15], <sup>(i)</sup>Ref. [37], <sup>(j)</sup>Ref. [19]

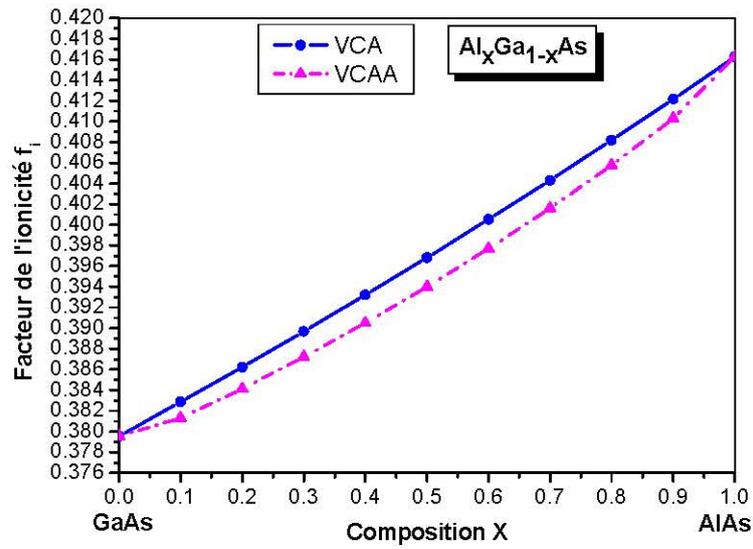


Figure III-10: La variation de facteur d'ionicté  $f_i$  avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de concentration  $x$  de l'Aluminium.

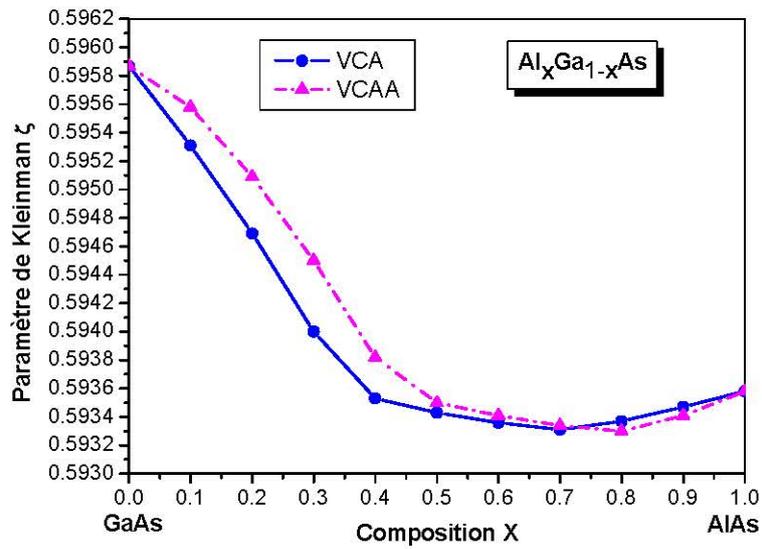


Figure III-11: La variation du facteur de Kleinman  $\xi$  avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de concentration  $x$  de l'Aluminium.

## Références :

- [1] B. H. Lee, *J. Appl. Phys.* **44**, 2984 (1970).
- [2] C. G. Hodgins, J. C. Irwin, *Phys. Stat. Sol. (a)* **28**, 647 (1975).
- [3] N. Richard, Rapport CEA-R-6603 Actinides et terres rares sous pression: approche pseudopotentiel CEA/DAM. Direction Ile de France, 2002.
- [4] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, université de Constantine (Algérie) 2006.
- [5] A. Mujica, A. Munoz, S. Radescu, R. J. Needs, *Phys. Stat. Sol. (b)* **211**, 345 (1999).
- [6] T. Kobayasi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci., Tohoku. Univ.* **2**, 7 (1993).
- [7] J. M. Baranowski, *J. Phys. C* **17**, 6287 (1984).
- [8] P. Herve and L. K. J. Vandamme, *J. Appl. Phys.* **77**, 5476 (1995).
- [9] O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook (from CDROM) third Ed.*, 2004.
- [10] 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); *Semiconductors Group IV Elements and III -V Compounds* (Springer, Berlin, 1991)
- [11] R. Zallen. In "Handbook on Semiconductors," (T. S. Moss, ed.), Vol. 1, Chap. 1. North-Holland. Amsterdam (1982).
- [12] A.-B. Chen, Arden Sher and W. T. Yost, in *The Mechanical Properties of Semiconductors, semiconductors and semimetals*, edited by Katherine T. Faber and Kevin J. Malloy, Academic Press, INC. London 1992.
- [13] An-Ban Chen and Arden Sher, *Semiconductor Alloys, Physics and Materials Engineering*, Plenum Press, New York and London, 1995.
- [14] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors* (2005).
- [15] S. Q. Wang and H. Q. Ye, *phys. stat. sol. (b)* **240**, 45 (2003).
- [16] O. H. Nielsen and R. M. Martin, *Phys. Rev. B* **32**, 3792 (1985).
- [17] N. Chetty, A. Munoz, and R. M. Martin, *Phys. Rev. B* **40**, 11934 (1989).
- [18] Marvin J. Weber, *Handbook of optical materials* 2003.
- [19] N. Bouarissa, R. Bachiri, *Materials Chemistry and Physics* **78**, 271 (2002).
- [20] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), *Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol. 2*, World Scientific, Singapore, 1999.
- [21] 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).
- [22] V. Kumar, *J. Phys. Chem. Solids* **61**, 91 (2000).

- [23] H. Neumann, *Cryst. Res. Technol.* **20**, 773 (1985).
- [24] H. Neumann, *Cryst. Res. Technol.* **24**, 325 (1989).
- [25] A.S. Verma, *Physics Letters A* **372**, 7196 (2008).
- [26] A. S. Verma, *Semiconductors* **50**, 795 (2016).
- [27] R. R. Reddy, Y.N. Ahammed, P. A. Azeem, K. R. Gopal, B. S. Devi and T. V. R. Rao, *Indian J. Phys.* **77A**, 237 (2003).
- [28] M. W. Barsoum, T. El-Raghi, W.D. poter, H. Wang, S. chakra borty, *J. Appl. phys.* **88**, 6313 (2000).
- [29] F. Khediri, mémoire de magister, Université de Tébessa, Algérie (2012).
- [30] W. A. Harrison, S. Ciraci, *Phys. Rev. B* **10**, 1516 (1974).
- [31] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in semiconductors*, Academic Press, New York, 1973.
- [32] W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* **8**, 4487 (1973).
- [33] N. E. Christensen, S. Satpathy, and Z. Pawlowska, *Phys. Rev. B* **36**, 1032 (1987).
- [34] A. Garcia and M. L. Cohen, *Phys. Rev B* **47**, 4215 (1993).
- [35] C. A. Coulson, L. B. Redeï, and D. Stocker, *Proc. Roy. Soc.* **270**, 352 (1962).
- [36] Hazem Abu-Farsakh and Abdallah Qteish, *Phys. Rev. B* **75**, 085201 (2007).
- [37] R. M. Martin, *Phys. Rev. B* **1**, 4005 (1970).



## *Conclusion générale*

## Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés élastiques des composés binaires  $GaAs$  et  $AlAs$  et leurs alliages ternaires semiconducteurs  $Al_xGa_{1-x}As$ .

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  $C_{44}$ ), et le module de compressibilité  $B$ , le module de cisaillement  $G$ , le module de Young  $Y$ , le coefficient de poisson  $\nu$ , le facteur d'anisotropie  $A$ , l'ionicté  $f_i$ , le paramètre de Kleinman  $\xi$  et les constantes de force  $\alpha$  et  $\beta$  pour les composés binaires et leurs alliages ternaires.

La dépendance de la concentration  $x$  de l'Aluminium sur les propriétés élastiques de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  et ces composés binaires  $GaAs$ ,  $AlAs$  a été étudiée sur toute la gamme de la composition [0-1].

Une attention particulière a été accentuée sur l'effet du désordre sur les propriétés élastiques de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  et ses composés binaires  $GaAs$ ,  $AlAs$ .

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

- Les constants élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ , les modules de compressibilité  $B$ , de cisaillement  $G$ , de Young  $Y$ , le facteur d'anisotropie  $A$  et le facteur de Kleinman  $\xi$  diminuent non linéairement avec l'augmentation de la fraction molaire «  $x$  » de l'Aluminium.
- qualitativement les constants élastiques montrent un comportement similaire mais sur le plan quantitatif on constate que la constant  $C_{11}$  est plus élevé que les constants  $C_{12}$  et  $C_{44}$  et  $B$ .
- Le coefficient de poisson  $\nu$  et le facteur de l'ionicté  $f_i$  augmentent non linéairement avec l'augmentation de la concentration de l'Aluminium.
- Les constantes de force  $\alpha$  et  $\beta$  diminuent presque linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium, et la constante de force d'élongation  $\alpha$  est très élevée que celle de la constante de force de recourbement  $\beta$  sur tout l'intervalle allons de  $x = 0$  jusqu'à  $x = 1$ .

- L'effet du désordre affecte faiblement les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ , les modules de compressibilité  $B$ , de cisaillement  $G$ , de Young  $Y$  mais il a une petite influence sur le facteur d'anisotropie  $A$ , les modules de cisaillement  $G$  et de Young  $Y$ . Cet effet fut décroître les valeurs de coefficient de Poisson  $\nu$  et le facteur de l'ionictéi  $f_i$ , par contre il fut augmenter les valeurs des constants élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ , les modules de compressibilité  $B$ , de cisaillement  $G$ , de Young  $Y$ , le facteur d'anisotropie  $A$ , et le facteur de Kleinman  $\xi$ .

En général, nos calculs sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et les autres travaux disponibles.