

*République Algérienne Démocratique et Populaire*

*Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique*



*Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès*

*Faculté de Génie Electrique*

*Département d'Electronique*

# THÈSE

Présentée par

**Mr. BACHIR BOUIADJRA Bachir**

Pour l'obtention du diplôme de Doctorat en Sciences

**Spécialité : Electronique**

**Option : Microélectronique**

## Thème

**Etude des propriétés structurales, électroniques et optiques des composés In(Ga)N et des superréseaux InN/GaN suivant les deux orientations (001) et (110) appliquées pour dispositifs optoélectroniques**

Soutenue le : 29 /09 /2021

Devant le jury composé de :

Président	Mr. Abid Hamza	Professeur	UDL/ Sidi Bel Abbès
Rapporteur	Mr. Mehnane Noureddine	Professeur	UDL/ Sidi Bel Abbès
Examineur	Mr. Arbouche Omar	Professeur	Université de Saïda
Examineur	Mr. Chercheb Youcef	M.Conf.A	Université de Relizane
Invité	Mr. Beloufa Abbès	M.Conf.A	Université de Mascara

*Année universitaire 2020-2021*

# Remerciements

*Je remercie en premier lieu mon Dieu le tout puissant qui m'a éclairé le bon chemin et de m'avoir accordé la puissance, la volonté et la santé pour terminer ce travail.*

*Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire des Matériaux Appliqués (AML) de l'université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès.*

*Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à mon directeur de thèse Monsieur **Mehnane Noureddine**, Professeur à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès pour ses conseils, sa disponibilité et son soutien durant ces années. Je le remercie pour la confiance qu'il m'a portée en acceptant de diriger mes recherches.*

*Je tiens à remercier Monsieur **Abid Hamza**, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbès, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance de cette thèse.*

*Mes plus profonds remerciements vont à Monsieur **Arbouche Omar**, Professeur à l'Université Moulay Tahar de Saïda, Monsieur **Cherheb Youcef**, maitre de conférences à l'Université Ahmed Zabana de Relizane et Monsieur **Beloufa Abbès**, maitre de conférences à l'Université Mustapha Stambouli de Mascara qui ont accepté d'examiner ce travail et de participer au jury. Je suis particulièrement honorée à leurs présences dans ce jury.*

# ***Dédicace***

*Ce travail est dédié*

*A la mémoire de mon très cher père et mon frère Abd Elmalek*

*A ma très chère mère*

*A ma femme et mes enfants*

*A mon frère Abd Elhakim et mes sœurs*

*A mes amis*

*A ceux qui m'ont aidé de près ou de loin*

# ***Table des matières***

<b>Dédicace.....</b>	<b>I</b>
<b>Remerciement.....</b>	<b>li</b>
<b>Table des matières.....</b>	<b>lii</b>
<b>Liste des tableaux.....</b>	<b>Vi</b>
<b>Liste des figures.....</b>	<b>Xi</b>
<b>Introduction générale.....</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre I : Les matériaux InN, GaN et InGaN.....</b>	<b>4</b>
Introduction.....	4
I-1 Propriétés structurales de l'InN, GaN.....	5
I-1-1 Les structures cristallines et la Zone de Brillouin.....	5
I-1-2 Les paramètres de mailles.....	8
I-1-3 Les coefficients élastiques.....	9
I-1-4 Les coefficients de dilatation thermique.....	10
I-2 Propriétés électroniques.....	11
I-2-1 Structure de bandes.....	12
I-2-2 Propriétés de transport.....	14
I-3 Propriétés optiques.....	14
I-3-1 Indice de réfraction.....	15
I 3-2 Coefficients d'absorption.....	15
I-4 Propriétés du composé ternaire InGaN.....	16
I-4-1 Contraintes dans les couches de nitrure.....	16
I-4-1-1 Défauts structuraux dans le GaN.....	18
I-4-1-2 Défauts structuraux dans l'InN.....	18
I-4-2 Variation du gap $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la fraction de mole $x$ .....	19
I-4-3 Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la pression.....	19

I-4-4	Paramètre de courbure.....	21
	Références bibliographiques.....	22
<b>Chapitre II</b>	<b>Les puits quantiques et super-réseaux.....</b>	<b>25</b>
II-1	Introduction.....	25
II-2	Les superréseaux semi-conducteurs.....	26
II-2-1	Technique de fabrication des super-réseaux.....	26
II-3	Puits et barrières de potentiel.....	27
II-4	Les superréseaux polaires.....	29
II-5	Symétrie des superréseaux.....	32
II-6	Contraintes et déformations.....	33
	Références bibliographiques.....	35
<b>Chapitre III</b>	<b>Méthode de calcul <i>FP-LMTO</i>.....</b>	<b>37</b>
III-1	Introduction.....	37
III-2	Théorie de la fonctionnelle de la densité ( <i>DFT</i> ).....	39
III-3	Les approximations.....	41
III-3-1	Approximation de la densité locale ( <i>LDA</i> ).....	41
III-3-2	Approximation du gradient généralisé ( <i>GGA</i> ).....	42
III-4	La méthode <i>FP-LMTO</i> .....	43
III-4-1	Instruction de base.....	45
III-4-2	Fonctions d'ondes.....	47
III-4-3	Le cycle auto-cohérent.....	47
	Références bibliographiques.....	51
<b>Chapitre IV</b>	<b>Résultats et discussions.....</b>	<b>53</b>
IV-1	Propriétés structurales et électroniques des binaires InN et GaN et du ternaire InGaN.....	54
IV-1-1	Détails numériques.....	54
IV-1-2	Etude structurale.....	55
IV-1-3	Propriétés électroniques.....	60

IV-1-3-1	Structures de bandes.....	60
IV-1-3-2	Paramètre de courbure.....	64
IV-1-3-3	Densités d'états électroniques.....	68
IV-2	Les superréseaux SL(m,n).....	72
IV-2-1	La structure cristalline des superréseaux InN/GaN (001) et (110).....	72
IV-2-2	Propriétés structurales et électroniques des superreseaux (SLs) InN/GaN.....	75
IV-2-2-1	Détails numériques.....	76
IV-2-2-2	Les propriétés structurales des superreseaux InN/GaN.....	77
IV-2-2-3	Les propriétés électroniques des superreseaux InN/GaN.....	83
IV-2-2-3-1	Structures de bandes électroniques.....	83
IV-2-2-3-2	Densités d'états.....	88
IV-2-3	Propriétés optiques des superreseaux (SLs) InN/GaN.....	87
IV-3	Conclusion.....	96
	Références bibliographiques.....	97
	<b>Conclusion générale.....</b>	<b>99</b>

# LISTE DES TABLEAUX

## Chapitre I

<b>Tableau I-1</b> : Paramètres de maille $a_0$ des nitrures dans la phase cubique calculés et déterminés expérimentalement.....	8
<b>Tableau I-2</b> : Constantes élastiques des nitrures dans la phase cubique.....	10
<b>Tableau I-3</b> : Coefficient de dilatation thermique des nitrures dans la phase hexagonale..	11
<b>Tableau I-4</b> : Paramètres de Varshni et gap à 0K et 300K du GaN et de l'InN en phase cubique.....	14
<b>Tableau I-5</b> : Propriétés électriques expérimentales des matériaux GaN et InN à (300K)	14
<b>Tableau I-6</b> : Paramètres $g$ et $d$ du GaN et de l'InN en meV/kbar.....	20

## Chapitre IV

<b>Tableau IV-1</b> Le rayon du sphère muffin tin RMTS (unités atomiques).....	54
<b>Tableau IV-2</b> : Les paramètres structuraux pour tous les composés binaires GaN, InN et les ternaires $In_xGa_{1-x}N$ . $V_0$ est le volume d'équilibre. $a_0$ le paramètre de maille à l'équilibre pour les binaires. $B_0$ est le module de rigidité et $B_0'$ est sa dérivée.....	57
<b>Tableau IV-3</b> : Energies de bande dans la phase zinc blende des composés binaires GaN et InN et ternaires.....	61
<b>Tableau IV-4</b> : Paramètre de courbure calculé $b$ (bowing) des gaps directs de $In_xGa_{1-x}N$ . Déformation de volume (VD), échange de charge (CE) et relaxation structurale (SR). Toute les valeurs sont en eV.....	66
<b>Tableau IV-5</b> Le rayon du sphère muffin tin RMTS (unités atomiques) pour les SLs.....	76
<b>Tableau IV-6</b> : Les paramètres structuraux pour superréseaux. $V_0$ est le volume d'équilibre. $a_0$ le paramètre de maille à l'équilibre pour les binaires. $B_0$ est le module de rigidité . $a_{SL}$ est la constante du réseau du SL. $V_0 = (c_0 / a_0)$ . $a_0^3 / 4$ est le volume des superréseaux avec ( $a_0 = \sqrt{2} \cdot a_{0,SL}$ ).....	80
<b>Tableau IV-7</b> : Les gaps entre les différents points de haute symétrie des SLs $InN_m / GaN_n$ suivant les deux axes de croissance (001) et (110).....	86
<b>Tableau IV-8</b> : Constantes optiques statiques calculées $\epsilon_1(0)$ , indice de réfraction statique $n(0)$ et les points critiques pour l'InN et GaN.....	95
<b>Tableau IV-9</b> : Constantes optiques statiques calculées $\epsilon_1(0)$ , indice de réfraction statique $n(0)$ et les point critiques pour SL $(InN)_1 / (GaN)_n$ .....	100

# LISTE DES FIGURES

## Chapitre I

<b>Figure I-1 :</b> Paramètre de maille $a_0$ de la structure zinc blende. $a_0/2$ représente la distance inter plans. Les cercles gris représentent des cations et les cercles noirs les anions.....	6
<b>Figure I-2 :</b> Représentation dans un réseau bidimensionnel des deux premières zones de Brillouin, notées 1 et 2 sur la figure.....	7
<b>Figure I-3 :</b> Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points de haute symétrie.....	7
<b>Figure I-4 :</b> Valeur de l'énergie de la bande interdite en fonction du paramètre de maille pour les semi-conducteurs les plus usuels.....	9
<b>Figure I-5 :</b> Diagramme des énergies pour un matériau.....	11
<b>Figure I-6 :</b> Structures de bandes de GaN et InN calculées dans les deux phases.....	13
<b>Figure I-7 :</b> Evolution du gap d'énergie interdite du GaN en fonction de la pression.....	20

## Chapitre II

<b>Figure II-1 :</b> Représentation schématique d'un super-réseau de puits quantiques.....	28
<b>Figure II-2 :</b> Structure de bande d'un super-réseau (a) type I. (b) type II.....	28
<b>Figure II-3 :</b> Vues schématiques du plan polaire, des plans non polaires et d'un plan semi-polaire.....	30
<b>Figure II-4 :</b> Structure de bandes d'un SL a) polaire avec l'effet du champ électrique interne b) semi-polaire c) non polaire.....	30
<b>Figure II-5 :</b> Variation de la bande interdite pour les SL $m\text{InN}/n\text{GaN}$ en fonction de la composition $x$ , comparée à celle de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ présenté en courbe pointillé.....	31
<b>Figure II-6 :</b> Bandes interdites calculées, pour les SL $m\text{InN}/n\text{GaN}$ par rapport aux épaisseurs de la barrière (a) et du puits (b) exprimées en nombre de monocouches (ML).....	32

## Chapitre III

<b>Figure III-1:</b> Profils des Potentiels complets (FP) et Muffin-Tin (MT).....	44
<b>Figure III-2:</b> Cycle auto-cohérent du code FP-LMTO.....	49

## Chapitre IV

<b>Figure IV-1 :</b> Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour ( $x=0.25, 0.125, 0.083, 0.0625$ ).....	56
<b>Figure IV-2:</b> Variation de l'énergie totale en fonction du volume (a) GaN (b) InN.....	56
<b>Figure IV-3 :</b> Variation du paramètre de maille par rapport aux fractions de $x$ dans les alliages.....	58



<b>Figure IV-4</b> : Variation de module de rigidité en fonction de x dans les alliages.....	59
<b>Figure IV-5</b> : Variation des gaps en fonction de l'In dans les alliages massifs.....	60
<b>Figure IV-6</b> : Structures de bandes du GaN et InN massif à l'équilibre.....	61
<b>Figure IV-7</b> : Structures de bandes de $In_{0,25} Ga_{0,75}N$ .....	62
<b>Figure IV-8</b> : Structures de bandes de $In_{0,125} Ga_{0,875}N$ .....	62
<b>Figure IV-9</b> : Structures de bandes de $In_{0,083} Ga_{0,916}N$ .....	63
<b>Figure IV-10</b> : Structures de bandes de $In_{0,0625} Ga_{0,9375}N$ .....	63
<b>Figure IV-11</b> : Variation du paramètre de bowing en fonction de la fraction de l'In dans les alliages massifs.....	67
<b>Figure IV-12</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle des composés InN et GaN.....	68
<b>Figure IV-13</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour $In_{0,25}Ga_{0,75}N$ .....	69
<b>Figure IV-14</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour $In_{0,125}Ga_{0,875}N$ .....	69
<b>Figure IV-15</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour $In_{0,083}Ga_{0,916}N$ .....	70
<b>Figure IV-16</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour $In_{0,625}Ga_{0,9375}N$ .....	70
<b>Figure IV-17</b> : Représentation du semi-conducteur massif et du superréseau SL avec une monocouche InN et différents nombres de monocouches de GaN. L'ensemble des vecteurs de translations primitives $a_x$ , $a_y$ et $a_z$ des SLs sont également représentés sur cette figure. <b>(a)</b> SLs (001) et <b>(b)</b> SLs (110).....	73
<b>Figure IV-18</b> : La zone de Brillouin et les points de haute symétrie de la cellule tétragonale dans l'axe de croissance (001) et (110) du SLs (m,n).....	75
<b>Figure IV-19</b> : Variation de l'énergie totale du SL (1,3) en fonction du volume suivant l'orientation (001).....	77
<b>Figure IV-20</b> : Variation de l'énergie totale du SL (1,3) en fonction du volume suivant l'orientation (110).....	77
<b>Figure IV-21</b> : Variation de l'énergie totale du SL (1,5) en fonction du volume suivant l'orientation (001).....	78
<b>Figure IV-22</b> : Variation de l'énergie totale du SL (1,5) en fonction du volume suivant l'orientation (110).....	78
<b>Figure IV-23</b> : Variation de l'énergie totale du SL (1,7) en fonction du volume suivant l'orientation (001).....	79
<b>Figure IV-24</b> : Variation de l'énergie totale du SL (1,7) en fonction du volume suivant l'orientation (110).....	79
<b>Figure IV-25</b> : Variation du paramètre de réseau en fonction de de nombre de monocouhes GaN dans les SLs.....	81
<b>Figure IV-26</b> : Variation de module de rigidité en fonction de nombre de monocouhes GaN dans les SLs.....	81

<b>Figure IV-27</b> : Structure de bandes électronique des SLs $\text{InN}_1/\text{GaN}_1$ suivant les deux orientations (001) et (110).....	82
<b>Figure IV-28</b> : Structure de bandes électronique des SLs $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ suivant les deux orientations (001) et (110).....	83
<b>Figure IV-29</b> : Variation des gaps d'énergies ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) en fonction du nombre de monocouches des SLs $\text{InN}/\text{GaN}_n$ , pour les orientations (001) et (110).....	85
<b>Figure IV-30</b> : Variation des gaps d'énergies en fonction du nombre $n$ de monocouches dans le super-réseau $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ ( $m$ est fixé à 1), (a) pour les SLs (001), (b) pour les SLs (110).....	85
<b>Figure IV-31</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $n = 1$ et $m = 1$ ).....	87
<b>Figure IV-32</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $m = 1$ et $n = 3$ ).....	88
<b>Figure IV-33</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $m = 1$ et $n = 5$ ).....	89
<b>Figure IV-34</b> : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $m = 1$ et $n = 7$ ).....	90
<b>Figure IV-35</b> : Parties imaginaires des binaires $\text{InN}$ et $\text{GaN}$ .....	93
<b>Figure IV-36</b> : Parties réelles des binaires $\text{InN}$ et $\text{GaN}$ .....	94
<b>Figure IV-37</b> : Indices de réfraction $n(\omega)$ pour l' $\text{InN}$ et $\text{GaN}$ .....	94
<b>Figure IV-38</b> : Coefficients d'absorption $\alpha(\omega)$ pour l' $\text{InN}$ et $\text{GaN}$ .....	95
<b>Figure IV-39</b> : Parties imaginaires (a) et parties réelles (b) des SLs $(\text{InN})_1 / (\text{GaN})_n$ avec $n = 3,5,7$ dans les deux axes de croissance.....	96
<b>Figure IV-40</b> : Indices de réfraction $n(\omega)$ pour SLs $(\text{InN})_1 / (\text{GaN})_n$ avec $n = 3,5,7$ dans les deux axes de croissance.....	98
<b>Figure IV-41</b> : Coefficients d'absorption $\alpha(\omega)$ pour SLs $(\text{InN})_1 / (\text{GaN})_n$ avec $n = 3,5,7$ dans les deux axes de croissance.....	98

# Introduction générale

Les semi-conducteurs nitrurés des éléments du groupe III, tels que Nitrure de gallium et nitrure d'indium et leurs alliages ternaires ont suscité l'intérêt des expérimentateurs ainsi que des théoriciens. Ces matériaux sont activement étudiés parce qu'ils représentent une nouvelle catégorie de matériaux possédant des propriétés uniques: un large gap d'énergie interdite, de fortes liaisons interatomiques ou encore une forte conductivité thermique qui les rendent très intéressants pour la construction de dispositifs optoélectroniques à haute température et grande puissance [1]. De plus, la qualité des nitrures fut grandement améliorée par la technique de dépôt chimique en phase vapeur à base de métallo-organiques (MOCVD) produisant des couches d'InGaN et d'AlInN avec une faible densité de porteurs libres. Il a été alors découvert que le gap d'énergie interdite de l'InGaN diminuait rapidement avec l'incorporation d'indium, provoquant un paramètre de courbure de bande inhabituellement grand [2]. Par la suite, l'avancée majeure est venue d'échantillons fabriqués par épitaxie par jet moléculaire (MBE) présentant une bonne qualité cristalline, c'est-à-dire avec une faible concentration de porteurs libres ( $<10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) et une grande mobilité électronique ( $>2000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ) [3].

Optimiser et exploiter le potentiel du GaN et de l'InN pour d'autres applications optoélectroniques et la technologie des cellules solaires, les super-réseaux (SL) sont l'un des moyens les plus simples d'adapter les propriétés électroniques et optiques des matériaux. Notamment, il a été démontré que les systèmes super-réseaux peuvent être très utiles pour l'étude théorique. La cause en est que les monocouches atomiques de GaN et InN dans les SLs InN / GaN sont accroitraient séparément et avec la largeur voulue pour chaque couche [4]. On trouve dans la littérature de nombreuses études montrant que le système InN / GaN rend possible la conception de divers dispositifs à hétérostructure à base d'InN [5, 6]. En effet, sa bande interdite peut couvrir tout le spectre solaire uniquement en modifiant le nombre de monocouches de GaN dans les SLs InN / GaN. Il est bien connu que dans les cristaux, les orientations ont un impact significatif sur leurs propriétés et leurs applications potentielles. Ils peuvent être générés artificiellement pendant le

processus de croissance, mais ils peuvent aussi se produire naturellement car un changement d'orientation peut être induit par la température ou pression [7].

L'étude des SLs de type zinc-blende d'orientation (001) et (110) est particulièrement simple à manipuler puisque l'interface est non polaire. Par contre pour les SLs à couches tendues, une description théorique devient compliquée car les atomes ne restent pas forcément dans des plans perpendiculaires à la direction de croissance. L'interface peut alors devenir polaire [8].

L'objectif de ce travail est d'apporter une contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires InN, GaN, de l'alliages ternaire InGaN, et de leurs super-réseaux InN/GaN avec deux types d'orientation (001) et (110) en utilisant la méthode linéaire des orbitales muffin-tin avec un potentiel totale (*FP-LMTO*) implémentée dans le code de calcul *LmtART* qui est considérée comme un outil de choix pour la prédiction de nouveaux matériaux. Ainsi l'étude des SLs de type  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$  sa nous permet de voir l'effet du nombre de monocouche  $n$  sur ces différentes propriétés.

Ce manuscrit est développé selon quatre chapitres.

Dans le chapitre I, on s'intéresse essentiellement à présenter les principales propriétés (structurales, électroniques et optiques) des matériaux massifs InN, GaN et leurs alliage InGaN.

Dans le chapitre II, nous abordons des généralités sur les puits quantiques et super-réseaux où on présentera des notions de base, des définitions ainsi que les propriétés des super-réseaux.

Le chapitre III présente la méthode de calcul *ab-initio* qui repose sur certain nombre d'approximations tel que l'approximation de la densité locale (*LDA*) et l'approximation du gradient généralisé (*GGA*), ainsi que la formulation de la théorie de la fonctionnelle de densité (*DFT*) et la présentation de la méthode linéaire des orbitales muffin-tin avec un potentiel totale (*FP-LMTO*) et avec laquelle nos calculs ont étaient effectués.

Le quatrième chapitre contient les résultats de ce travail commentés et discutés, dans lequel on détaille les propriétés structurales, électroniques et optiques des

composés binaires InN, GaN, l'alliage ternaire InGaN ainsi que les propriétés des superréseaux InN<sub>m</sub>/GaN<sub>n</sub> en fonction du nombre de monocouches n et suivant les deux directions de croissances (001) et (110).

Enfin, nous terminons notre travail par une conclusion générale.

## Références bibliographiques

- [1] *Gorczyca, I., Svane, A. and Christensen, N.E.* Theory of point defects in GaN, AlN, and BN: Relaxation and pressure effects. *Physical Review B*. 1999, Vol. 60, 8147.
- [2] *Yamaguchi, S., et al.* Anomalous features in the optical properties of Al<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N on GaN grown by metal organic vapor phase epitaxy. *Applied Physics Letters*. 2000, Vol. 76, 876.
- [3] *Nanishi, Y., Saito, Y. and Yamaguchi, T.* RF-Molecular beam epitaxy growth and properties of InN and related alloys. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2003, Vol. 42, 2549.
- [4] *K. Matsuoka, S. Yagi, and H. Yaguchi,* *J. Cryst. Growth*. 477 (2017) 201.
- [5] *A. Assali et al.,* *Mater. Sci. Semicond. Process.* 36 (2015) 192,
- [6] *K. Matsuoka, S. Yagi, and H. Yaguchi,* *J. Cryst. Growth*.477 (2017) 201.
- [7] *A. Duff, L. Lympirakis, and J. Neugebauer,* *Phys. Status Solidi. B* 252 (2015) 855.
- [8] *F. Szmulowicz, H. J. Haugan, and G. J. Brown,* *Quantum Sensing and Nanophotonic Devices V, Proc. of SPIE* 6900 (2008).

# Chapitre I

## Les matériaux InN, GaN et InGaN

### I. Introduction:

Les matériaux semi-conducteurs à large bande interdite de la famille des nitrures (InN, GaN, AlN, InGaN, AlInN...) possèdent des propriétés physiques qui les placent en excellente position pour des différentes applications. De plus la caractéristique principale pour laquelle les nitrures sont tant étudiés est leur gap d'énergie interdite direct, y compris à travers leurs alliages. Ceci permet d'avoir de meilleurs rendements de conversion ou d'émission de lumière, pour le photovoltaïque ou pour les *LEDs*, par exemple. De plus, leurs alliages permettent de couvrir quasiment tout le spectre solaire, de l'infrarouge (*IR*) à l'ultraviolet (*UV*) [1]. Ainsi à cause de leurs fortes liaisons interatomiques ou encore une forte conductivité thermique, rendent l'étude de ces matériaux très intéressants pour l'optoélectronique à haute température et grande puissance [2]. De plus des calculs théoriques sur les propriétés optiques et électroniques faits ultérieurement sur ce polytype ont montré que grâce à leur haute symétrie, ces matériaux peuvent avoir des avantages supérieurs à ceux cristallisant dans la phase hexagonale [3]. Dans le but d'explorer tous ces avantages, quelques groupes ont focalisé leurs recherches sur l'obtention des matériaux en phase cubique et l'étude de leurs propriétés. Cependant, la phase cubique est instable du point de vue d'énergie. Cela rend la croissance plus difficile que sa contrepartie hexagonale [3].

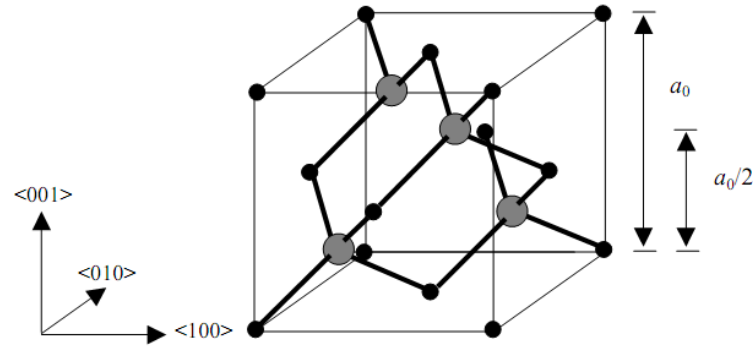
Nous présentons dans ce chapitre le matériau de nitrure de gallium-indium (InGaN). Ce matériau est un semi-conducteur faisant partie de la catégorie des nitrures-III, c'est-à-dire, composé d'azote et d'éléments de la colonne III du tableau de *Mendeleïev*. Le nitrure de gallium-indium est un alliage entre le nitrure de gallium (GaN) et le nitrure d'indium (InN). C'est pourquoi, nous allons principalement décrire dans ce chapitre les propriétés structurales, électriques et optiques de ces deux alliages binaires, pour ensuite décrire les propriétés de l'InGaN qui en découlent.

## I-1 Propriétés structurales de l'InN, GaN

### I-1-1 Les structures cristallines et la Zone de Brillouin

Les nitrures d'éléments III et leurs alliages sont formés par l'association d'un ou plusieurs éléments de la colonne III et de l'élément Azote (N) de la colonne V de la classification de *Mendeleïev*. Ils peuvent exister sous deux formes cristallines différentes (polytypes) : La structure *zinc-blende* (cubique) et la structure *wurtzite* (hexagonale).

La structure *Zinc Blende*, (*figure I-1*), qui s'apparente à celle du diamant, peut être considérée comme deux sous-réseaux cubiques faces centrées, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, d'une quantité  $(a_0 / 4, a_0 / 4, a_0 / 4)$ ,  $a_0$  représente le paramètre de maille du matériau. Cette structure est caractérisée par une séquence d'empilements de bicouches cation-anion. Dans cette bicouche chaque cation (anion) est lié tétraгонаlement avec 4 anions (cations).



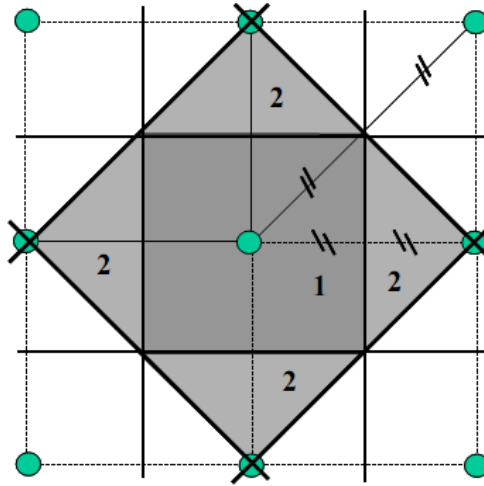
**Figure I-1** : Paramètre de maille  $a_0$  de la structure zinc blende.  $a_0/2$  représente la distance inter plans. Les cercles gris représentent des cations et les cercles noirs les anions [3].

De ce fait dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement covalent des liaisons (semi-conducteur polaires). Cette composante de la liaison ionique est importante, elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde, au même titre qu'il y a interaction entre les cristaux ioniques et la lumière infrarouge [4].

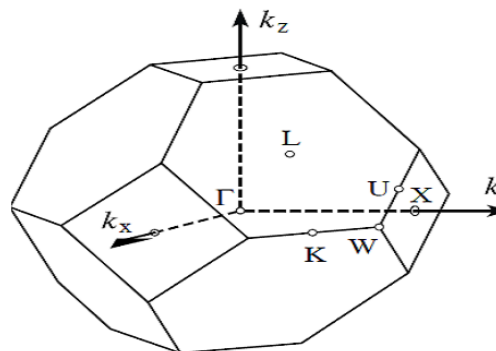
Dans le cas d'un réseau quelconque, la zone de Brillouin se détermine dans le réseau réciproque. Cette zone, est la maille de Wigner-Seitz correspondante. Cette maille est déterminée par les plans médiateurs entre les plus proches voisins d'un atome. C'est à partir des limites de la 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin que l'on observe les particularités de la structure électronique qui déterminent les propriétés électroniques d'un solide. Pour simplifier cette présentation, nous pouvons prendre l'exemple d'un réseau bidimensionnel et carré. [5]

La figure I-2 met en évidence la première zone de Brillouin repérée par 1 et la deuxième zone repérée par 2, délimitées dans ce cas par les médiatrices (des droites).





**Figure I-2 :** Représentation dans un réseau bidimensionnel des deux premières zones de Brillouin, notées 1 et 2 sur la figure. Elles sont obtenues à partir de la construction de médiatrices successives entre les plus proches voisins. Médiatrices verticales et horizontales pour la zone 1, à  $\pi/4$  pour la zone 2 [5].



**Figure I-3 :** Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points de haute symétrie.

$\Gamma$  représente le centre de la première Z.B avec les coordonnées  $k_r (0, 0, 0)$ . Les points  $X, L, W...$ etc sont des points de haute symétrie. Ces points de rencontre pour chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes : Les points  $X$  de coordonnées  $(2\pi/a, 0, 0)$  sur les axes  $(100)$ , les points  $L$  de coordonnées  $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$  sur les axes  $(111)$ , les points  $K$  de coordonnées  $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$  sur les axes  $(011)$ .

### I-1-2 Les paramètres de mailles

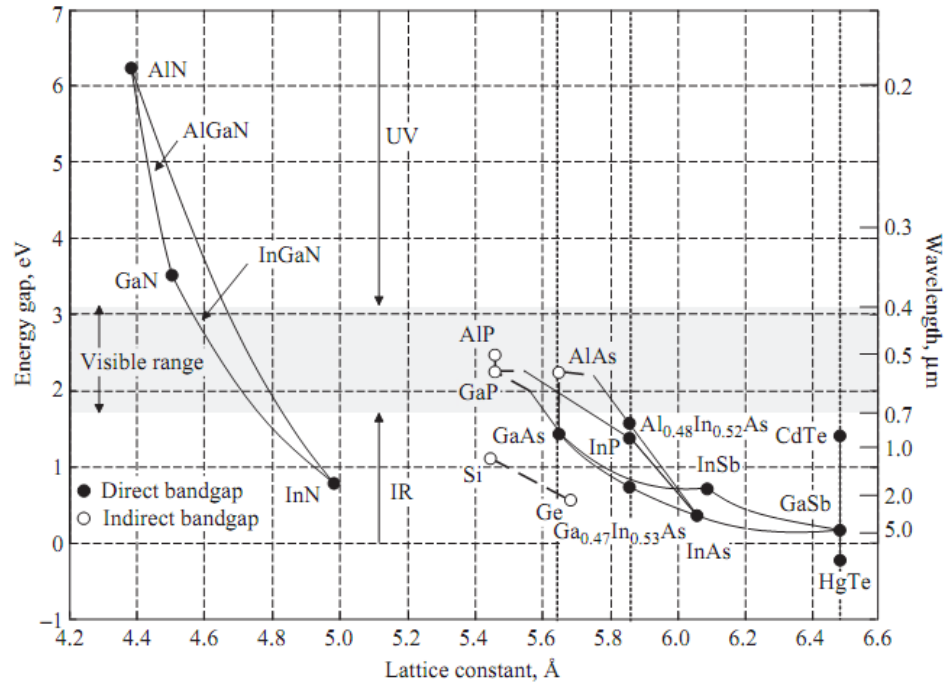
Contrairement à la phase hexagonale où les paramètres de maille dans le plan  $a$  et hors le plan  $c$  sont différents, dans la structure zinc blende la distance entre plans atomiques est identique dans le plan de croissance et perpendiculaire à ce plan. En outre pour la phase hexagonale dont l'état de l'art en termes de qualité structurale est largement meilleur que pour son homologue cubique. En première approximation, la valeur du paramètre du réseau de la structure cubique est donnée en fonction de celle de la structure hexagonale suivant la relation  $a_{ZB} = \sqrt{2}a_{WZ}$ .

Le *tableau I-1* résume les paramètres de maille des nitrures des éléments III calculés et déterminés expérimentalement. En ce qui concerne les résultats de ce tableau, il y a une certaine dispersion sur les données publiées tant pour les valeurs calculées que pour les valeurs déterminées expérimentalement. La dispersion sur les valeurs expérimentales pourrait être attribuée aux différences en qualité structurale et contraintes existantes dans les couches [3].

	Valeur théorique $a_0$ (en Å) calculée [6]	Valeur expérimentale $a_0$ (en Å)
GaN	4,423; 4,462; 4,452	4,50 [7] 4,53 [8]
InN	4,996; 4,392; 4,981	4,98 [9] 4,97 [10]

**Tableau I-1** : Paramètres de maille  $a_0$  des nitrures dans la phase cubique calculés et déterminés expérimentalement.

Les variations de l'énergie de gap en fonction du paramètre du réseau des semi-conducteurs III-N sont illustrées dans la *figure 1-4*. Ce diagramme nous permet de connaître le domaine d'émission des alliages ternaires susceptibles d'être déposés en couche mince, sur un substrat binaire comme GaN ou InN.



**Figure I-4 :** Valeur de l'énergie de la bande interdite en fonction du paramètre de maille pour les semi-conducteurs les plus usuels [11].

Plus le paramètre de maille est faible, plus l'énergie de la bande interdite est élevée. Ceci est valable également pour les alliages ternaires, dont l'énergie de la bande interdite s'écarte peu de la moyenne pondérée des bandes interdites des deux composés binaires les constituant. L'incorporation des atomes In dans la maille cristalline du GaN conduit à une augmentation du paramètre du réseau  $a$  de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  qui contient un gap direct. Le faible gap d'énergie interdite de l'InN dans l'infrarouge étend la couverture spectrale des nitrures qui couvrent maintenant de l'ultraviolet lointain avec l'AlN (6.2 eV, soit 200 nm) [12], à l'infrarouge moyen avec l'InN (0.7 eV, soit 1770 nm) [13], en passant par l'ultraviolet proche avec le GaN (3.39 eV, soit 365 nm) [13] et le visible avec les alliages InGaN ou AlInN [14].

### I-1-3 Les coefficients élastiques

Les propriétés des semi-conducteurs dépendent dans une large mesure de leur état de contrainte et des déformations locales ou globales du réseau cristallin qui y sont liées. En effet, toute déformation entraîne une modification des positions relatives des atomes les uns par rapport aux autres et donc du recouvrement des

orbitales atomiques [15]. Il s'ensuit une modification du diagramme de bandes et en particulier de la largeur de la bande interdite.

Le *tableau I-2* représente les valeurs des coefficients élastiques des nitrures cubiques calculés par plusieurs groupes de théoriciens pour les deux binaires cubiques.

Matériaux	Coefficients élastiques (GPa)				Module de compression élastique <b>B</b>	Paramètre de Kleinman $\zeta$ ZB	Référence
	<b>C11</b>	<b>C12</b>	<b>C13</b>	<b>C14</b>			
GaN	239	159	155	200	203	0.61	[16]
	296	154	206	225	201	0.50	[17]
InN	187	125	86	138	146	0.80	[16]
	184	116	177	209	139	0.70	[17]

**Tableau I-2** : Constantes élastiques des nitrures dans la phase cubique [18]

Les coefficients élastiques de GaN sont plus importants que ceux de l'InN. Il est à noter aussi que le plus petit module de compression élastique  $B$  est celui de l'InN. Cela signifie que le GaN est plus rigide que l'InN. Le paramètre de *Kleinman*  $\zeta$  est un paramètre qui indique la position relative du cation et de l'anion quand le réseau cristallin est soumis à une contrainte à volume constant [3]. Par exemple les résultats de *Wright* [16] sur le paramètre de *Kleinman* signifieraient que la phase cubique est plus sensible aux variations des longueurs de liaison par rapport à la phase hexagonale lors de la relaxation de la contrainte. Dans le *tableau I-2* le paramètre de *Kleinman*  $\zeta$  indique que le GaN est moins sensible aux variations de liaison que l'InN.

#### I-1-4- Les coefficients de dilatation thermique

Tout matériau soumis à un changement de température se déforme : c'est le phénomène de la dilatation thermique. La dilatation thermique, modifie les distances interatomiques dans le réseau. Quand les coefficients de dilatation thermique de la couche épitaxie et du substrat diffèrent, les paramètres de maille varient avec la température de façon non négligeable entre la température de croissance et la température ambiante.

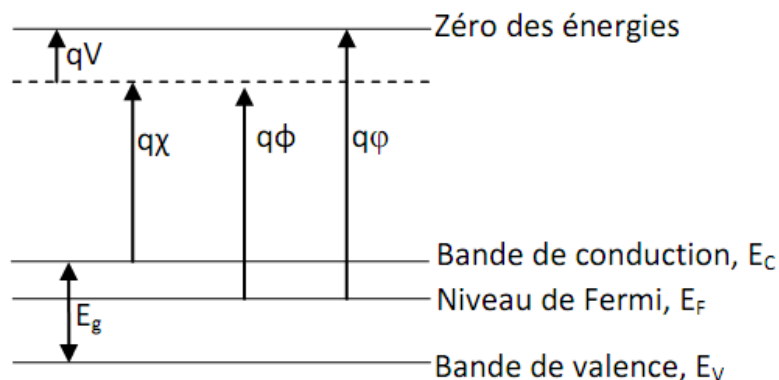
Il est donc important de connaître les coefficients de dilatation thermique du réseau cristallin de chaque matériau pour l'élaboration de couches hétéroépitaxiées mais également pour l'étude des propriétés des semi-conducteurs à des températures différentes. Cependant, si on considère que la longueur des liaisons des deux phases est semblable, on peut supposer que les valeurs des matériaux en phase hexagonale sont aussi valables pour les nitrures en phase cubique [19, 20]. Le tableau I-3 résume ces paramètres.

Matériaux	$\Delta c/c$ ( $\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ )
GaN	3.17 (300-700 °K) et 7.75 (700-900 °K)
InN	3.75- 5.7 (260- 800 °K)

**Tableau I-3:** Coefficient de dilatation thermique des nitrures dans la phase hexagonale [20]

## I-2 Propriétés électroniques

Les propriétés électriques d'un matériau proviennent de son gap d'énergie interdite,  $E_g$ , et de sa densité de porteurs. Le gap d'énergie est défini comme étant la différence d'énergie entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction. Le diagramme d'énergie d'un matériau est présenté dans la Figure I-5.



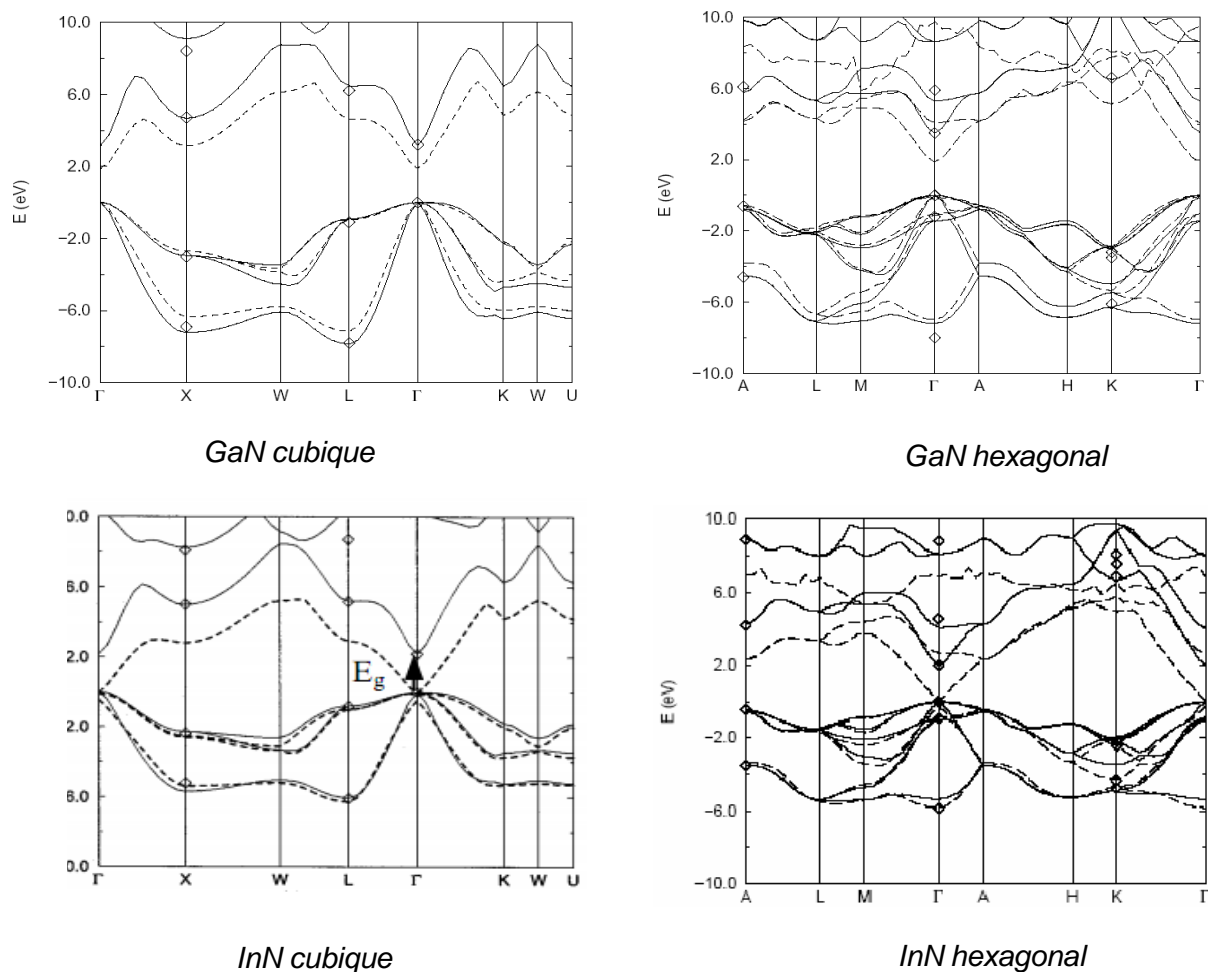
**Figure I-5 :** Diagramme des énergies pour un matériau.  $q$  est la charge élémentaire,  $V$  le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériau,  $\chi$  l'affinité électronique,  $\Phi$  le travail de sortie, et  $\phi$  le potentiel d'ionisation.

Le bas de la bande de conduction varie spatialement avec le potentiel électrostatique macroscopique,  $V$ , régnant à l'intérieur du matériau. L'affinité électronique,  $\chi$ , peut être définie comme la quantité d'énergie dégagée suite à la capture d'un électron par un atome. Plus l'affinité électronique est grande plus la capture d'un électron par l'atome dégage de l'énergie et plus cette capture est stable. Le travail de sortie,  $\Phi$ , correspond au travail à fournir pour extraire une particule du système sans l'emmener à l'infini, mais en la laissant à proximité immédiate du système où elle reste soumise au même potentiel électrostatique,  $V$ . Enfin, le potentiel d'ionisation,  $\varphi$ , est l'énergie nécessaire pour extraire une particule du système et la mettre à l'infini.

### I-2-1 Structure de bandes

La connaissance de la structure de bande d'un semi-conducteur est essentielle pour la réalisation des dispositifs optoélectroniques. L'intérêt des semi-conducteurs III-V à base de nitrures est qu'ils présentent de grandes variétés de gap ou bande interdite par rapport aux semi-conducteurs classiques. De nombreux calculs basés sur diverses méthodes ont été réalisés pour déterminer la structure de bande des binaires. Les structures de bandes des nitrures GaN et InN sont représentées dans les *figures 1-6*, ces figures montrent pour les deux nitrures, que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au point  $\Gamma$ .

Les semi-conducteurs de type III-N présentent comme la plupart des matériaux III-V, une bande interdite directe au point  $\Gamma$ , centre de la première zone de Brillouin ( $k=0$ ). De nombreuses études théoriques des structures de bande des matériaux III-N sont reportées dans la littérature, la majorité des méthodes de calcul ont donné une structure de bande de valence correcte mais des valeurs de bande interdite sous estimées du fait de l'utilisation de l'approximation de la densité d'états locale (LDA).



**Figure I-6:** Structures de bandes de GaN et InN calculées dans les deux phases [21].

La variation de l'énergie de bande interdite  $E_g(T)$  en fonction de la température est généralement décrite par la formule empirique de *Varshni* [22].

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (I-3)$$

Où  $E_g(T)$  est le gap d'énergie à la température  $T$ ,  $E_g(0)$  sa valeur à la température 0°K,  $\alpha$  et  $\beta$  des constantes ( $\alpha$  en eV/°k et  $\beta$  proportionnelle à la température de *Debye* en °K). Le *Tableau I-4* regroupe les largeurs des bandes interdites des nitrures binaires GaN et InN en phase cubique.

Matériau	$E_g$ (0K)	$E_g$ (300K)	$\alpha$ (meV/K)	$\beta$ (K)	Référence
GaN	3,5	3,44	0,508	996	[23]
	3,47	3,39	0,77	600	[24]
	3,51	3,44	0,909	830	[25]
InN	0,69	0,64	0,41	454	[26]
	0,7	0,75	0,245	624	[25]

**Tableau I-4 :** Paramètres de Varshni et gap à 0K et 300K du GaN et de l'InN en phase cubique.

### I-2-2 Propriétés de transport

L'InN possède la masse électronique effective la plus faible parmi les semi-conducteurs *III-N* offrant ainsi la possibilité de vitesses de saturation et de mobilités d'électrons élevées [27]. Par ailleurs, la mobilité des électrons mesurée expérimentalement dans l'InN de  $2700\text{cm}^2/\text{V.s}$  [28] reste de loin supérieure à la mobilité  $900\text{cm}^2/\text{V.s}$  la plus élevée rapportée pour le GaN [29]. Les principales propriétés intrinsèques du GaN et de l'InN sont regroupées dans le *tableau I-5*.

	$E_g$ (eV)	$\mu_e$ ( $\text{cm}^2/\text{V.s}$ )	$\mu_p$ ( $\text{cm}^2/\text{V.s}$ )	$E_{\text{claquage}}$
GaN	3,42	$9 \times 10^2$ [29]	30	$50 \times 10^5$
InN	0,77	$27 \times 10^2$ [28]	-	$10 \times 10^5$

**Tableau I-5 :** Propriétés électriques expérimentales des matériaux GaN et InN à (300K) [30].

### I-3 Propriétés optiques

Les propriétés optiques d'un matériau regroupent principalement son indice de réfraction et son coefficient d'absorption. Ces propriétés résultent dans les semi-conducteurs de la vibration du réseau et des excitations électroniques. Les propriétés optiques sont primordiales pour les composants optoélectroniques puisqu'elles régissent le déplacement de la lumière dans le composant. Par exemple, dans un dispositif composé de différents matériaux, la lumière a tendance à se propager dans les matériaux ayant le plus fort indice de réfraction. On peut alors confiner la lumière dans une couche particulière, comme c'est le cas pour les lasers. Cette propriété est aussi très intéressante pour les applications cellules solaires afin d'augmenter l'efficacité d'absorption de la lumière.



### I-3-1 Indice de réfraction

L'indice de réfraction d'un matériau est défini par le rapport de la vitesse de la lumière dans le vide ( $c$ ) sur la vitesse de la lumière dans le matériau ( $v$ ) par :  $n = \frac{c}{v}$ . La vitesse de la lumière dans un matériau n'est pas constante car elle change avec la longueur d'onde.

La relation qui suit nous donne l'indice complexe de réfraction  $n^*(\omega)$  :

$$n^*(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) = [\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)]^{1/2} \quad (I-4)$$

Où  $n(\omega)$  représente l'indice de réfraction ordinaire c'est-à-dire réel, et  $k(\omega)$  représente l'indice d'atténuation ou autrement dit le coefficient d'extinction. Ces indices réels et positifs sont déterminés à travers des mesures optiques. En utilisant les relations précédentes on peut déduire les constantes diélectriques en fonction des constantes optiques  $n$  et  $k$  et vice versa :

$$\varepsilon_1 = n^2 + k^2 \quad (I-5)$$

$$n(\omega) = \left[ \frac{[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]^{1/2} + \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{1/2} \quad (I-6)$$

$$k(\omega) = \left[ \frac{[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]^{1/2} - \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{1/2} \quad (I-7)$$

### I 3-2 Coefficients d'absorption

Pour les cellules solaires, le coefficient d'absorption est un paramètre important puisqu'il va déterminer la quantité de photons absorbés par le matériau et donc la quantité de porteurs pouvant être produits. L'absorption à travers une couche de semi-conducteur d'épaisseur  $d$  peut être décrite par l'équation suivante :

$$I_t(\lambda) = I_i(\lambda) \cdot \exp(-\alpha(\lambda)d) \quad (I-8)$$

Avec:  $I_i$ : Intensité incidente

$I_t$  : Intensité transmise

$\lambda$  : Longueur d'onde

$\alpha(\lambda)$  : Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ]

Le coefficient d'absorption dépend des deux parties réelle  $\epsilon_1$  et imaginaire  $\epsilon_2$  de la fonction diélectrique.

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{\lambda} \cdot k(\omega) \quad (I-9)$$

Où  $k$  est le coefficient d'extinction,  $\lambda$  est la longueur d'onde de la lumière dans le vide.

L'indice de réflexion normale  $R$  est donné par :

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (I-10)$$

## I-4 Propriétés du composé ternaire InGaN

### I-4-1 Contraintes dans les couches de nitrure

Les défauts structuraux dans les nitrures sont généralement en grande densité dans les couches déposées. Ils limitent donc les performances des composants à base de nitrures et donc leur développement industriel. C'est pourquoi ils ont été activement étudiés depuis les années 1990 à l'aide de calculs *ab-initio* [31] et de mesures après implantation [32,33].

Lors d'une croissance hétéroépitaxiale, la couche peut être déformée au-delà d'une certaine épaisseur à cause du désaccord de paramètre de maille entre la couche et le substrat. Le même phénomène peut se manifester si un désaccord entre les coefficients de dilatation thermique entre la couche épitaxiale et le substrat est présent [34]. La théorie de l'élasticité nous permet de calculer l'état de contrainte d'un film à l'aide des constantes élastiques. Le désaccord de maille entre la couche et le substrat est défini comme suit [3]:

$$\frac{\Delta a}{a_0} = \frac{a_0 - a_S}{a_S} \quad (I-1)$$

Où  $a_0$  et  $a_S$  représentent les paramètres de maille hors plan de la couche entièrement relaxée et du substrat respectivement.

La contrainte thermoélastique emmagasinée par la couche lors du refroidissement ou de variations de température est donnée par la formule :

$$\frac{\Delta a}{a_0} = \Delta T(\alpha_S - \alpha_{couche}) \quad (I-2)$$

Où  $\Delta T = (T_i - T_f)$  correspond à la différence de température d'un cycle de variation de température, et  $\alpha_{s,couche}$  les coefficients de dilatation thermique du substrat et de la couche respectivement.

En général, il y a un désaccord tant entre les paramètres de maille qu'entre les coefficients de dilatation thermique des nitrures et les substrats utilisés. Les couches épitaxiées sont soumises à un certain degré de contrainte introduite lors de la croissance et du refroidissement. L'existence d'une contrainte biaxiale dans une couche modifie les différentes propriétés. Il est donc nécessaire de prévoir cet effet pour l'interprétation correcte des résultats [3].

De plus on peut citer quelques défauts dans un cristal :

- Les lacunes (site atomique inoccupé) ;
- Les anti-sites (un atome occupe le site d'un autre atome, par exemple, un atome d'azote à la place d'un gallium  $N_{Ga}$ , ou un atome de gallium à la place d'un atome d'azote  $GaN$ ) ;
- Les impuretés par substitution (un atome étranger occupe un site atomique, par exemple, un atome de carbone dans un site de gallium  $C_{Ga}$ ) ;
- Les défauts interstitiels (un atome du matériau ou une impureté occupe un site interstitiel, par exemple, un atome d'azote dans un site interstitiel,  $N_{int}$ ) ;
- Les dislocations (discontinuité dans la structure cristalline). Elles proviennent généralement de la relaxation d'un matériau sous contrainte ;
- Les défauts d'empilement (la séquence d'empilement des atomes n'est plus respectée) ;

#### I-4-1-1 Défauts structuraux dans le GaN

Les défauts structuraux dans le GaN ont été d'abord étudiés théoriquement à l'aide de modèles, puis expérimentalement à l'aide de la technique d'implantation. *Neugebauer* et *Van de Walle* [31] déterminèrent les énergies de formation et la structure électronique des différents défauts ponctuels présents dans le GaN en s'appuyant sur l'approximation « first-principals » de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Dans les conditions de fort dopage de Ga, la lacune d'azote possède la plus faible énergie de formation et serait donc la plus probable dans le GaN, alors que sous les conditions d'un dopage N, c'est la lacune de gallium qui serait la plus probable. Ces faibles énergies sont dues au fait que les lacunes peuvent être chargées, et ainsi baisser significativement leur énergie de formation [14]. Ainsi, du fait de la faible taille de l'atome d'azote et du fort rayon atomique de l'atome de gallium, l'absence de l'azote provoque le recouvrement des liaisons pendantes de Ga formant une liaison pseudo-métallique Ga-Ga. Cette dernière est à l'origine du fort écartement des niveaux d'énergie, les plaçant dans la bande de valence et la bande de conduction [14].

#### I-4-1-2 Défauts structuraux dans l'InN

*Zhao et al.* [34] étudièrent la formation de défauts structuraux dans l'InN sous différentes conditions de croissance. Il trouvèrent que les conditions  $[N]/[In]=1$  donnait l'InN le plus stable. Dans les conditions ( $[N] / [In] > 1$ ) ou riche en N, *Zhao et al* déterminèrent que l'atome d'azote interstitiel,  $N_i$ , possède la plus faible énergie de formation. Ceci s'explique par le petit rayon de l'atome d'azote qui crée peu de contrainte. Enfin, dans les conditions ( $[N] / [In] < 1$ ) ou riche en In, la lacune d'azote,  $V_N$ , a une énergie de formation bien plus faible que les autres défauts.

Ainsi, comme dans le GaN, la lacune d'azote a un rôle important dans les défauts natifs de l'InN. Néanmoins, l'origine de la forte densité d'électrons n'est toujours pas formellement déterminée [14]. Par ailleurs, la densité de défauts, et donc la qualité cristalline, des couches épitaxiées influe sur les propriétés électriques du matériau. Il est donc très important de comprendre leur procédé de formation et leur influence

sur les propriétés du matériau pour le développement de composants à base de nitrures.

#### I-4-2 Variation du gap $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la fraction de mole $x$

A partir des gaps d'énergie interdite des composés binaires GaN et InN, il est possible de déterminer le gap d'énergie de l'InGaN en utilisant la loi de *Vegard* avec un paramètre de courbure. La loi de *Vegard* est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (gap d'énergie, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants [35, 36]. De nombreux auteurs ont montré que l'adéquation entre les valeurs expérimentales et théoriques n'est obtenue que si l'on ajoute un terme supplémentaire à la loi de *Végard*. Ainsi, l'équation caractéristique  $E_g(\text{InGaN}) = f(x)$  est une équation polynomiale.

$$E_g^{\text{InGaN}} = (1 - x)E_g^{\text{GaN}} + xE_g^{\text{InN}} - bx(1 - x) \quad (I-11)$$

Où le dernier terme traduit l'écart à la loi d'interpolation linéaire, avec  $b$  le coefficient de courbure de l'alliage « *bowing* », ce facteur est généralement de l'ordre de la fraction d'électronvolt et indépendant de la composition, Il vaut environ 1 eV pour les ternaires AlGaN et 3 eV pour les ternaires InGaN [37]. L'origine physique du coefficient de courbure représente la non linéarité est le désordre qui est d'autant plus important lorsque le désordre de l'alliage est grand.

#### I-4-3 Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la pression

Pour les couches de nitrures-III épitaxiées sur des substrats composés avec un autre matériau ayant des paramètres différents ont notamment un coefficient d'expansion thermique différent. Ceci va entraîner la création de contraintes lors du refroidissement du composant à température ambiante après la croissance. Ces contraintes peuvent changer la structure de bande de la couche épitaxiée. La dépendance du gap d'énergie,  $E_g$ , en fonction de la pression peut s'exprimer sous la forme [12]:

$$E_g(P) = E_g(0)gP + dP^2 \quad (I-12)$$

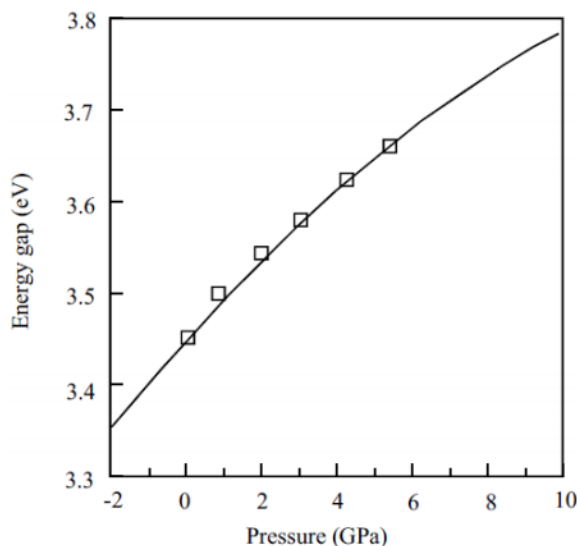
Avec  $E_g(0)$  le gap d'énergie du matériau sans contrainte,  $P = 0$  (eV).

$g$  et  $d$  des coefficients de pression (eV/Kbar) et  $P$  la pression (Kbar).

Les mesures de gap d'énergie en fonction de la pression appliquée, données par l'expression I-12 conduits à une augmentation du gap d'énergie avec l'augmentation de la pression. Ceci s'explique par le fait que la pression rapproche physiquement les atomes, constituants du matériau, augmentant ainsi l'énergie de la liaison et donc, l'énergie du gap. Les paramètres  $g$  et  $d$  du GaN et de l'InN sont rassemblés dans le *Tableau I-6*.

	GaN		InN	
	[38]	[38]	[38]	[39]
$d$	4,2	3,3	2,1	3,3
$g$	$-1,8 \times 10^{-2}$		0	

**Tableau I-6 :** Paramètres  $g$  et  $d$  du GaN et de l'InN en meV/kbar [23].



**Figure I-7 :** Evolution du gap d'énergie interdite du GaN en fonction de la pression. Les points représentent les mesures expérimentales et la ligne, la simulation selon l'équation I-12 [23].

Les coefficients de pression des nitrures du groupe des nitrures-III sont beaucoup plus petits que ceux des autres matériaux III-V. Par exemple, la constante

de pression,  $dE_g/dP$ , égale à 11 meV/kbar pour le GaAs [40], est presque trois fois plus grande que celle du GaN. Cette tendance est attribuée à une plus grande ionicité des nitrures-III à cause de la plus grande électronégativité de l'azote [23]. Dans le groupe des semi-conducteurs III-V, une plus grande ionicité conduit typiquement à des coefficients de pression plus petits [41].

#### I-4-4 Paramètre de courbure

L'origine du terme non linéaire dans la dépendance en composition du gap fondamental observé pour les semi-conducteurs de type  $A_xB_{1-x}C$ , a fait l'objet de nombreux travaux. Les calculs montrent que l'énergie du gap diminue avec l'augmentation de la composition d'indium. Il est clairement apparu sur le plan expérimental et théorique que le *bowing* a été généralisé pour les termes quadratiques dans la composition de l'alliage. Il exprime les extensions de plusieurs paramètres de bande; ainsi, dans certains cas il peut être attribué à des mécanismes physiques spécifiques. Mais parfois, il peut simplement correspondre aux paramètres empiriques ou données expérimentales.

L'équation empirique qui donne le gap du ternaire en fonction des deux binaires et la suivante [42] :

$$E_g(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2 \quad (I-13)$$

Avec :  $\alpha$  est l'énergie du gap le plus petit du binaire InN, et  $\beta$  le paramètre de *fitting*, le terme quadratique  $\gamma$  correspondant au paramètre de désordre optique  $b$  (voir la *relation I-14*).

Pour le paramètre de courbure de notre alliage ternaires est dû à sa grande valeur, donc l'équation qui nous permettra de donnée la valeur de ce paramètre est donnée par [43] :

$$b(x) = \frac{x.E_g(\text{InN}) + (1-x).E_g(\text{GaN}) - E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})}{x.(1-x)} \quad (I-14)$$

Les contributions au paramètre de courbure en fonction de la concentration  $x$  de l'alliage ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  sont dues : à l'effet de déformation du volume, à l'échange de charge et à la relaxation de la liaison structurale.

## Références bibliographiques

- [1] Wu, J. Journal of Applied Physics. 2009, Vol. 106, 011101.
- [2] Gorczyca, I., Svane, A. and Christensen, N.E. Physical Review B. 1999, Vol. 60, 8147.
- [3] M. Guerrero, Esteban. " Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique ", Institut nationale des sciences appliquées Lyon, 2002.
- [4] Francis Levy. Traité des matériaux (18). Physique et technologie des semi-conducteurs. Presses polytechniques et universitaires Romandes (1995).
- [5] Olivier Bonnaud. Physique des Solides, des Semiconducteurs et Dispositifs. Institut d'électronique et de communication de RENNES. Ed Ellipses (Juin 2003)
- [6] PUGH, S.K., DUGDALE, D.J., BRAND, S. and ABRAM, R.A. Semicond. Sci. Technol. 1999, Vol. 14, p 31.
- [7] STRITE, S., RUAN, J., LI, Z., SALVADOR, A., CHEN, H., SMITH, D.J., CHOYKE, W.J., and MORKOÇ, H. J. Vac. Sci. Technol. B 1991, Vol. 9, No. 4, p 1924 – 1929
- [8] POWELL, R.C., LEE, N.E., KIM, Y.W., and GREENE, J. J. Appl. Phys. 1993, Vol.73 No. 1, p 189 – 204.
- [9] STRITE, S., CHANDRASEKHAR, D., SMITH, D.J., SARIEL, J., CHEN, H., TERAGUCHI, N., and MORKOÇ, H. J. Cryst. Growth 1993, Vol. 127, p 204 – 208.
- [10] TABATA, A., LIMA, A.P. TELES, L.K., SCOLFARO, L.M.R., LEITE, J.R., LEMOS, V.,SCHÖTTKER, B., FREY, T., SCHIKORA, D., and LISCHKA K. Appl. Phys. Lett. 1999, Vol 74 No. 3, p 362 – 364.
- [11] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. Journal of Applied Physics, 94:6 (2003), 3675–3696.
- [12] Morkoç, H. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices. Weinheim : WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008. Vol. 1. 978-3-527-40837-5.
- [13] Yam, F.K. and Hassan, Z. InGaN : An overview of the growth kinetics, physical properties and emission mechanisms. Superlattices and Microstructures. 2008, Vol. 43, 1.
- [14] V. GORGE " Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V ", thèse de doctorat en physique, UNIVERSITE PARIS-SUD 11 (2012).
- [15] Fabrice ENJALBERT, " Etude des hétérostructures semi-conductrices III-nitrures et application au laser UV pompé par cathode à micropointes ", thèse pour obtenir le grade de Docteur de l'Université Joseph Fourier– Grenoble 1, 2004.



- [16] *WRIGHT, A.F.* J.Appl. Phys. 1997, Vol. 82 No. 6, p 2833 – 2839.
- [17] *KIM, K., LAMBRECHT, W.R.L., and SEGALL, B.* Phys. Rev. B 1996, Vol. 53 No. 24, p 16310 – 16326.
- [18] *I. Vurgaftman, J. R. Meyer.* J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001).
- [19] *XU, D.P., WANG, Y.T., YANG, H., LI, S.F., ZHAO, D.G. FU, Y., ZHANG, S.M., WU, R.H., JIA, Q.J., ZHENG, W.L., and JIANG, X.M.* J.Appl. Phys. 2000, Vol. 88 No. 6, p 3762 – 3764.
- [20] *OKUMURA, H., OTHA, K., FEUILLET, G., BALAKRISHNAN, K., CHICHIBU, S., HAMAGUCHI, H., HACKE, P., and YOSHIDA S.* J. Cryst. Growth 1997, Vol. 178, p 113 – 133.
- [21] *Pugh, S.K., Dugdale, D.J, Brand, S., and Abram, R.A.* Semiconductor Science And Technology. Jan, 1999, vol.14 n°1, p. 23.
- [22] *-I. Vurgaftman and J. R. Meyer.* J. Appl Phys. Vol. 94(6), p.3675,(2003).
- [23] *B. Monemar.* Physical Review B, 10 :676–681, Jul 1974.
- [24] *V. Bougrov.* New York : John Wiley and Sons, Inc, 2001.
- [25] *I. Vurgaftman and J. R.Meyer.* Journal of Applied Physics, 94(6) :3675–3696, 2003. (Cité pages 7, 9, 12, 16, 90 et 98.)
- [26] *J. Wu, W. Walukiewicz, K. M. Yu, W. Shan, J. W. Ager III, E. E. Haller, H. Lu, W. J. Schaff, W. K. Metzger, and Sarah Kurtz.* Physics, 94(10) :6477–6482, 2003.
- [27] *S. N. Mohammad and H. Morcos.* Progress in Quantum Electronics, 20(5-6) :361 – 525, 1996.
- [28] *T. L. Tansley and C. P. Foley.* Electronics Letters, 20(25) :1066 –1068, 6 1984.
- [29] *S. C. Binari and H. C. Dietrich.* GaN and Related Materials. pages 509–534, 1997.
- [30] *J. Martin.* Étude par Epitaxie en Phase Vapeur aux OrganoMétalliques de la croissance sélective de NanoHtroStructures de matériaux à base de GaN. Université Paul Verlaine, pages 1–201, 2009.
- [31] *Neugebauer, J. and Van de Walle, C.G.* Physical Review B. 1994, Vol. 50,8067.
- [32] *Sofer, Z., et al.* Thin Solid Films. 2011, Vol. 519, 6120.
- [33] *Katsikini, M., et al.* Journal of Applied Physics. 2003, Vol. 94, 4389.

- [34] Zhao, F.-Q., Shi, J.-J. and Yang, M. Communications in Theoretical Physics. 2010, Vol. 53, 145.
- [35] Vegard, L. Z. Phys. 1921, Vol. 5, 17.
- [36] Denton, A.R. and Ashcroft, N.W. Vegard's Law. Physical Review A. 1991, Vol. 43, 3161.
- [37] J. Simon, « Etude des propriétés optiques de nanostructures quantiques à base de nitrures d'éléments III », Thèse de doctorat de l'Université Joseph Fourier, Grenoble (2001).
- [38] Wei, S.H. and Zunger, A. Physical Review B. 1999, Vol. 60, 5404.
- [39] Christensen, N.E. and Gorczyca, I. Physical Review B. 1994, Vol. 50, 4397.
- [40] Welber, B. and al., et. 5729, s.l. : Physical Review B, 1975, Vol. 12.
- [41] Adachi, S. R1, s.l. : Journal of Applied Physics, 1985, Vol. 58.
- [42] W.G.Bi, C.W.Tu, Appl. Phys. Lett. 70 (1997) 1608.
- [43] S. Z. Wang, S. F. Yoon, W. K. Loke, T. K. Ng, W. J. Fan. J. Vac. Sci. Technol. B 20, (2002) 1364.

# Chapitre II

## Les puits quantiques et super-réseaux

### II-1 Introduction :

Au cours des dernières années de nombreuses études, expérimentales et théoriques ont été menées sur les propriétés de  $\text{In}(\text{Ga})\text{N} / \text{GaN}$  et d'autres super-réseaux de nitruure à courte période ( $SL$ ), tels que  $\text{GaN} / \text{Al}(\text{Ga})\text{N}$  et  $\text{InAlN} / \text{GaN}$ . Une grande partie des travaux a été consacrée à la compréhension des mécanismes de recombinaison radiative dans les  $SL$ s. Selon les considérations théoriques, les structures  $SL$  à courte période (peu de couches atomiques) permettent de couvrir les gammes de spectre visible et  $UV$  en manipulant avec l'épaisseur de couche de puits quantique ( $QW$ ) et de barrière quantique ( $QB$ ). Cependant, il s'avère que la réalisation expérimentale de ces structures est très difficile [1]. L'augmentation du nombre de couches d' $\text{InN}$  provoque la relaxation, des contraintes et introduit des défauts structurels associés [2].

L'utilisation des  $SL$ s  $\text{InN}_m / \text{GaN}_n$ , où  $m$  et  $n$  représentent le nombre de monocouches atomiques d' $\text{InN}$  et de  $\text{GaN}$ , respectivement, est très attractif car ils peuvent potentiellement remplacer les alliages  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  par un  $x$  élevé. Il est possible d'ajuster l'écart énergétique entre les mini-bandes en changeant l'épaisseur de chaque binaire  $\text{InN}$  et  $\text{GaN}$  [3]. Un autre facteur influençant le comportement de la bande interdite est la déformation interne causée par l'inadéquation du réseau entre couches. En raison de la quantité limitée de données expérimentales sur  $\text{InN} / \text{GaN}$  en raison des difficultés de croissance épitaxiale de ces  $SL$ s de nombreux articles se concentrent sur les études théoriques [4, 5].

## II-2 Les superréseaux semi-conducteurs :

Le superréseau est un empilement périodique de couches fines, typiquement de quelques monocouches (*MC*) à plusieurs dizaines de monocouches de différents matériaux dans une direction donnée. Il en résulte l'apparition de puits de potentiel. Le superréseau à faible gap joue le rôle d'un puits de potentiel pour les électrons et l'autre à grand gap d'une barrière. Ainsi l'obtention d'un profil de potentiel périodique résultant d'une succession de puits et de barrières.

### II-2-1 Technique de fabrication des super-réseaux :

La fabrication des super-réseaux se fait à l'aide de technique d'épitaxie par jet moléculaire *MBE* (*Molecular Beam Epitaxy*). C'est une technique de croissance de couches fines, elle permet de réaliser dans un bâti ultravide ( $10^{-10}$  à  $10^{-11}$ Torr) [6]: On dépose alors directement les éléments qui participent à la croissance, de façon balistique. Cette technique est lente (moins d'un micron par heure en général), mais permet une croissance de grande qualité à des températures plus basses qu'en phase chimique. Elle peut contrôler avec une grande précision l'épaisseur des couches déposées. La technique *MBE* présente des avantages qui la font extrêmement intéressante pour couvrir certaines niches technologiques. Par exemple, elle assure un meilleur contrôle de la synthèse de nanostructures, puits quantiques ou boîtes quantiques, et permet la réduction au minimum de leurs dimensions [6].

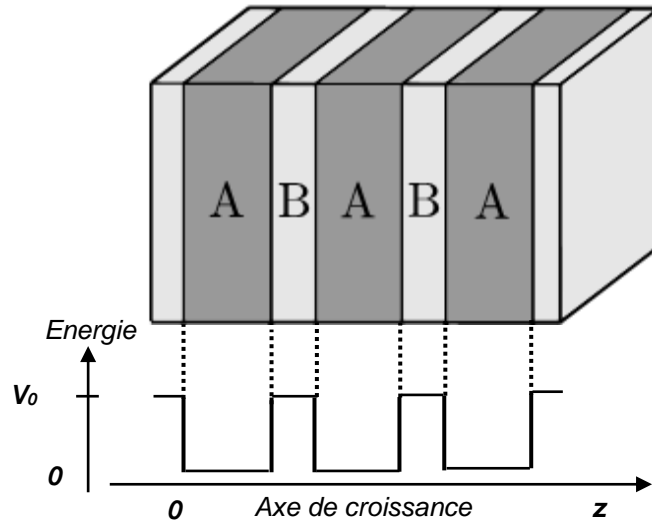
Parmi les difficultés techniques de l'épitaxie par jets moléculaires les problèmes de stabilité et d'uniformité de la cellule d'azote où les hautes températures de croissance requises pour atteindre une bonne qualité cristalline. D'autre part, c'est une technique qui rend possible l'élaboration d'une gamme plus étendue des matériaux d'alliages et *SL*, matériaux qui présentent des problèmes de miscibilité mais qui peuvent être stabilisés dynamiquement pendant la croissance *MBE* [6]. La performance de ces matériaux est déterminée par des paramètres structuraux tels que l'épaisseur des nanostructures, la qualité des interfaces et la composition chimique. Le choix du rapport III-N lors de la croissance de l'InN sur GaN est crucial. Nous pouvons synthétiser soit des puits quantiques (*QW*) lorsque l'InN est déposé

sur GaN dans des conditions de croissance riches en In (l'épaisseur du QW est supérieure à QB), soit de barrières quantiques (QB) lorsque sont choisies des conditions de croissance riches en Ga (l'épaisseur du QB est supérieure à QW).

En plus de la méthode précédente (MBE) il y a la technique de croissance de cristaux semi-conducteurs, MOCVD (*Metal-Organic Chemical Vapour Deposition*). Ces techniques permettent de réaliser des couches monocristallines avec une maîtrise exceptionnelle de la composition chimique, des qualités cristallographiques et de l'épaisseur. Elles permettent, à partir des éléments constitutifs d'un matériau, de déposer ce matériau sur un substrat convenablement choisi, pratiquement couche atomique par couche atomique [7].

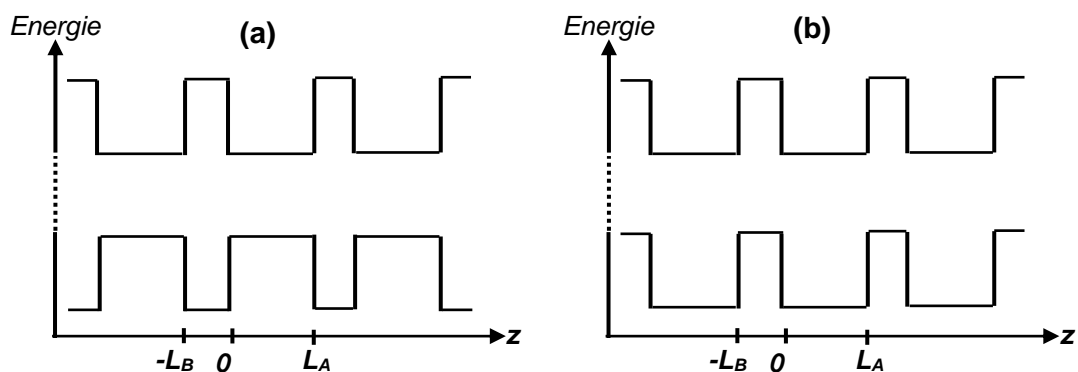
### II-3 Puits et barrières de potentiel :

La différence des gaps entre les massifs *A* et *B* est distribuée entre la bande de conduction et la bande de valence de manière à obtenir une structure faite de puits quantiques et de barrières de potentiel tel que représenté sur la *figure II-1* ( $V_0$  représente la hauteur de barrière, *A* le puits et *B* la barrière). Ce système est appelé système bidimensionnel (le mouvement des électrons est pratiquement « empêché » dans la direction de croissance et ne reste libre que dans les deux autres directions). Ces deux matériaux jouent le même rôle pour les trous de la bande de valence que pour les électrons de conduction (c'est à dire puits pour le *A* et barrière pour le *B*). Dans ce cas, les deux types de charges (électrons et trous) sont confinés dans le même matériau, ce qui rend facile leur recombinaison : on dit que ce superréseau est de type I. [8].



**Figure II-1:** Représentation schématique d'un super-réseau de puits quantiques.

Pour le superréseau de type II, le matériau *A* joue le rôle de puits et le matériau *B* celui de barrière pour les électrons de la bande de conduction. Cependant, ces deux matériaux interchangent leurs rôles pour les trous de la bande de valence. Dans ce cas là, les électrons doivent d'abord passer dans le *B* pour pouvoir se recombiner avec les trous ou bien ce sont les trous qui doivent passer en sens inverse dans le *A*. Ce passage se fait par effet tunnel.



**Figure II-2 :** Structure de bande d'un super-réseau (a) type I. (b) type II.

L'apparition du paramètre « band-offset » aux interfaces nous permet de calculer les hauteurs de barrière dans la bande de conduction et dans la bande de valence. Ce paramètre représente la différence de gaps entre les puits et les barrières, il se divise en  $\Delta E_c$  et de valence  $\Delta E_v$ . Par exemple pour le composé InN/GaN le décalage de la bande de conduction  $\Delta E_c$  vaut 0.58 [9], 0.62 eV [10]. Ainsi pour les systèmes  $\text{In}_{0.17}\text{Al}_{0.83}\text{N}/\text{GaN}$ , le décalage de la bande de valence  $\Delta E_v$  était de 0,2 ~ 0,3 eV, et le décalage de la bande de conduction  $\Delta E_c$  est important, à savoir de 0,9 à 1,0 eV [11]. En dessous de la limite de l'épaisseur du puits (l'épaisseur critique), il est possible d'empiler plusieurs puits dans un même échantillon pour avoir un multipuits quantique. Dans ce cas là lorsque les barrières sont épaisses ou que leur énergie  $\Delta E$  est élevée, les interactions entre les puits sont négligeables et chaque puits agit indépendamment des autres ce qui va conduit à la diminution de l'effet tunnel.

Donc on peut dire que pour des largeurs de barrière supérieures à la longueur d'onde, les puits quantiques sont indépendants l'un de l'autre, on parle de Multi-Puits quantiques non couplés. Si par contre, ces largeurs sont inférieures à la longueur d'onde, les puits quantiques sont dépendants l'un de l'autre, et les Multi-Puits quantiques sont couplés.

#### II-4 Les superréseaux polaires :

Dans les hétérostructures de nitrure l'origine du champ électrique interne est une conséquence de la polarisation macroscopique qui existe dans le matériau. Dans le cas d'un cristal à phase hexagonale (*wurtzite*) contenant deux atomes de natures différentes comme Ga et N, l'électronégativité de l'azote est plus importante que celle du gallium où la répartition du nuage électronique le long d'une liaison Ga-N est déformée vers l'atome d'azote. Lorsque le barycentre des charges négatives et positives qui est due à la distribution des densités électroniques autour des différents atomes ne coïncide pas, il y a apparition de dipôles électriques microscopiques (apparition de polarisation spontanée  $P_{SP}$ ), parallèle à l'axe (c), orienté de l'atome d'azote (de charge négative) vers l'atome de gallium (de charge positive). Dans la phase blende de zinc de GaN, si le cristal est soumis à une contrainte selon l'axe [100], les barycentres des charges positives et négatives restent confondus [12]. A l'inverse, si la contrainte a lieu selon l'axe [111] en phase cubique ou [000-1] en

phase hexagonale, un dipôle électrique pourra se former, créant ainsi une polarisation macroscopique dans le cristal appelée polarisation piézoélectrique  $P_{PZ}$  [12]. Donc si la polarisation existe indépendamment de toute contrainte, on parle de polarisation spontanée  $P_{SP}$ , si par contre elle est induite par une déformation du cristal due à la contrainte mécanique (tension ou compression), il s'agit d'une polarisation piézoélectrique  $P_{PZ}$ .

Une polarisation  $P$ , quelque soit son origine, induit à la surface du cristal une densité surfacique de charge  $\sigma$  donnée par :

$$\sigma = \vec{P} \cdot \vec{n} \tag{II-1}$$

Où  $\vec{n}$  est le vecteur unitaire normal à la surface et orienté vers l'extérieur.

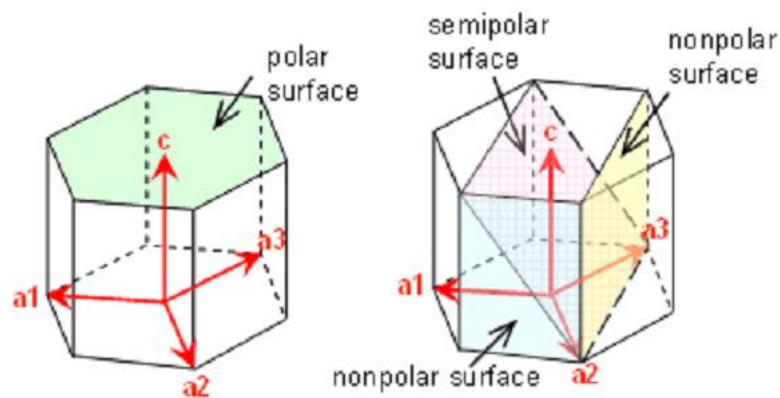


Figure II-3 : Vues schématiques du plan polaire, des plans non polaires et d'un plan semi-polaire [13].

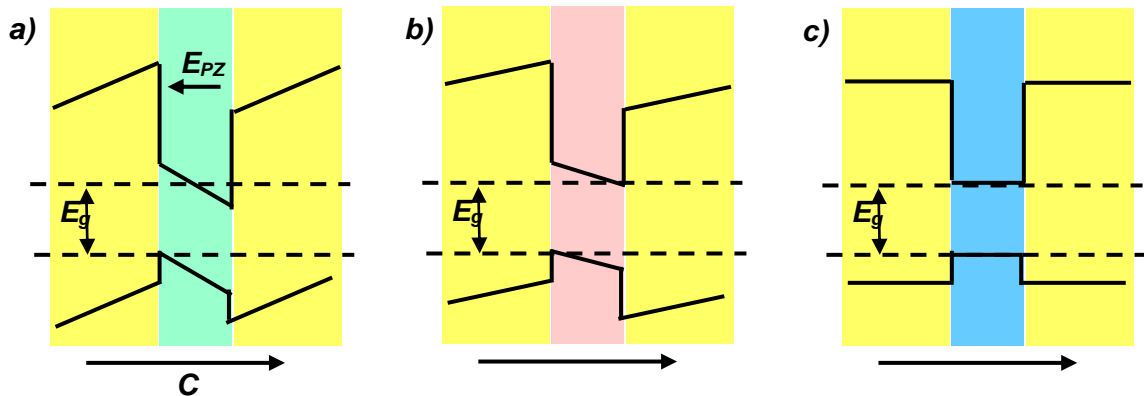
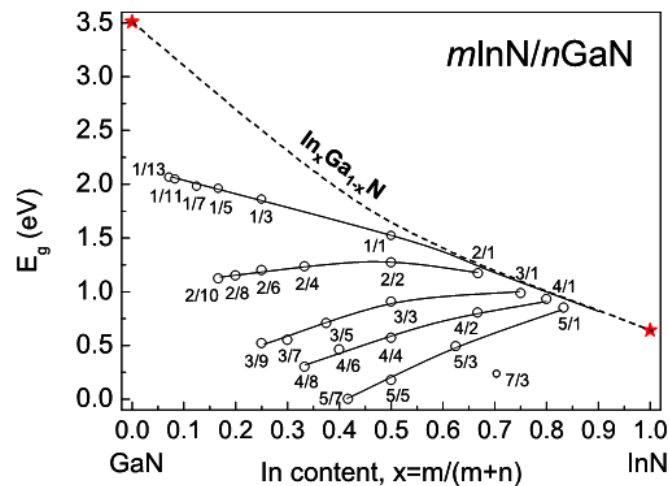


Figure II-4 : Structure de bandes d'un SL a) polaire avec l'effet du champ électrique interne b) semi-polaire c) non polaire [13]

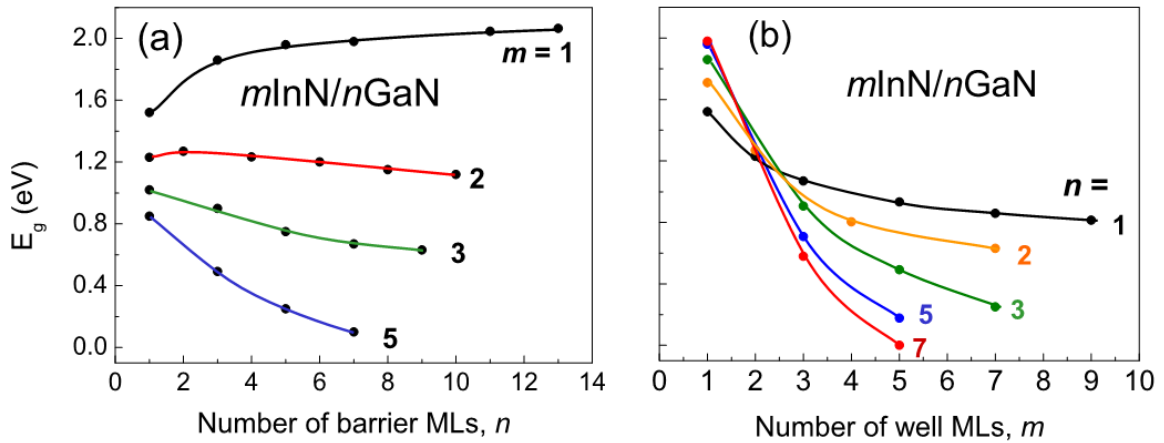


Dans la *figure II-5* la variation des bandes interdites pour le SL polaire  $m\text{InN} / n\text{GaN}$  de la structure hexagonale (*wurzite*) orientée (0001), par rapport à la teneur en cation (In ou Ga),  $x = m / (m + n)$ , diffèrent à celle de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Seuls pour les SL ( $m/1$ ) les bandes interdites sont similaires aux gaps de l'alliage ternaire avec la même composition  $x$ . Il est particulièrement visible dans le SL  $m\text{InN} / n\text{GaN}$  (pour  $m \geq 3$  et  $n \geq 5$ ), où les calculs donnent un  $E_g$  plus petit que le  $E_g$  de l' $\text{InN}$  (0,65 eV). Les valeurs les plus réduites de la bande interdite se produisent pour  $m = n \geq 5$ . Pour les SL ( $2/n$ ), ( $3/n$ ), ( $4/n$ ) et ( $5/n$ ),  $E_g$  augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la barrière.



**Figure II-5** : Variation de la bande interdite pour les SL  $m\text{InN} / n\text{GaN}$  en fonction de la composition  $x$ , comparée à celle de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  présenté en courbe pointillée [1].

La *figure II-6 (a)* et (*b*) représente la variation des bandes interdites en fonction des épaisseurs de barrière et de puits, c'est-à-dire  $n$  et  $m$ . En ce qui concerne la dépendance de l'épaisseur de la barrière (*figure II-6 (a)*), le gap au début (pour  $m = 1$ ) augmente rapidement jusqu'à  $n = 5$ , puis se sature. Ainsi dans cette figure, le passage d'une tendance croissante à une tendance décroissante se produisant pour une largeur de puits  $m = 2$ . En revanche, pour les SLs avec un nombre de monocouche (ML) d' $\text{InN}$  élevé, la bande interdite diminue avec l'augmentation de l'épaisseur du puits et de la barrière. Pour la *figure II-6 (b)*, le gap diminue fortement avec l'augmentation de l'épaisseur du puits.



**Figure II-6 :** Bandes interdites calculées, pour les SL  $m\text{InN} / n\text{GaN}$  par rapport aux épaisseurs de la barrière (a) et du puits (b) exprimées en nombre de monocouches (ML) [1].

Dans les SLs polaires les champs électriques réduisent le chevauchement de la fonction d'onde électron-trou et abaisse les taux de recombinaison radiative associés. Par conséquent, l'efficacité des dispositifs optoélectroniques. Une façon de réduire ou même d'éliminer le champ électrique interne consiste à faire croître les structures de puits quantiques semi-polaires ou non polaires [14–15]. Il a été démontré [16–17] que la croissance par épitaxie de  $\text{InGaN} / \text{GaN}$  dans une direction non polaire permet la fabrication de structures quantiques exemptes de champs électrostatiques, avec une efficacité optique améliorée.

### II-5 Symétrie des superréseaux :

Les superréseaux semi-conducteurs présentent une symétrie supplémentaire par rapport à la symétrie propre aux massifs qui le constituent du fait de la nouvelle périodicité artificielle. Par exemple, dans le cas idéal, si les deux massifs  $A$  et  $B$  ont le même paramètre du réseau  $a$  alors la période dans la zone de Brillouin de chacun d'entre eux est  $2\pi/a$ , et si pour un superréseau contenant  $m$  plans atomiques du massif  $A$  et  $n$  plans atomiques du massifs  $B$  (un plan atomique dans le cas de massifs de type zinc blende, contient deux rangées d'atomes : un cation et un anion), alors sa période dans la direction de croissance sera  $(m+n) \cdot a/2$  et sa période dans la zone de Brillouin sera  $2\pi/\{(m+n) \cdot a/2\}$  [8].

Pour les deux massifs  $A$  et  $B$  cristallisant dans le zinc blende, les vecteurs du réseau direct sont :

$$\begin{cases} e_1 = (1,0,1)a/2 \\ e_2 = (1,1,0)a/2 \\ e_3 = (0,1,1)a/2 \end{cases} \quad (II-2)$$

Et les vecteurs du réseau réciproque sont :

$$\begin{cases} k_1 = (1, -1, 1)2\pi/a \\ k_2 = (1, 1, -1)2\pi/a \\ K_3 = (-1, 1, 1)2\pi/a \end{cases} \quad (II-3)$$

Dans le cas de superréseau  $A/B$  avec  $OZ$  comme axe de croissance (avec  $m=1$  couche atomique de  $A$  et  $n=1$  couche atomique de  $B$ ), il possède la symétrie tétragonale simple avec les vecteurs du réseau direct suivants:

$$\begin{cases} e_1 = (1, -1, 0). a/2 \\ e_2 = (1, 1, 0). a/2 \\ e_3 = (0, 0, 1)[(m + n). \frac{a}{2}] \end{cases} \quad (II-4)$$

Et les vecteurs du réseau réciproque sont :

$$\begin{cases} k_1 = (1, -1, 0)2\pi/a \\ k_2 = (1, 1, 0)2\pi/a \\ K_3 = (0, 0, 1)[\left(\frac{2\pi}{a}\right). \frac{2}{m+n}] \end{cases} \quad (II-5)$$

## II-6 Contraintes et déformations :

La fabrication des superréseaux élaborés par épitaxie, met en jeu des contraintes et des déformations. On dit que deux couches, de même structure cristalline, mais de composition différente restent cohérentes si elles se déforment dans le plan de croissance de manière à avoir les mêmes distances inter-atomiques dans ce plan. Il arrive que des superréseaux soient fabriqués à partir de massifs

avec des paramètres de maille très différents, ce qui va avoir pour conséquence l'apparition d'une contrainte à l'interface, ces contraintes peuvent modifier la largeur de bande interdite, lever la dégénérescence de la bande de valence et générer une polarisation d'origine piézo-électrique [18]. Ces autocontraintes qui sont dues à la croissance, présentent dans un certains cas un avantage d'améliorer propriétés optoélectroniques des superréseaux. Lorsqu'une contrainte externe est appliquée aux superréseaux, les propriétés optoélectroniques de ces superréseaux sont influencées similairement.

Par exemple, dans le cas de la croissance du superréseau In (Ga) N / GaN, les puits quantiques (QW) sont fortement déformés de 10,6% en raison de désaccorde de paramètre de réseau entre InN et GaN. En fonction des épaisseurs de couche et des conditions de croissance, une relaxation de l'In (Ga) N peut avoir lieu. Cela se produit lorsqu'une épaisseur de couches contenant de l'indium dépasse l'épaisseur dite critique [2].

## Références bibliographiques

- [1] *Gorczyca, T. Suski, N. E. Christensen and A. Svane.* J. Phys.: Condens. Matter 30 (2018) 063001 (29pp).
- [2] *G. Staszczak, I. Gorczyca, T. Suski, X. Q. Wang, N. E. Christensen et al.* superlattices Journal of Applied Physics 113, 123101 (2013).
- [3] *W. Sun, C-K. Tan & N. Tansu.* III-Nitride Digital Alloy: Electronics and Optoelectronics Properties of the InN/GaN Ultra-Short Period Superlattice Nanostructures. SCIENTIFIC REPORTS. Jul 2017.
- [4] *Suski T, Schulz T, Albrecht M, Wang X Q, Gorczyca I, Skrobas K, Christensen N E and Svane A.* 2014 Appl. Phys. Lett. 104 182103
- [5] *Duff A, Lympirakis L and Neugebauer J.* 2015 Phys. Status Solidi b 252 855–65.
- [6] *E MONROY* " Epitaxie par jets moléculaires des nitrides III-V: Physique de la croissance de couches minces et de nanostructures ". Diplôme d'habilitation en Physique des Matériaux et des Microstructures. Université Joseph Fourier – Grenoble I. 2005.
- [7] *H Mathieu,* " Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 6<sup>e</sup> édition Masson, Paris (2009).
- [8] *N. Sekkal.* INITIATION AU CALCUL DES STRUCTURES DE BANDES INTRODUCTION AUX HETEROSTRUCTURES SEMICONDUCTRICES. *Support de Cours de Post-Graduation & Applications (Physique).*
- [9] *P. King, T. Veal, C. Kendrick, L. Bailey, S. Durbin, and C. McConville,* "InN/GaN Valence Band Offset: High-Resolution x-Ray Photoemission Spectroscopy Measurements," *Phys.Rev.B*, vol. 78, n<sup>o</sup>. 3, p. 033308, 2008.
- [10] *P. Moses and C. V. de Walle,* " Band Bowing and Band Alignment in InGaN Alloys," *Appl.Phys.Lett.*, vol. 96, n<sup>o</sup>. 2, p. 021908, 2010.
- [11] *M. Akazawa, T. Matsuyama, T. Hashizume, M. Hiroki, S. Yamahata et al.* "Small valence-band offset of In<sub>0.17</sub>Al<sub>0.83</sub>N/GaN heterostructure grown by metal-organic vapor phase epitaxy". *Appl. Phys. Lett.* 96, 132104 (2010); doi: 10.1063/1.3368689.
- [12] *F. ROL.* " Étude optique de boîtes quantiques uniques non polaires de GaN/AlN ". Thèse de doctorat physique. Université Joseph Fourier – Grenoble I. 2007.
- [13] *A. DAS.* " Boîtes quantiques de semi-conducteurs nitrides pour des applications aux capteurs opto-chimiques " Thèse de doctorat Physique / Nanophysique. Université de Grenoble. 2012.
- [14] *Takeuchi T, Wetzel C, Yamaguchi S, Sakai H, Amano H, Akasaki I, Kaneko Y, Nakagawa S, Yamaoka Y and Yamada N.* 1998 Appl. Phys. Lett. 73 1691

- [15] *Lefebvre P, Allegre J, Gil B, Mathieu H, Grandjean N, Leroux M, Massies J and Bigenwald P.* 1999 Phys. Rev. B 59 1536
- [16] *Farrell R M, Haeger D A, Hsu P S, Schmidt M C, Fujito K, Feezell D F, DenBaars S P, Speck J S and Nakamura S.* 2010 Appl. Phys. Lett. 96 231113
- [17] *Woung-Kyun N, Moon-Deock K and Jae-Eung O.* 2011 J. Appl. Phys. 119 123108
- [18] *R. ANDRE " EFFET PIEZO-ELECTRIQUE DANS LES PUIITS QUANTIQUES CdTe/CdMnTe ET CdTe/CdZnTe " Thèse de doctorat Physique. Université Joseph Fourier – Grenoble I. 1992.*

# Chapitre III

## Méthode de calcul *FP-LMTO*

### III-1 Introduction

L'étude des matériaux, théorique et expérimentale, ont pour objectif d'expliquer les propriétés électroniques des systèmes d'électrons en interaction et cela en se basant sur l'équation de *Schrödinger* [1]. En fait, la connaissance de ces propriétés permet d'obtenir des informations sur les caractéristiques structurales, mécaniques, électroniques, vibrationnelles, thermiques et optiques. Cependant, les électrons et les noyaux qui composent les matériaux constituent un système à corps multiples en forte interactions, ce qui fait que la résolution directe de l'équation de *Schrödinger* est impossible. Pour cela on fait appel à la simulation numérique, dont le but est de simplifier la résolution de l'équation caractéristique du système à plusieurs particules.

Il existe plusieurs méthodes de calculs des propriétés électroniques, qui sont classées en trois principaux types selon la nécessité des résultats expérimentaux ou des données fondamentales : Les méthodes empiriques pour lesquelles les calculs nécessitent des résultats expérimentaux, les méthodes semi-empiriques pour lesquelles les calculs nécessitant à la fois des résultats expérimentaux et des données fondamentales et finalement les méthodes *ab-initio* pour lesquelles les calculs nécessitent seulement les données fondamentales. Les méthodes de type *ab-initio* sont basées sur la résolution de l'équation de *Schrödinger*. Ces méthodes permettent de déterminer les grandeurs physiques et chimiques d'un tel système on base sur de la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*). Le point commun de ces méthodes est la résolution des trois équations de *Kohn-Sham* de façon auto-cohérente. Cette dernière est l'origine de plusieurs méthodes numériques, parmi ces méthodes qui sont utilisées dans le calcul *ab-initio*, la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (*FP-LAPW* : *Full Potential Linearized Augmented Plane Wave*), la méthode des orbitales *muffin-tin* linéarisées à potentiel

total (FP-LMTO : *Full Potential Linearized Muffin Tins Orbitals*) qui permettent de gagner plusieurs ordres de grandeur dans le temps de calcul qui seront présentées dans ce chapitre et la méthode où les fonctions de bases utilisées sont les ondes planes *PW* (*Plane Waves*) et les pseudo-potentiels *PP* (*Pseudo-Potentiel*).

Au cours de ce chapitre, nous présentons en premier lieu, le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*), associée à ses fonctionnelles usuelles, Approximation de Densité Locale (*LDA*) et Approximation du Gradient Généralisé (*GGA*). Ces approches constituent les bases des calculs de la structure électronique des systèmes de noyaux et d'électrons à partir des premiers principes. Ensuite, nous détaillons la méthode *LMTO* (*Linear Muffin-Tin Orbitals*) [2, 3] qui est l'une des méthodes *ab-initio* afin de calculer les différentes grandeurs telle que les énergies des bandes et la densité d'état, qui interviennent de façon prépondérante lors de l'étude de différentes structures. Méthode précise car tenant compte de la structure électronique, la méthode *LMTO* nous permet, lorsque les données expérimentales n'existent pas, de tester le potentiel sur des effets très fins.

### III-2 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

La théorie de la fonctionnelle de la densité *DFT* (*Density Functional Theory*) est une méthode de calcul quantique permettant l'étude de la structure électronique de la matière, il s'agit de l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs quantiques en raison de son application possible à des systèmes de tailles très variées, allant de quelques atomes à plusieurs centaines. Ainsi, selon les deux théorèmes de *Hohenberg et Kohn* [4], on peut connaître totalement l'état d'un système électronique en déterminant sa densité électronique et on peut obtenir la densité électronique de l'état fondamental en minimisant l'énergie du système. Ensuite, *Kohn et Sham* [5] ont formulé une méthode qui est devenue la base de plusieurs des méthodes de structure électronique des atomes, des molécules, et de la matière condensée. Dans cette approche la *DFT* permet d'inclure la corrélation électronique et donne, en général, des meilleurs résultats pour la plupart des systèmes.



Le principe de la *DFT* est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique par la densité électronique en tant que quantité de base pour les calculs afin de réduire les coordonnées des variables inconnues.

Il est possible de déterminer la densité et toutes les propriétés de l'état fondamental de tout système par une simple recherche du minimum de l'énergie totale, où l'énergie est considérée comme une fonctionnelle de la densité de charge  $\rho(r)$ . Elle s'écrit sous la forme suivante :

$$E_T(\rho) = T(\rho) + U(\rho) + E_{XC}(\rho) \quad (\text{III-1})$$

Où,  $T(\rho)$  est la fonctionnelle d'énergie cinétique d'un système d'électrons sans interaction ayant une densité  $\rho(r)$ ,  $U(\rho)$  est la fonctionnelle de l'énergie électrostatique classique due aux interactions coulombiennes entre les électrons (appelé énergie de *Hartree*) et  $E_{xc}(\rho)$  représente la fonctionnelle d'échange et de corrélation incluant à l'énergie totale toutes les contributions de N-électrons en interactions. L'énergie d'échange représente l'énergie coulombienne, électrostatique des électrons. L'énergie de corrélation est la différence entre l'énergie totale du système à plusieurs corps et l'énergie calculée par l'approximation de *Hartree-Fock* [6].

Par définition  $T(\rho)$  s'écrit sous la forme [7]:

$$T(\rho) = \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | -\frac{\nabla^2}{2} | \psi_i \rangle \quad (\text{III-2})$$

La densité électronique est exprimée par :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2 \quad (\text{III-3})$$

D'un point de vue fondamental, les fonctions  $\psi_i(r)$  sont uniquement un outil pour calculer l'énergie totale et la densité électronique, ces fonctions n'ont pas de signification physique directe. *Kohn et Sham*, ont montré que la vraie densité est donnée par la solution auto-cohérente (self consistent) de l'ensemble des équations à une particule de type Schrödinger, appelées équations de *Kohn et Sham* :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right\} \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad (\text{III-4})$$

L'état fondamental d'un système d'électrons non interactifs est placé dans un potentiel effectif  $V_{eff}(r)$  :

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{XC}(r) \quad (III-5)$$

Avec  $V_{XC}(r)$  : Le potentiel d'échange et de corrélation défini comme une dérivée fonctionnelle de l'énergie d'échange-corrélation :

$$V_{XC}(r) = \frac{\partial E_{XC}[\rho(r)]}{\partial \rho(r)} \quad (III-6)$$

$$V_H(r) = \int \rho(r') \frac{1}{|r-r'|} dr' \quad (III-7)$$

Où  $V_H(r)$  est appelé potentiel de Hartree et  $V_{ext}(r)$  est le potentiel externe.

Les équations (Eq. III-4) appelées équations de *Kohn-Sham* doivent être résolues de façon itérative : on part d'un potentiel effectif  $V_{eff}(r)$  puis on calcule les fonctions  $\psi_i(r)$ . Le procédé est répété jusqu'à ce que  $V_{eff}(r)$  ne varie plus, la méthode est dite auto-cohérente. En théorie si la valeur exacte de  $E_{XC}(\rho)$  était connue la densité  $\rho(r)$  et l'énergie  $E_T$  calculée serait exacte, mais comme donner une expression de  $E_{XC}(\rho)$  pour un système arbitraire est impossible il faut l'approximer [8].

### III-3 Les approximations

Dans l'expression III-1, la seule fonctionnelle de la densité qui demeure inconnue est la fonctionnelle d'échange-corrélation  $E_{XC}[\rho(r)]$ . Plus la connaissance de cette dernière sera précise, plus la densité sera connue avec précision, et donc plus l'énergie sera proche de l'énergie exacte. Pour cela, diverses fonctionnelles d'échange-corrélation ont été proposées.

#### III-3-1 Approximation de la densité locale (LDA)

Dans le modèle le plus simple est l'Approximation de Densité Locale (*LDA – Local Density Approximation*), on suppose que la densité électronique varie lentement, de sorte que l'énergie d'échange et de corrélation peut être calculée à partir de la densité d'un gaz d'électrons homogène pour lequel la densité

électronique est constante en tout point de l'espace. Dans la *LDA*, on définit une énergie XC par particule,  $\mathcal{E}_{XC}^{LDA}[\rho]$ , telle que :

$$E_{XC}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \mathcal{E}_{XC}^{LDA}[\rho(r)] dr \quad (III-8)$$

Où  $\mathcal{E}_{XC}^{LDA}[\rho]$  est l'énergie d'échange-corrélation par électron, dans le gaz uniforme d'électrons de densité  $\rho(r)$  et  $r$  est appelé rayon de *Wigner-Seitz* et correspond au rayon moyen de la sphère à laquelle on assimile un électron à cette densité :

$$r = [3/(4\pi\rho)]^{1/3} \quad (III-9)$$

Le potentiel d'échange-corrélation s'écrit alors :

$$V_{XC}^{LDA}[\rho] = \frac{\delta E_{XC}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} = \mathcal{E}_{XC}^{LDA}[\rho(r)] + \rho(r) \frac{d\mathcal{E}_{XC}^{LDA}}{d\rho} \quad (III-10)$$

Dans  $\mathcal{E}_{XC}^{LDA}[\rho]$ , les contributions à l'échange et à la corrélation sont écrites séparément :

$$\mathcal{E}_{XC}^{LDA}[\rho] = \mathcal{E}_X^{LDA}[\rho] + \mathcal{E}_C^{LDA}[\rho] \quad (III-11)$$

Le gaz d'électrons homogène à densité constante  $\rho(r)$  est alors le modèle pour la partie d'échange :

$$\mathcal{E}_X^{LDA}[\rho] = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \rho^{1/3} \quad (III-12)$$

Et l'énergie de corrélation par particule,  $\mathcal{E}_C^{LDA}[\rho]$ , a des expressions différentes dans les différentes implémentations de la *LDA*. Parmi les premières approximations à  $\mathcal{E}_C^{LDA}[\rho]$ , on trouve les fonctions de *Hedin-Lundqvist* [9] et de *Ceperley et Adler* [10], obtenue par des calculs de *Monte-Carlo* quantique. Ces fonctions offrent des résultats essentiellement exacts pour le cas de systèmes non polarisés et complètement polarisés et, à partir d'elles, des formes analytiques interpolées pour  $\mathcal{E}_C^{LDA}[\rho]$  ont été développées [11]. C'est le cas, par exemple, des formules paramétrisées de *Vosko, Wilk et Nusair* [12], et *Perdew et Zunger* [13].

La *LDA* est souvent une approximation efficace, elle est acceptable si le gradient de la densité est suffisamment faible. Cependant, elle donne des valeurs non satisfaisantes, comme la sous-estimation systématique de l'énergie de cohésion des solides et des paramètres de maille [14, 15]. En chimie quantique elle est néanmoins beaucoup moins utilisée car elle ne donne pas d'informations quantitatives sur les liaisons chimiques dans les molécules [8].

### III-3-2 Approximation du gradient généralisé (GGA)

L'approximation du gradient généralisé *GGA* [13, 16] est une amélioration de la *LDA* dans le traitement de l'énergie d'échange-corrélation. Dans l'approximation locale, le potentiel d'échange et de corrélation ne dépend que de la densité  $\rho(r)$  alors que dans l'approximation *GGA*, le potentiel s'exprime en fonction de la densité électronique locale  $\rho(r)$  et de son gradient  $\nabla(r)$ .

Les approximations de type *GGA* consistent à écrire :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho] = \int \rho(r) \mathcal{E}_{XC}^{GGA}[\rho(r), |\nabla\rho(r)|] dr \quad (III-13)$$

Les contributions de l'échange et de la corrélation étant souvent développées séparément on peut écrire :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho, \nabla\rho] = E_X^{GGA}[\rho, \nabla\rho] + E_C^{GGA}[\rho, \nabla\rho] \quad (III-14)$$

De façon générale, l'approximation *GGA* donne de bons résultats et permet d'améliorer par rapport à la *LDA* un certain nombre de propriétés comme les énergies totales, les énergies de cohésion et les paramètres de maille, mais ne conduit pas à une description précise de toutes les propriétés d'un matériau semi-conducteur à savoir ses propriétés électroniques tel que les largeurs de bandes interdites des isolants et des semi-conducteurs qui restent beaucoup trop faibles [17-18]. Plusieurs développements de  $E_{XC}^{GGA}$  ont été proposés, parmi lesquels ressortent la fonctionnelle de *Perdew, Burke et Ernzerhof* [16] et la fonctionnelle *PW91* de *Perdew et Wang* [19].

### III-4 La méthode FP-LMTO

Il existe plusieurs méthodes de calculs pour déterminer les propriétés de solides, parmi eux les méthodes *ab-initio* pour lesquelles les calculs nécessitent des données fondamentales. La méthode linéaire des orbitales *muffin-tin* (LMTO) est parmi les approches importantes pour résoudre les équations de la fonctionnelle de la densité [20] pour un système de matière condensée. Dans cette méthode le potentiel self-consistent utilisé est basé sur l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour le calcul de l'énergie d'échange et de corrélation utilisé dans la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Pour augmenter le nombre de système auxquels la méthode LMTO peut être appliquée, y compris les systèmes avec une base symétrie, Un certains nombre de techniques ont été développées [21], parmi lesquels on trouve la méthode FP-LMTO (potentiel total-linéaire des orbitaux muffin-tin). Dans cette approche qui a été améliorée par Methfessel [21] en considérant un lissage des fonctions de *Hankel* qui jouent le rôle des fonctions enveloppes de la méthode (LMTO), c'est-à-dire que chaque fonction de base se compose d'une solution numérique à l'intérieur d'une sphère *muffin-tin* assortie avec la valeur et la pente à une queue de fonction de *Hankel* à la frontière de la sphère, par contre Savravo [22] a considéré les fonctions de *Hankel* avec l'introduction de *Fourier* pour les calculs dans les régions interstitielles.

L'approximation *Muffin-Tin* consiste à découpler le cristal en deux régions :

- Des sphères appelées sphère *Muffin-Tin* [23], englobent chaque atome où le potentiel est supposé à symétrie sphérique.
- Des zones interstitielles (ZI) où le potentiel est lisse où variant très lentement

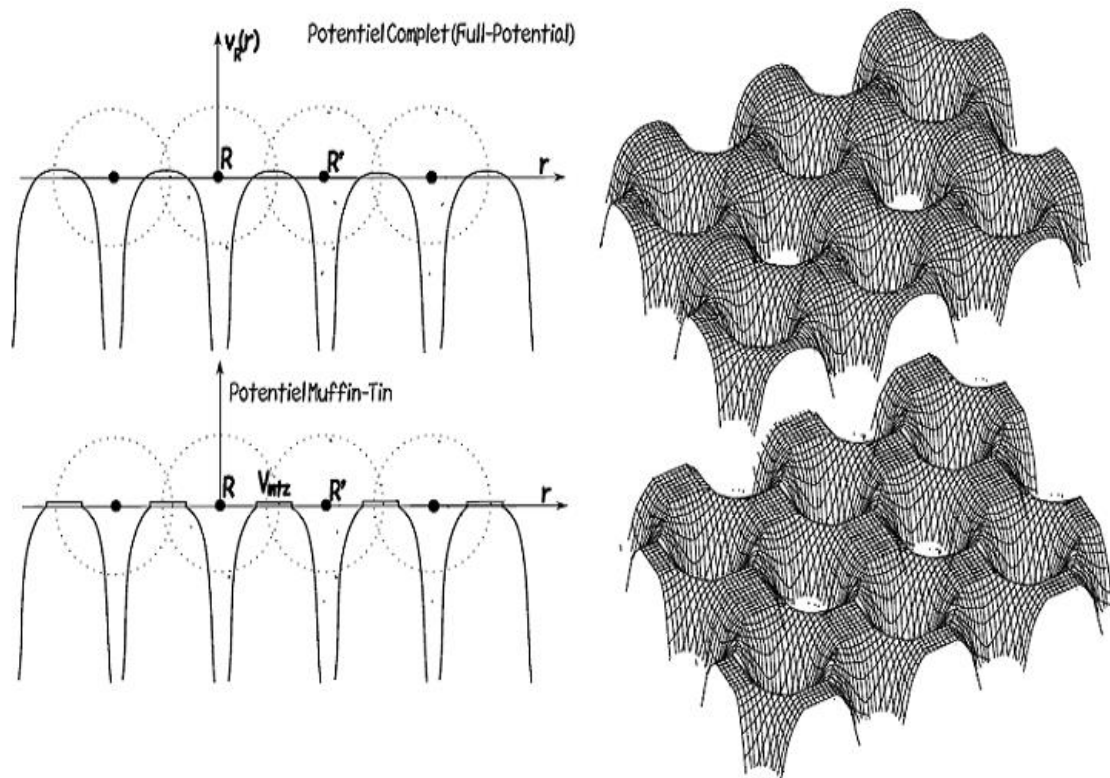
Dans le cas de l'approximation ASA (*Atomic Sphere Approximation*), les sphères muffin-tin peuvent se recouvrir en les identifiant aux sphères atomiques de *Wigner-Seitz* qui remplissent tout l'espace, tandis que dans le cas de l'approximation FP (*Full Potential*), les sphères muffin-tin sont, au plus, tangentes entre elles.

Le potentiel de muffin-tin peut être formellement défini pour tout ( $r$ ) par :

$$V_{MT}(r) = \begin{cases} V(r) & \text{si } r \leq R_{MT} \\ V_{MTZ} & \text{si } r \geq R_{MT} \end{cases} \quad (\text{III-15})$$

Où  $R_{MT}$  est le rayon de la sphère muffin-tin,  $V(r)$  est le potentiel sphérique à l'intérieur de la sphère muffin-tin et  $V_{MTZ}$  est la valeur du potentiel constant dans la région interstitielle.

Le calcul de structure électronique d'un cristal peut être divisé en deux parties, la définition du potentiel cristallin effectif et la résolution de l'équation de *Schrödinger*. La résolution de cette équation permet l'obtention des fonctions d'onde dans les deux régions. Dans la région sphérique, elles sont représentées par le produit des fonctions radiales et harmoniques sphériques, et dans la région interstitielle elles sont tout simplement des ondes planes.



**Figure III-1:** Profils des Potentiels complets (FP) et Muffin-Tin (MT) [24].

### III-4-1 Instruction de base

On suppose l'espace cristallin divisé en sphère d'atome muffin-tin non chevauchées (ou légèrement chevauchées) est une région restante dite région interstitielle. La densité de charge et le potentiel effectif sont augmentés par des harmoniques sphériques à l'intérieure de sphère  $\tau$  [25]:

$$\rho_{\tau}(r_{\tau}) = \sum_L \rho_{L\tau}(r_{\tau}) i^l Y_L(r) \quad (III-16)$$

$$V_{\tau}(r_{\tau}) = \sum_L V_{L\tau}(r_{\tau}) i^l Y_L(r) \quad (III-17)$$

Où  $Y_L(r)$  est l'orbitale sphérique a symétrie  $L$ ,  $l$  est le moment orbital.

Dans la région interstitielle, la densité de charge et le potentiel effectif sont développés en série de *Fourier* :

$$\rho_i(r) = \sum_k e^{ikr} \rho(k) \quad (III-18)$$

$$V_i(r) = \sum_k e^{ikr} V(k) \quad (III-19)$$

L'équation de *Schrödinger* est résolue en termes du principe variationnel :

$$(-\nabla^2 + V - E_i)\psi_i = 0 \quad (III-20)$$

La méthode variationnel est une méthode approximative utilisée en mécanique quantique. Les paramètres variationnels sont ajustés jusqu'à ce que l'énergie de la fonction d'onde d'essai soit réduite au minimum. La fonction d'onde d'essai en résultant et son énergie correspondante sont des approximations à de fonction d'onde et à l'énergie exactes. La meilleure fonction d'onde d'essai approximative est celle avec de la plus basse énergie, ceci résulte du théorème variationnel, qui déclare que l'énergie de n'importe quelle fonction d'onde d'essai  $E$  est toujours une limite supérieure à l'énergie exacte  $E_0$  d'état fondamental.

Nous devons résoudre l'équation (III-4) de *Kohn-Sham* à un électron dans un potentiel effectif caractéristique du système d'atomes, puis construire la densité électronique donnée par la relation (III-5). Lors de résolution auto-consistante de l'équation (III-4), la densité électronique est utilisée pour écrire le potentiel effectif dans la prochaine itération, en résolvant l'équation de *Poisson* pour la contribution *d'Hartree*, en utilisant la méthode de la fonctionnelle de la densité pour la contribution d'échange et de corrélation.

Une fois que l'auto-consistante a été atteinte sur les paramètres définissant le potentiel, nous sommes en mesure de calculer l'énergie totale du système. L'équation (III-4) de *Kohn-Sham* peut être résolue en cherchant une solution sous la forme d'une combinaison linéaire de la fonction d'onde.

### III-4-2 Fonctions d'ondes

La fonction d'onde est représentée en deux régions, à l'intérieur de la sphère et dans la région interstitielle. Pour un atome centré en  $R$ , nous cherchons donc les fonctions d'ondes, solutions de l'équation (III-4) au point  $r$ . A l'intérieur de la sphère  $MT$ , elle est représentée comme une expansion à un centre.

$$\psi_i^K(r_{T'}) = \Phi_{kL}^K(r_T)\delta_{TT'} + \sum_{L'} \Phi_{kL'}^K(r_{T'})S_{L,L'}^K(T, T', k) \quad (III-21)$$

Où  $S_{L,L'}^K$  sont les constantes de structure

Les fonctions de bases  $\psi_i^K(r_{T'})$  doivent être considérées d'une façon que l'orbitale  $i$  centré sur l'atome  $T$  apparaît lorsqu'on le visionne à partir du site de l'atome.

Nous introduisons maintenant une notation convenable pour les fonctions de bases :

$$|\Psi_i(\vec{K})\rangle = |\psi_i(\vec{K})\rangle + |P_i(\vec{K})\rangle \quad (III-22)$$

Où  $|\psi_i(\vec{K})\rangle$  est la fonction de base à l'intérieur des sphères Muffin-Tins et  $|P_i(\vec{K})\rangle$  représente les fonctions de base en dehors des sphères (la queue).



Cette fonction est ensuite introduite dans l'équation (III-4) de *Kohn-Sham*, qui conduit au déterminant séculaire, dont les solutions sont les états propres de l'énergie du système d'électrons.

### III-4-3 Le cycle auto-cohérent

Le code *LMTART* [26] utilisé dans nos calculs est basé sur la méthode *FP-LMTO* développée par Andersen [6], il effectue des calculs de structure électronique, énergie totale et les calculs de force des solides en utilisant l'approximation du gradient généralisé (*GGA*) de théorie de la fonctionnelle de la densité. Il existe deux régimes importants dans un calcul à l'aide de code *LMTART* :

- Calcul self consistant de la densité de charge.
- Calcul de différentes propriétés du matériau

Il est recommandé dans un calcul densité de charge d'augmenter le nombre d'itérations au maximum pour assurer la convergence de l'énergie total et de la densité de charge.

Les différentes étapes du cycle itératif sont résumées dans l'algorithme de la *figure III-2*. La première étape consiste à utiliser une densité et des fonctions d'ondes d'essai, issues de la superposition de potentiels atomiques. Le cycle auto cohérent peut alors commencer.

A partir de cette densité de départ  $\rho_{in}$  à l'intérieur des sphères *MT* et dans les *ZI*, le potentiel est construit par le calcul de *Hartree*  $V_H$  que l'on détermine à partir de l'équation de *Poisson* et le calcul du potentiel d'échange-corrélation  $V_{xc}$  par des approximations choisies. L'équation de *Dirac* est ensuite résolue pour obtenir la densité de cœur. Le code résout ensuite le problème aux valeurs propres pour obtenir les vecteurs propres et les énergies de bandes. Le calcul du niveau de *Fermi* permet d'obtenir le nombre d'occupations partielles et d'en déduire la nouvelle densité de charge notée  $\rho_{out}$ . Cette première itération permet d'obtenir une estimation des valeurs propres de l'énergie et de nouveaux moments plus fins, qui serviront à leur tour, à exprimer une nouvelle densité électronique et des meilleurs paramètres du potentiel dans l'itération suivante.

La convergence sera atteinte lorsque la différence d'énergie totale entre deux itérations successives sera inférieure à une certaine précision (environ  $10^{-4}$  Ryd). La procédure de mélange la plus simple des densités électronique est le mélange linéaire. Le mixage linéaire des densités d'entrées ( $\rho_{in}^{(n)}$ ) et les densités de sorties ( $\rho_{out}^{(n)}$ ) d'une itération ( $n$ ) pour préparer une densité d'entrée de l'itération ( $n + 1$ ) :

$$\rho_{in}^{n+1} = \alpha \cdot \rho_{out}^n + (1 - \alpha) \cdot \rho_{in}^n \quad (III-23)$$

Avec  $n$  le nombre d'itération et  $\alpha$  est choisie selon la précision recherchée dans les calculs. Une faible valeur de paramètre de mixage  $\alpha$  permet une bonne convergence.

Une fois l'auto-cohérence atteinte, il est possible de calculer les différentes propriétés du solide telles que la densité d'états totale ( $DOS$ ), les densités d'états partielles, la structure de bandes électroniques et les propriétés optiques.

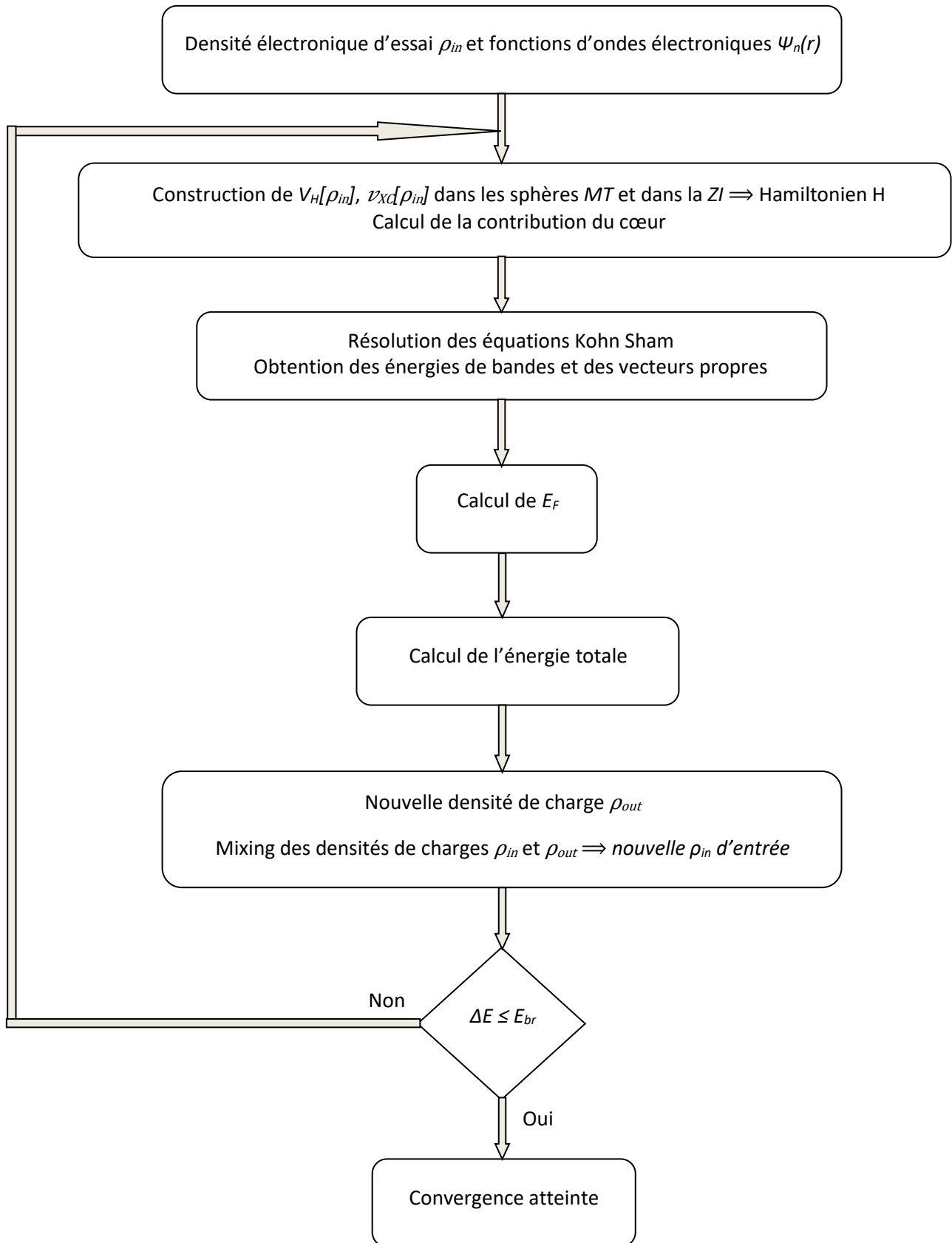


Figure III-2: Cycle auto-cohérent du code FP-LMTO

L'avantage principal de la méthode *FP-LMTO*, est que le problème de la structure électronique est résolu avec une très grande précision, de sorte que les énergies totales et les forces *Hellman-Feynman* peuvent être calculées avec une grande précision, tout en maintenant un ensemble de base limitée, ce qui rend l'analyse des résultats calculés simple [27]. Bien que l'emploi d'ondes planes ou sphériques soit d'un grand intérêt pratique, la base de fonctions de *Hankel FP LMTO* possède de nombreux avantages spécifiques qui accroissent son efficacité [28].

En tant qu'inconvénient principal, la complexité de l'approche doit être soulignée. En plus du plus grand effort de l'exécution dans l'application de l'ensemble de base de la méthode *LMTO*, un nombre de paramètres considérable doit être choisi raisonnablement.

Parmi les caractéristiques partagées par la méthode *LAPW* sont : La stabilité numérique dans le contexte de résoudre l'équation de *Schrödinger*. En plus, parce que chaque fonction séparée est déjà une solution de l'équation. L'ensemble de base de la méthode *LMTO* peut être également bien appliqué à tous les atomes dans la table périodique.

## Références bibliographiques

- [1] E. Schrödinger, Phys. Rev. 28, 1049 (1926).
- [2] H. Skriver, the LMTO method, Springer, New York 1984.
- [3] O.K. Andersen, Phys. Rev. B12, 3060, (1975).
- [4] J.P. Hohenberg, and W. Kohn, Phys. Rev. B136, 864 (1964).
- [5] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. 140 (1965) A1133.
- [6] V. Fock, Z. Phys. 61, (126) 1930; 62, (1930) 795.
- [7] R. A. Buckingham. Proc. Roy. Soc. London, A168 :264 (1938).
- [8] S. LE ROUX. " Étude par dynamique moléculaire ab-initio des verres de GeS<sub>2</sub> et (M<sub>2</sub>S)<sub>0.33</sub>(GeS<sub>2</sub>)<sub>0.66</sub> M=Na, Ag ". Thèse de doctorat Physico-chimie des Matériaux. Université de Montpellier II. 2008.
- [9] L. Hedin and S. Lundqvist, Solid State Physics, vol. 23 (Academic Press, New York, 1969).
- [10] D. M. Ceperley and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45, 566 (1980).
- [11] M. GRISOLIA. " Étude de structure électronique et de processus dynamiques de systèmes chimiques complexes ". Thèse de doctorat Physico-chimie Théorique. Université Toulouse III. 2010.
- [12] L. Vosko, H. Wilk and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980).
- [13] J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048-5079 (1981).
- [14] P.K. Nair, M. Ocampo, A. Fernandez and M. T. S. Nair, Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng. 1149 (1989) 88.
- [15] D.L. Mitchell, R.F. Wallis, Phys. Rev. 151 (1966) 581.
- [16] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett., 77(18) :3865-3868 (1996).
- [17] A. García, C. Elsässer, J. Zhu, S. G. Louie, and M. L. Cohen. Phys. Rev. B, 46(15) :9829-9832 (1992).
- [18] A. Zupan, P. Blaha, K. Schwarz, and J. P. Perdew. Phys. Rev. B, 58(17) :11266-11272 (1998).
- [19] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992).
- [20] W.R.L Lambrecht and O.K. Anderson, Phys.Rev.B 34, 2439,1986.

- [21] *M. Methfessel, C.O.Rodriguez, and O.K. Anderson*, Phys.Rev.B 40, 2009, 1989.
- [22] *S. Y. Savravo*, Phys. Rev. B 54, 16470 (1996).
- [23] *O.K. Andersen, T. Saha-Dasgubta, R.W. Tabk, C. Arcngeli, O. Jepsen, G. Krier*, "Electronic Structure and Physical Properties of Solids" The use of the LMTO Method, Eds.; H. Dreysse, Lecture Notes in Physics (Springer, Berlin) 3 (2000).
- [24] *J.M. Wills, O. Eriksson, M. Alouani, and D.L. Price*, Full-Potential LMTO total energy and force calculation, Electronic Structure and Physics Properties of Solids, H. Dreysse (Ed.), Springer-Verlag, Berlin, pp 148-167. (2000).
- [25] *S.Y.Savrasov et D.Y.Savrasov*, Phys.Rev. B46,12181 (1992) .
- [26] *S. Y. Savrasov*, "Full-Potential Program Package" LMTART 6.20"User MANUAL", L'Institute de Max-Planck, Germanie Juin (2003).
- [27] *M. Methfessel, M. van Schilfgaarde et R. A. Casali*, A Full-Potential LMTO Method Based on Smooth Hankel Functions (Springer-Verlag, Berlin 2000)
- [28] *O. Le Bacq* "Contribution à l'étude quantitative des défauts dans les métaux de transition par les calculs de structure électronique: Calculs ab-initio et développement de modèles de liaisons fortes spd". Thèse de doctorat Science et Génie des Matériaux. Institut National Polytechnique de Grenoble. 1999.

# Chapitre I V

## Résultats & Discussions

Au cours de ce chapitre, l'ensemble des résultats du travail effectué seront rassemblés et discutés où nous nous sommes attachés à mettre en évidence l'influence de certains paramètres intrinsèques. Pour cela, nous proposerons de suivre le plan d'étude suivant qui s'articule autour de deux grandes parties:

La première partie est consacrée en premier lieu à l'étude des propriétés structurales et électroniques des composés binaires InN, GaN et leurs alliages ternaires  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , en utilisant la méthode *FP-LMTO* dans la phase Zinc blende. Cette études nous a permis de déterminer l'effet et l'influence de la fraction " x " de l'indium sur le paramètre de réseau et le coefficient de compressibilité, ainsi sur la variation du gap d'énergie à travers le tracé des structures de bandes.

Pour achever cette première partie, on s'est focalisés sur la détermination de l'origine du paramètre de désordre optique « *bowing* » à travers la contribution des trois paramètres, la déformation du volume, l'échange de charge et la relaxation de la liaison structurale. Ainsi, le calcul de la densité d'état (*DOS*) totale et partielle, en calculant le taux d'occupation de chaque état atomique pour l'ensemble des binaires et des ternaires.

La deuxième partie, se concentre sur l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques des super-réseaux  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$  suivant les différentes directions des axes de croissances (001) et (110) afin de mètre en évidence l'effet du nombre de monocouches et les orientations cristallines.

## IV-1 Propriétés structurales et électroniques des binaires InN et GaN et du ternaire InGaN

### IV-1-1 Détails numériques

Relatif au binaires étudiés, une cellule cubique d'unité de 8 atomes a été considérée. Chaque position contient deux atomes, le premier atome est celui du Gallium (Ga) ou bien de l'Indium (In) situé à la position  $(0; 0; 0) a_0$  et le deuxième atome est celui de l'azote (N), qui est situé à la position de  $(1/4; 1/4; 1/4) a_0$  dans la phase zinc blende ( $a_0$  étant le paramètre de maille des deux binaires).

Les études réalisées dans ce travail ont été basées sur la méthode *FP-LMTO* (*Full Potential Linear Muffin Tin Orbitals*) inclus dans le programme *LMTART* [1]. Les calculs ont été effectués dans le cadre de l'approximation du gradient généralisé de la densité *GGA96* (*Perdew et al*) [2] associée à la théorie de la fonctionnelle de la densité *DFT*, cette dernière utilise une cellule unitaire qui est divisée en deux régions :

- i. Des sphères, appelées sphères *Muffin-Tin* (*MTS*) centrée sur chaque atome où le potentiel est supposé à symétrie sphérique.
- ii. Des zones interstitielles où le potentiel est supposé plat ou bien variant très lentement.

Le rayon de *MTS* utilisé pour l'ensemble des structures étudiées est donné dans le tableau qui suit :

	$R_{MTS} (Ga)$	$R_{MTS} (In)$	$R_{MTS} (N)$
GaN	1.979	--	1.686
InN	--	2.264	1.778
$In_{0.25}Ga_{0.75}N$	2.145	2.145	1.723
$In_{0.125}Ga_{0.87}N$	2.064	2.093	1.737
$In_{0.083}Ga_{0.916}N$	2.051	2.083	1.733
$In_{0.0625}Ga_{0.9375}N$	2.045	2.077	1.731

**Tableau IV-1** : Le rayon de la sphère muffin tin  $R_{MTS}$  (unités atomiques)



On notera que le potentiel effectif est élever par les harmoniques à l'intérieur des sphères *MTS* jusqu'à  $l_{maximum}= 6$ . L'effet d'échange et de corrélation est décrit par l'approximation du gradient généralisé *GGA96 [perdew]*.

#### IV-1-2 Etude structurale

Il a été nécessaire de bien appréhender l'étude des propriétés structurales et électroniques afin de déterminer les différents paramètres de structure des matériaux tels que les paramètres de maille  $a_0$ , le module de compression  $B$  et sa dérivée  $B'$ . Ultérieurement l'ajustement de l'énergie totale du système en fonction du volume  $V_0$  de l'équation d'état de *Murnaghan [3]*, conduit à la détermination des propriétés structurales. Ainsi, le cycle auto cohérent est accompli une fois que la convergence de l'énergie totale calculée atteint  $10^{-4}$  Ryd.

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left[ v \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (IV-1)$$

Où  $E_0$  et  $V_0$  désignent respectivement, l'énergie totale et le volume à l'équilibre avec  $B$  et  $B'$  qui représentent respectivement le module de compressibilité et la dérivée de pression.

Le module de compressibilité est donné par la relation IV-2 :

$$B = V_0 \frac{\partial^2 E}{\partial V_0^2} \quad (IV-2)$$

Par ailleurs, la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour chacun des composés binaires ainsi que pour les ternaires *InGaN* est représentée par les figures IV-1 et IV-2. On marquera que pour les ternaires étudiés, une cellule tétraogonale de 8,16, 24 et 32 atomes a été considérée respectivement à  $x=0.25$ ,  $x=0.125$ ,  $x=0.083$  et  $x=0.0625$ .

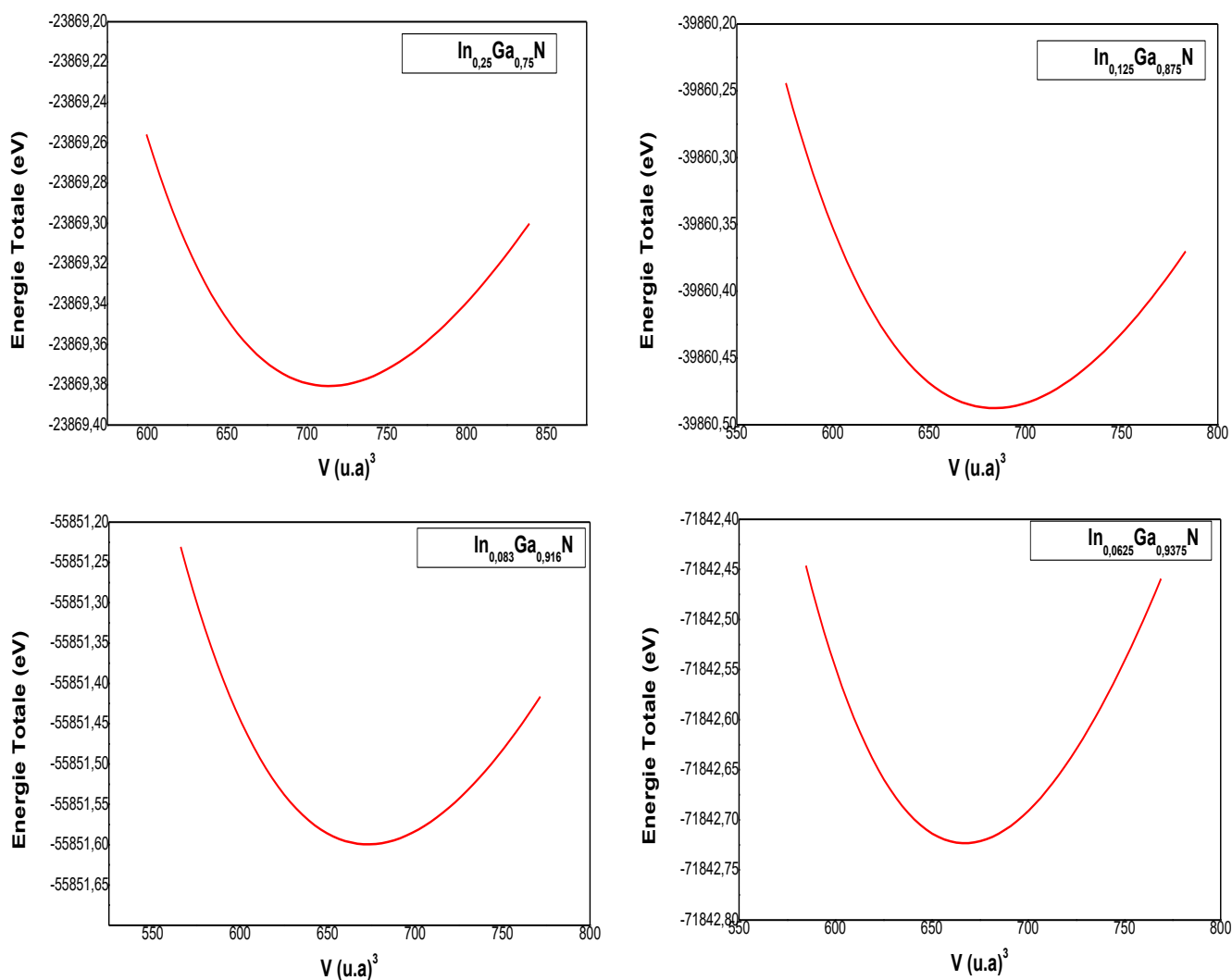


Figure IV-1 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour ( $x=0.25$ ,  $0.125$ ,  $0.083$  et  $0.0625$ ).

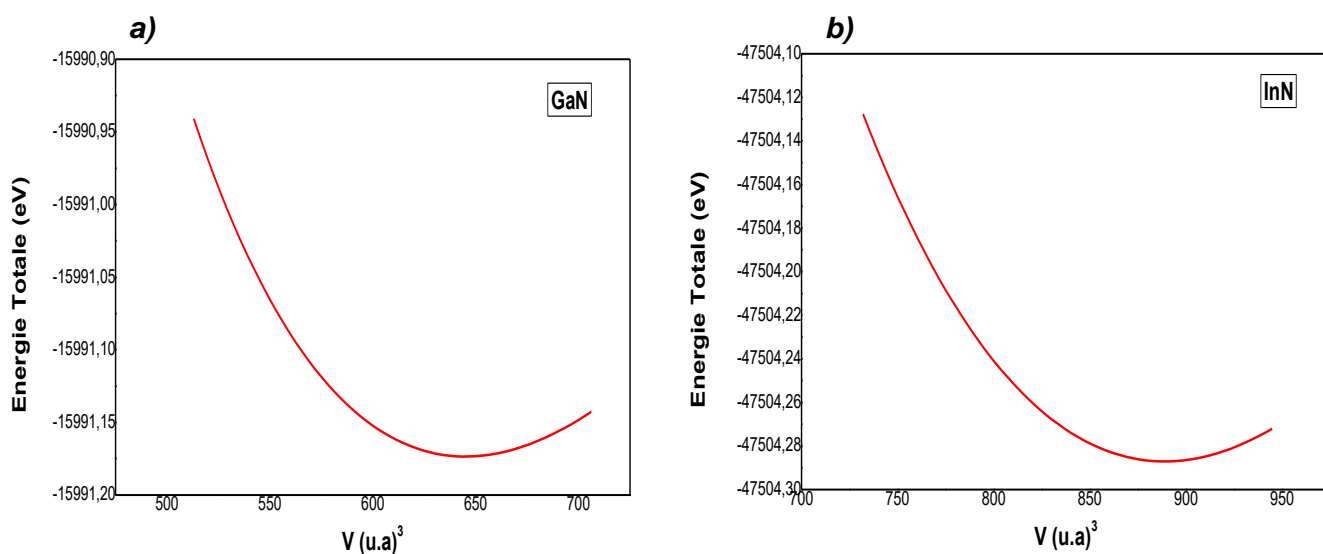


Figure IV-2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume (a) GaN (b) InN

Les résultats des calculs représentés dans le *tableau IV-2* sont en accord avec d'autres travaux expérimentaux et théoriques antérieurs pour les deux composés binaires InN et GaN. En outre, les paramètres de réseau d'équilibre calculés de nos binaires InN et GaN dans la structure *ZB* sont de 4,940Å et 4,480Å, avec des différences infimes de 0,80% et 0,69% par rapport aux résultats expérimentaux respectivement avec 4,98Å pour l'InN [4] et 4,50Å pour le GaN [5]. La constatation faite est que la *GGA* surestime la constante de maille et sous-estime le module de compressibilité [6,7]. En ce qui concerne les calculs du module de compressibilité pour nos composés binaires, ces derniers sont assez proches des résultats expérimentaux et les études théoriques étudiées de même il s'avère que le GaN est moins compressible que l'InN car le Gallium est plus étroitement lié à l'azote dans le binaire Ga – N que dans In – N, de ce fait il entraîne une covalence plus élevée pour Ga – N que pour In – N [8].

	$V_0$ (Å <sup>3</sup> )	$a_0$ (Å)	$c_0/a_0$	B (GPa)	$B'$
InN	30.138	4.940	1	141.23	4.750
Exp		4.98[4]		137[4]	
Autres calculs		4.947 [9], 4.995 [10]		140.76 [9], 146[10]	
GaN	22.476	4.480	1	192.564	4.963
Exp		4.50 [11]		190[11]	
Autres calculs		4.556 [12], 4.46 [13]		190.932[12], 172.2[13]	
In <sub>0.25</sub> Ga <sub>0.75</sub> N	26.422	4.728	1	143.724	4.579
In <sub>0.125</sub> Ga <sub>0.875</sub> N	25.298	4.66	2	302.747	4.377
In <sub>0.083</sub> Ga <sub>0.916</sub> N	24,909	4,636	3	469,273	4,141
In <sub>0.0625</sub> Ga <sub>0.9375</sub> N	24,7	4,623	4	633,445	4.152

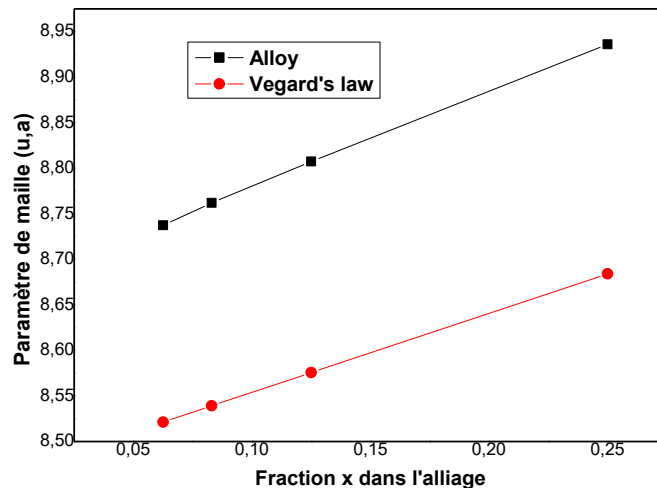
**Tableau IV-2 :** Les paramètres structuraux pour tous les composés binaires GaN, InN et les ternaires In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N.  $V_0$  est le volume d'équilibre.  $a_0$  le paramètre de maille à l'équilibre pour les binaires.  $B_0$  est le module de rigidité et  $B_0'$  est sa dérivée.

On peut calculer le paramètre du réseau en fonction de la concentration  $x$  de l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$  qui peut être estimé par la loi de Vegard [14] à partir de la relation linéaire :

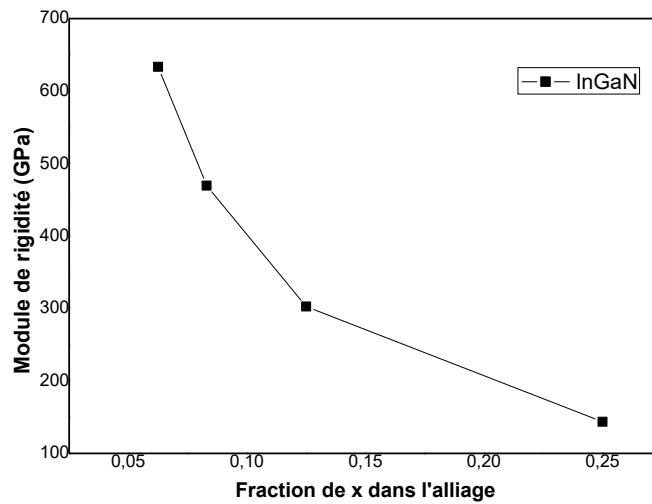
$$a_0 = x \cdot a_{0,InN} + (1 - x) \cdot a_{0,GaN} \quad (IV-3)$$

Avec  $a_{0,InN}$  et  $a_{0,GaN}$  représentent respectivement les paramètres du réseau cubique InN, GaN.

Grâce au procédé de minimisation de l'énergie on a pu calculer le paramètre de maille d'équilibre de tous nos alliages ternaires, la *figure IV-3* montre une variation linéaire du paramètre de maille en fonction de la fraction " $x$ " de l'In, il est clair que pour nos valeurs calculées il y a un écart positif par rapport à la loi de Vegard. Cet écart est dû à la relaxation de la liaison In – N et Ga – N dans l'alliage [15]. Un autre point est que la variation relative de la concentration d'indium dans l' $In_xGa_{1-x}N$  conduit à une augmentation de paramètre de maille et une diminution de module de compressibilité. Ce qui indique que le paramètre de réseau est inversement proportionnel au module de compressibilité. Par conséquent, l'augmentation du paramètre de réseau est justifiée par le fait que la taille atomique de l'indium est plus grande que celle de l'atome Galium.



**Figure IV-3 :** Variation du paramètre de maille par rapport aux fractions de  $x$  dans les alliages



**Figure IV-4 :** Variation de module de rigidité en fonction de x dans les alliages

### IV-1-3 Propriétés électroniques

#### IV-1-3-1 Structures de bandes

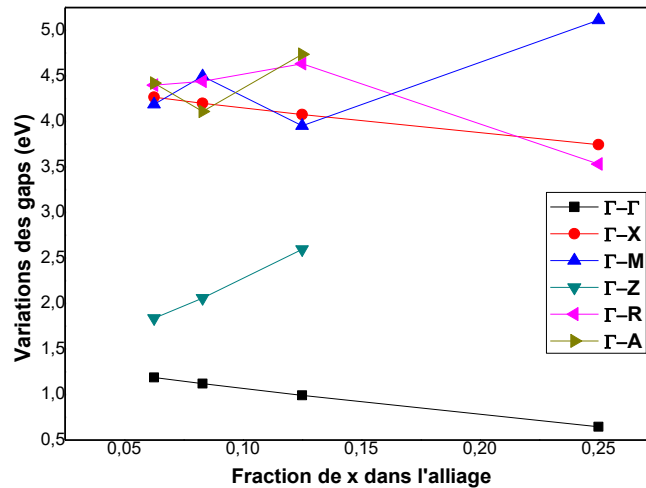
Le calcul des propriétés électroniques, comprenant les structures de bandes et la variation des gaps des composés binaires GaN, InN et du ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  est effectué le long de principales lignes de haute symétrie de la zone de *Brillouin* avec l'utilisation de l'approximation GGA96.

Comme il a été mentionné précédemment une maille primitive a été considérée pour les ternaires aussi bien que pour les binaires afin de nous permettre de faire une comparaison.

Par ailleurs, le maximum de la bande de valence ( $VB_{max}$ ) et le minimum de la bande de conduction ( $CB_{min}$ ) se situent au point de symétrie  $\Gamma$  pour les deux binaire GaN et InN ce qui nous permet d'affirmer qu'ils appartiennent aux semi-conducteurs à gap direct.

Les résultats montrent clairement que les valeurs des bandes interdites calculées sont de  $\sim 0$  eV pour InN et 1,916 eV pour GaN, dans l'ensemble elles sont sous-estimées par rapport aux valeurs expérimentales de 0,7 eV pour InN [16] et 3,20 eV pour GaN [17], cependant elles sont en accord avec d'autres résultats

théoriques. L'écart établi entre les valeurs calculées des bandes interdites par rapport aux valeurs expérimentales peut être expliquée par le fait que la GGA sous-estime les écarts d'énergie pour les calculs de structure de bande électronique dans les semi-conducteurs, mais cela ne modifiera pas les conclusions du présent travail puisqu'elles ne sont pas liées à l'estimation quantitative des écarts.



**Figure IV-5 :** Variation des gaps en fonction de l'In dans les alliages massifs.

La figure IV-5 représente la variation des gaps de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en fonction de la concentration  $x$ . Pour cette variation au point ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) nous constatons que, l'In incorporé conduit à une diminution du gap d'énergie de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Ceci peut être dû au faible gap d'énergie de l'InN [18].

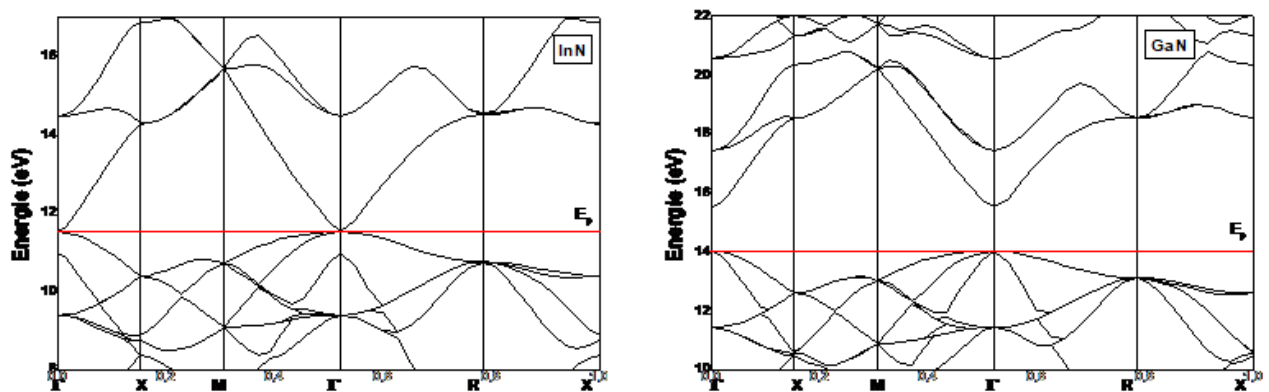
De même, nous avons calculé les structures de bande (Figures : IV-6, IV-7, IV-8, IV-9 et IV-10) pour tous nos systèmes ternaires  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , dans lequel  $E_F$  désigne le niveau de Fermi. On constate que le gap d'énergie situé au point  $\Gamma$  est direct sur tout l'intervalle de la composition  $x$  ( $x=0.0625, 0.083, 0.125$  et  $0.25$ ). Donc, l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  a conservé la nature du gap direct de leurs constituant binaires GaN et InN. Il est noté que le gap  $\Gamma$ -X montre une variation semblable à celle de  $\Gamma$ - $\Gamma$ , de plus, il est intéressant de noter que l'écart  $\Gamma$ - $\Gamma$  du ternaire varie linéairement mais il est significativement inférieur à l'écart  $\Gamma$ - $\Gamma$  du GaN. De même pour les gaps  $\Gamma$ -R et  $\Gamma$ -Z qui présentent la même allure avec la différence au point  $x=0.25$

( $E_{\Gamma-\Gamma}=3.531$  eV). Pour les deux gaps  $\Gamma$ -M et  $\Gamma$ -A varie de manière non linéaire,  $\Gamma$ -M ( $\Gamma$ -A) augmente (diminue) puis diminue (augmente).

Le tableau IV-3 regroupe les résultats de calcul des énergies de bande dans la phase zinc blende des composés binaires InN et GaN et les ternaires le long des principaux lignes de haute symétrie.

Gap	$\Gamma-\Gamma$	$\Gamma-X$	$\Gamma-M$	$\Gamma-Z$	$\Gamma-R$	$\Gamma-A$
InN	0.015	2.769	4.168	-----	2.986	-----
GaN	1.916	4.526	6.214	-----	4.578	-----
In <sub>0.25</sub> Ga <sub>0.75</sub> N	0.645	3.745	5.113	-----	3.531	-----
In <sub>0.125</sub> Ga <sub>0.875</sub> N	0.991	4.076	3.953	2.594	4.633	4.737
In <sub>0.083</sub> Ga <sub>0.916</sub> N	1.118	4.197	4.495	2.058	4.438	4.108
In <sub>0.0625</sub> Ga <sub>0.9375</sub> N	1.187	4.265	4.188	1.837	4.397	4.421

**Tableau IV-3 :** Energies des gaps dans la phase zinc blende des deux binaires GaN et InN et leurs composés ternaires.



**Figure IV- 6 :** Structures de bandes du GaN et InN à l'équilibre

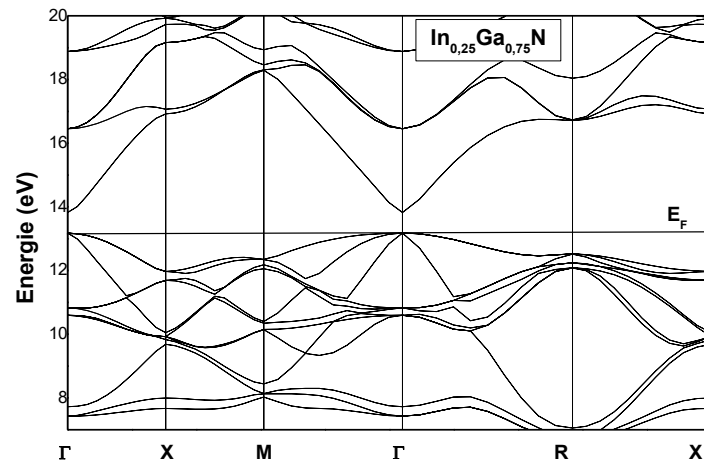


Figure IV-7 : Structures de bandes de  $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$

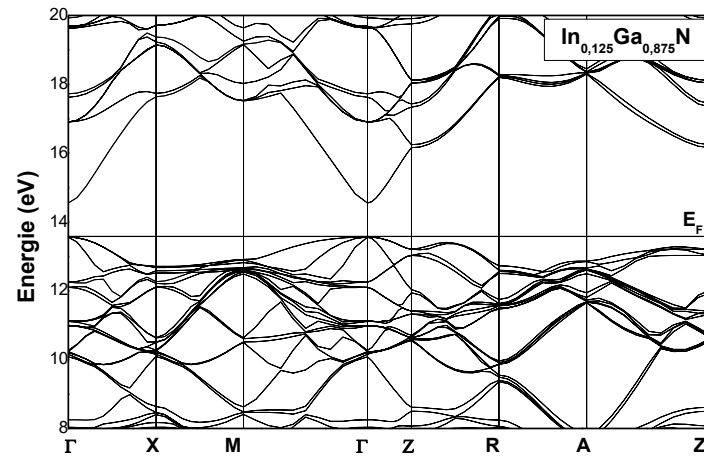


Figure IV-8 : Structures de bandes de  $\text{In}_{0.125}\text{Ga}_{0.875}\text{N}$



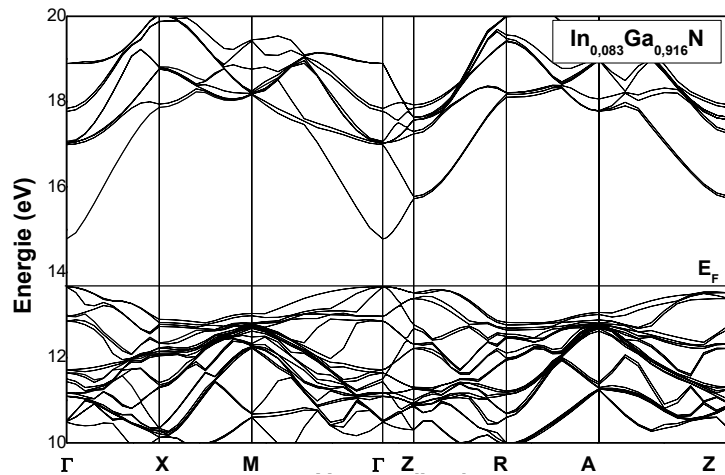


Figure IV-9 : Structures de bandes de  $In_{0,083}Ga_{0,916}N$

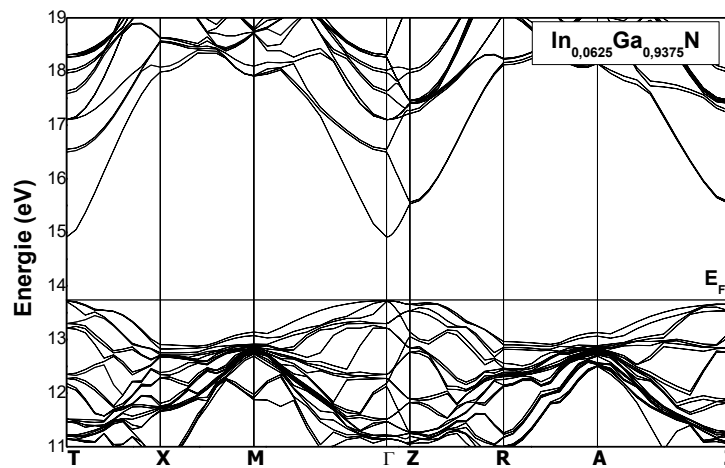


Figure IV-10 : Structures de bandes de  $In_{0,0625}Ga_{0,9375}N$

#### IV-1-3-2 Paramètre de courbure

Afin de déterminer l'origine du paramètre de désordre optique « *bowing* » de l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$ , nous avons calculé les écarts énergétiques ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) des structures de bande pour l' $InN$ ,  $GaN$  et  $In_xGa_{1-x}N$  pour les différentes concentrations ( $x=0.25, 0.125, 0.083, 0.0625$ ), à l'équilibre et à un pas de réseau moyen  $a(x)$ . Cependant pour les méthodes traditionnelles telle que l'approximation du cristal virtuel (VCA) [19] l'écart à la dépendance linéaire résultant de cette dernière devrait être corrigé

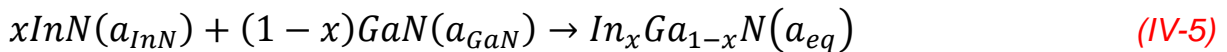
par un terme quadratique ayant pour coefficient le paramètre de désordre  $b$  (voir la relation IV-9) [20]. La variation de la bande interdite  $E_g$  en fonction de la concentration  $x$  à été mise sous la forme générale :

$$E_g(x) = x \cdot E_{InN}(a_{InN}) + (1 - x) \cdot E_{GaN}(a_{GaN}) - bx(1 - x) \quad (IV-4)$$

Afin de déterminer l'origine du phénomène de désordre, *Bernard et Zunger* [21] ont décomposé ce paramètre en trois termes :

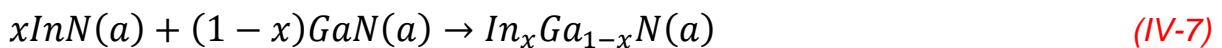
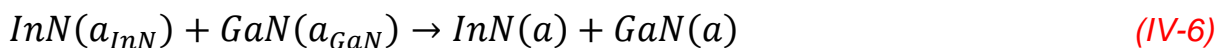
- La contribution de la déformation volumique ( $VD$ ) de chaque composé (effet équivalent à une pression hydrostatique),
- Transfert de charge ( $CE$ ),
- Et la relaxation structurale à une concentration fixée ( $SR$ ).

A une fraction moyenne donnée de  $x$  l'alliage ternaire obéit à la réaction suivante :



Où  $a_{InN}$  et  $a_{GaN}$  sont les constantes de réseau d'équilibre des composés binaires InN et GaN, respectivement.  $a_{eq}$  est le pas de réseau d'équilibre de l'alliage ternaire  $In_xGa_{1-x}N$  en fonction  $x$ .

On peut décomposer la relation (IV-5) en trois étapes :



La première étape consiste à mesurer l'effet de déformation du volume ( $b_{VD}$ ) sur le *bowing*. Ce terme représente la réponse relative du GaN (InN) à la pression hydrostatique de leur constante de réseau à l'équilibre  $a_{InN}$  ( $a_{GaN}$ ) et à la valeur  $a=a(x)$  de l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$ .

En ce qui concerne la deuxième contribution, l'échange de charge ( $CE$ ) qui est lié à un transfert de charge apportant de GaN et InN pour  $a = a(x)$ .

La troisième étape, la relaxation de la liaison structurale ( $SR$ ) de l'alliage, décrit le changement du gap lors du dépassement de la non relaxation à la relaxation  $a(x) \rightarrow a_{eq}$ .

L'addition de ces trois contributions ( $b_{VD}$ ,  $b_{CE}$  et  $b_{SR}$ ) correspond à la valeur totale du paramètre de désordre optique (*bowing*  $b$ ).

$$b = b_{VD} + b_{CE} + b_{SR} \quad (IV-9)$$

Les trois contributions au paramètre de courbure en fonction de la concentration  $x$  de l'alliage ternaire  $In_xGa_{1-x}N$  sont données par les relations suivantes [22] :

$$b_{VD} = \frac{E_{GaN}(a_{GaN}) - E_{GaN}(a)}{x} + \frac{E_{InN}(a_{InN}) - E_{InN}(a)}{1-x} \quad (IV-10)$$

$$b_{CE} = \frac{E_{GaN}(a)}{x} + \frac{E_{InN}(a)}{1-x} - \frac{E_{InGaN}(a)}{x(1-x)} \quad (IV-11)$$

$$b_{SR} = \frac{E_{InGaN}(a) - E_{InGaN}(a_{eq})}{x(1-x)} \quad (IV-12)$$

Tous les termes des équations (IV-10), (IV-11) et (IV-12) sont déterminés séparément à partir d'un calcul auto-cohérent de la structure de bande. La résolution de ces équations exige la connaissance du paramètre de réseau des composés InN et GaN, ainsi que la valeur  $a(x)$ , ce qui est équivalent à l'application de loi de *Végard* pour ( $x= 0.25, 0.125, 0.083$  et  $0.0625$ ).

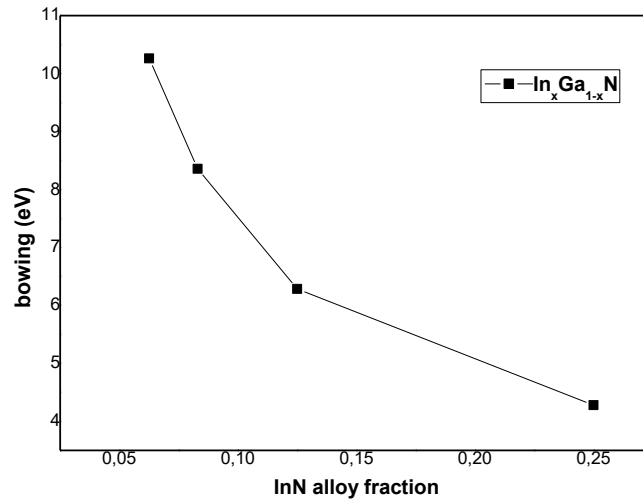
Le calcul des écarts énergétiques ( $\Gamma-\Gamma$ ) des structures de bande pour l'InN, GaN et  $In_xGa_{1-x}N$ , pour les différentes concentrations, à l'équilibre et à un pas de réseau moyen  $a(x)$  nous a permis de calculer le *bowing* total qui est obtenu à partir de l'équation (IV-9), et cela dans le but de déterminer les origines physiques du grand paramètre de courbure optique (*bowing*) en fonction de la composition de l'In dans  $In_xGa_{1-x}N$ . Les résultats sont rassemblés dans le *tableau IV-4*.

	$b_{VD}$	$b_{CE}$	$b_{SR}$	$b$
$In_{0.25}Ga_{0.75}N$	4.282	-2.583	-2.581	4.28
$In_{0.125}Ga_{0.875}N$	6.285	-4.398	4.397	6.284
$In_{0.083}Ga_{0.916}N$	8.347	-6.687	6.695	8.355
$In_{0.0625}Ga_{0.9375}N$	10.25	-8.077	8.089	10.262

**Tableau IV-4** : Paramètre de courbure calculé  $b$  (bowing) des gaps directs d' $In_xGa_{1-x}N$ . Déformation de volume (VD), échange de charge (CE) et relaxation structurale (SR). Toutes les valeurs sont en eV.

Selon Van Vechten & Bergstresser [23], l'origine du désordre vient de la différence d'électronégativité entre les atomes qui jouent un rôle important dans la valeur du paramètre de désordre. Cette différence est variable pour les quatre alliages. Le paramètre de courbure totale ( $b$ ) entre les atomes In et Ga dans la transition  $\Gamma$ - $\Gamma$  est estimé à 4.28eV pour  $In_{0.25}Ga_{0.75}N$ , (avec  $b = 4.67$  [22]). En remarque que ce paramètre augmente en fonction de la diminution de l'incorporation de l'In dans les différents composés. Cette augmentation est dominée par la contribution du volume de déformation.

On remarque que, la contribution aux échanges de charges  $b_{CE}$  est due à la différence d'électronégativités des atomes In et Ga, en effet elle évolue avec l'inadéquation de cette électronégativité [22]. De même, la contribution  $b_{CE}$  est inférieure à celle de la déformation volumique  $b_{VD}$ . La relaxation structurale  $b_{SR}$  est proportionnelle à la différence de taille des atomes In-Ga. D'après le *tableau IV-4*, les valeurs du  $b_{SR}$  sont approximatives aux valeurs de la contribution du volume de déformation.

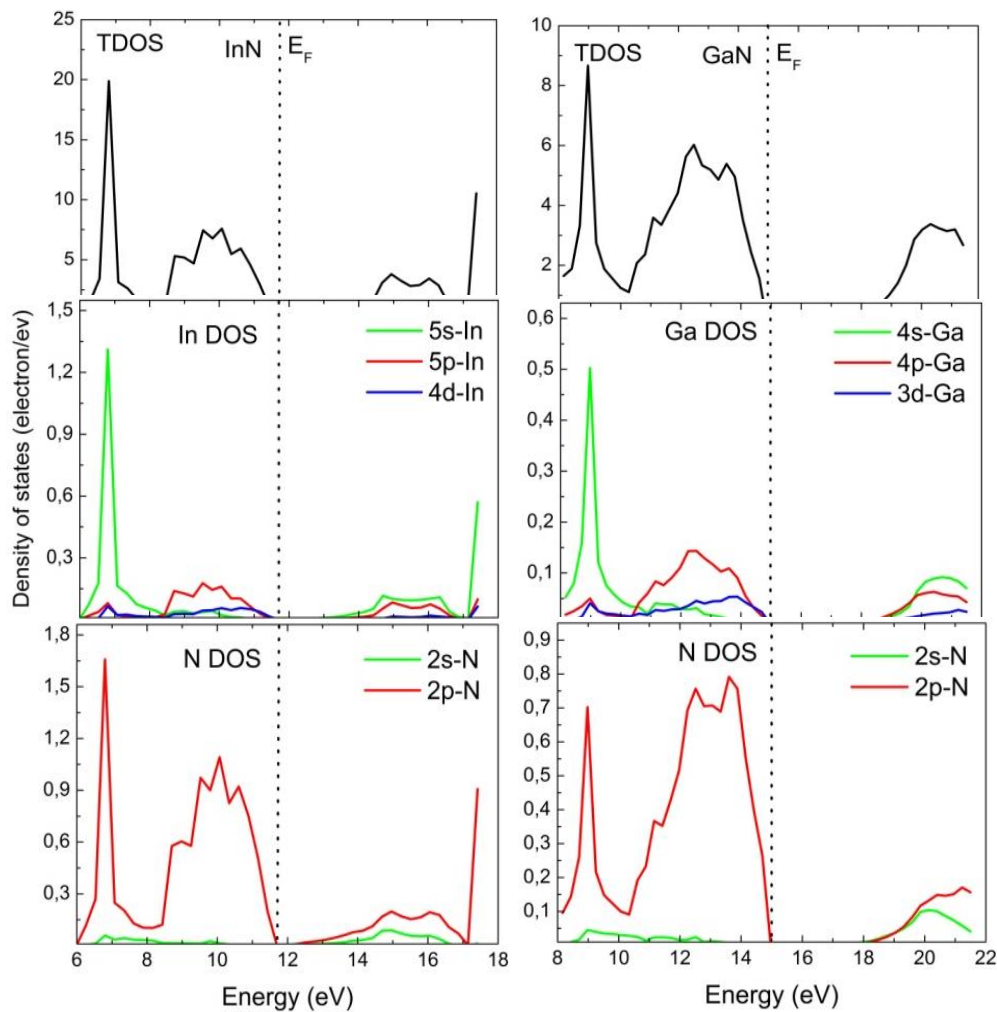


**Figure IV-11** : Variation du paramètre de bowing en fonction de la fraction de l'In dans les alliages.

### IV-1-3-3 Densités d'états électroniques

Le calcul de la densité d'état (*DOS*) est un facteur important dans l'étude des propriétés électroniques des matériaux. Elle permet aussi de connaître la nature des liaisons chimiques dans un matériau (en calculant le taux d'occupation de chaque état atomique). Les densités d'états totales et partielles à l'équilibre dans la phase zinc blende des composés binaires InN et GaN sont illustrées dans la *figure IV-12*. L'analyse de la contribution de chaque caractère atomique dans une série de bandes par la décomposition de la densité totale en contribution des orbitales *s*, *p* et *d* nous a permis d'avoir une compréhension profonde de la structure électronique de nos composés.

Avant d'interpréter la densité d'états des ternaires, il est très utile de voir d'abord ce qui se passe au niveau des binaires qui le constituent. Cela permet d'avoir une idée préliminaire sur comment les états du massifs influent sur ceux du SLs. Dans la *figures IV-12*, nous avons tracé les *DOS* totales et partielles de l'InN et GaN, en montrant les contributions des orbitales dans différentes régions. La *BV* des binaires a été divisé en sous-bandes basse, intermédiaire et haute énergie.



**Figure IV-12 :** La densité d'état (DOS) totale et partielle des composés InN et GaN

Nous avons constaté que pour les deux binaires InN et GaN, la bande de valence (BV) près du niveau de Fermi  $E_F$  est principalement formée par l'orbitale  $p$  de l'Indium et du Nitrure et de l'orbitale  $d$  des atomes de l'Indium et du Galium. En outre la plus grande contribution au minimum de la bande de conduction (MBC) elle est due à l'orbitale  $p$  du Nitrure et l'orbitale  $s$  de l'Indium pour le binaire InN tandis que pour le GaN elle est due à l'orbitale  $s$  du Nitrure et du Galium et l'orbitale  $p$  du Nitrure.

Afin de bien comprendre ce qui se produit dans le cas du ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , nous avons calculés la densité d'état totale et partielle représentée par les figures qui suit : IV-13, IV-14, IV-15 et IV-16.

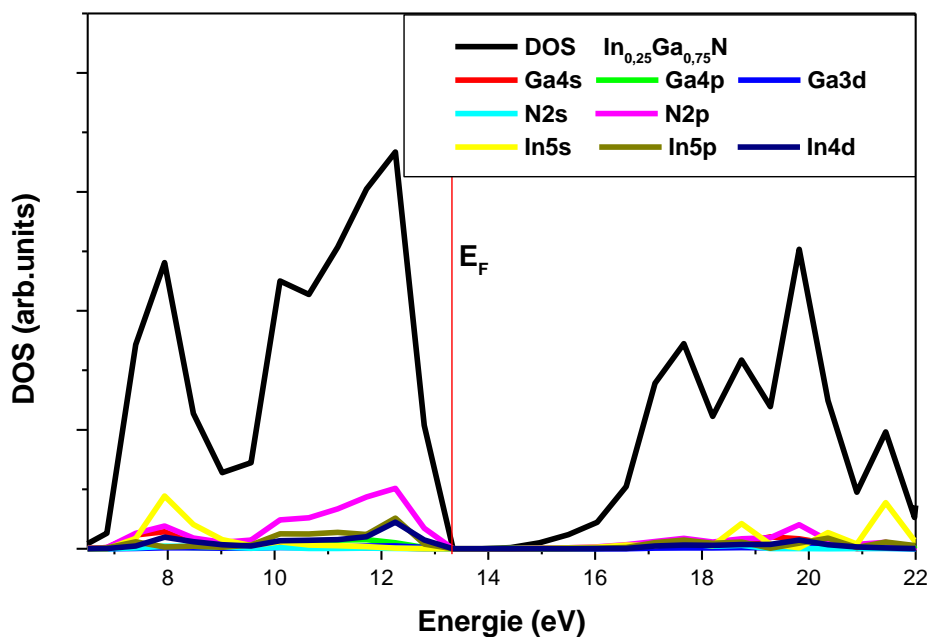


Figure IV-13 : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour  $In_{0.25}Ga_{0.75}N$

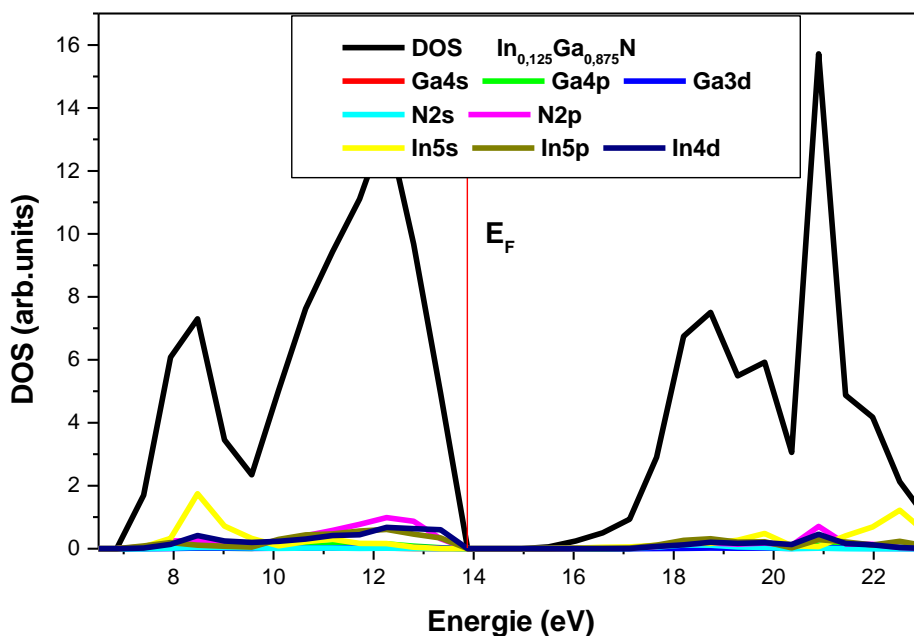


Figure IV-14 : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour  $In_{0.125}Ga_{0.875}N$

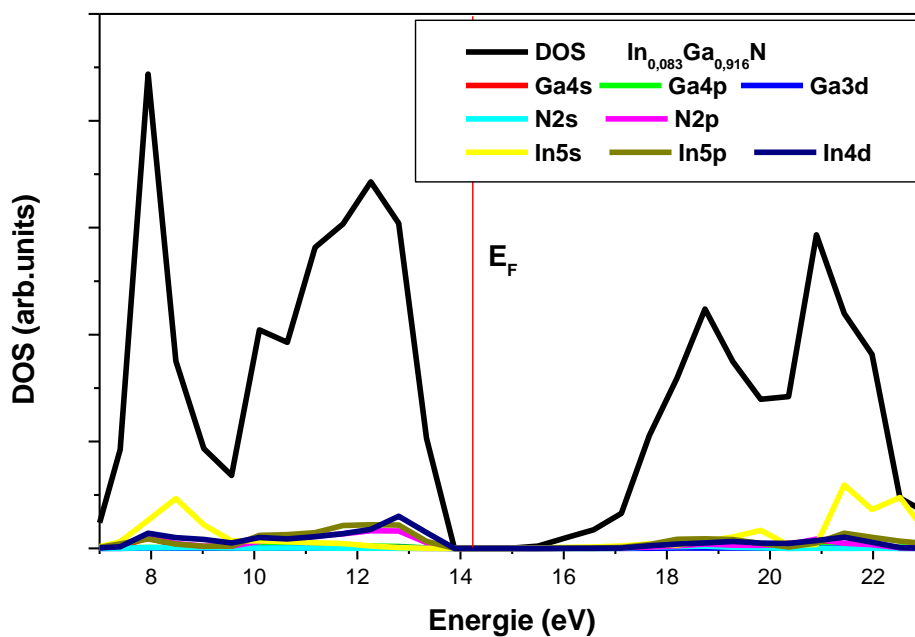


Figure IV-15 : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour  $\text{In}_{0.083}\text{Ga}_{0.916}\text{N}$

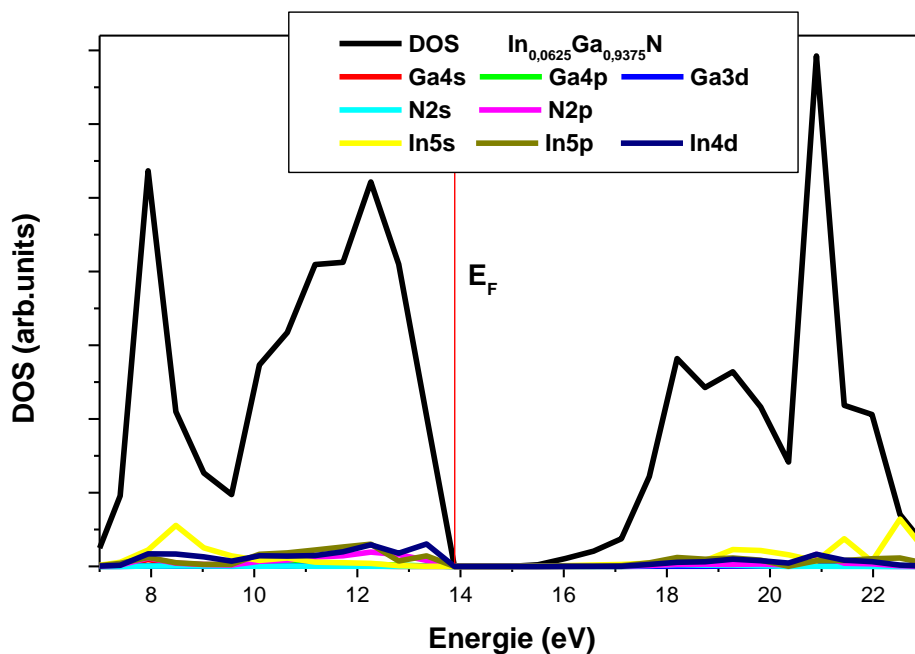


Figure IV-16 : La densité d'état (DOS) totale et partielle (unités arbitraire) pour  $\text{In}_{0.0625}\text{Ga}_{0.9375}\text{N}$



Par ailleurs, nous avons analysé la contribution de chaque atome en décomposant le *DOS* total en contributions partielles des orbitales *s*, *p* et *d*. La bande de valence pour les quatre concentrations est divisée en deux régions,  $BV_{min}$  et  $BV_{max}$ . La bande d'énergie se trouvant entre 7 et 10 eV montre une forte contribution de l'orbitale *s* de l'atome In pour les différentes concentrations avec une augmentation de cette contribution en fonction de la diminution de la concentration *x*.

Près du gap de la bande de valence ( $BV_{max}$ ) on remarque une forte contribution de l'orbitale *p* de l'atome N pour  $x = 0.25$  avec une contribution significative de l'orbitale *p* et *d* de l'atome de In pour tous les autres cas suivie d'une diminution de la contribution de l'orbitale *d* en fonction de *x*. Ceci prouve que le maximum de la bande de valence ( $BV_{max}$ ) est proportionnel à l'augmentation de l'indium dans l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$ .

Dans la bande de conduction et près du niveau de Fermi  $E_F$  ( $BC_{min}$ ) on distingue un mélange de contribution des orbitales *s*, *p* et *d* des atomes In, Ga et N. La bande de conduction dans la l'intervalle 21 à 23 eV est attribuée à l'orbitale *s* de l'atome In ainsi qu'une faible contribution de l'orbitale *p* et *d*.

## IV-2 Les superréseaux SL(m,n)

### IV-2-1 La structure cristalline des superréseaux InN/GaN (001) et (110)

Le présent travail s'intéresse au détail de la symétrie des superréseaux construits à partir des binaire InN et GaN. Cette symétrie des superréseaux  $(InN)_m/(GaN)_n$  orientées selon les directions (001) et (110) est tetragonale, où *m* et *n* étant le nombre de monocouches d'InN et de GaN, respectivement. Sur la *figure IV-17*, nous décrivons le réseau direct dans les axes de croissances (001) et (110) constitués d'une alternance d'une monocouche d'InN et de plusieurs couches de GaN. L'ensemble des vecteurs de translations primitives des SLs avec l'orientation (001) et (110) sont donné par :

$$a_{x(001)} = \frac{a_0}{2} [1,1,0]; \quad a_{y(001)} = \frac{a_0}{2} [-1,1,0]; \quad a_{z(001)} = a_0 [0,0,L] \quad (IV-13)$$

$$a_{x(110)} = \frac{a_0}{2} [1, -1,0]; \quad a_{y(110)} = \frac{a_0}{2} [L, L, 0]; \quad a_{z(110)} = a_0 [0,0,1] \quad (IV-14)$$

Où,  $a_0$  est une constante de réseau des matériaux massifs, avec  $L = (m + n) / 2$ .  
Le volume de la maille élémentaire primitive directe du SL orienté selon les deux axes (001) et (110) est :

$$V_{(001)} = V_{(110)} = L \cdot \frac{a_0^3}{2} = 2LV_{massif} \quad (VI-15)$$

Avec  $4L = 2(m + n)$  atomes par maille élémentaire :  $m$  atomes de l'In,  $n$  atomes de Ga et  $(m + n)$  atomes de N.

La symétrie des SLs InN/GaN développées le long de l'axe de croissance dépend du nombre de monocouches  $m$  et  $n$ . Nous nous sommes concentrés uniquement sur la symétrie tétragonale, cette procédure nous a fourni le groupe d'espaces souhaité de la structure SLs lorsque  $m + n$  est pair (c'est le seul cas pris en compte dans la suite de nos travaux).

Dans le cas des SLs développés suivant l'axe de croissance (001), les vecteurs de base du massif s'écrivent en fonction des vecteurs du superréseau comme suit *figure VI-17a* :

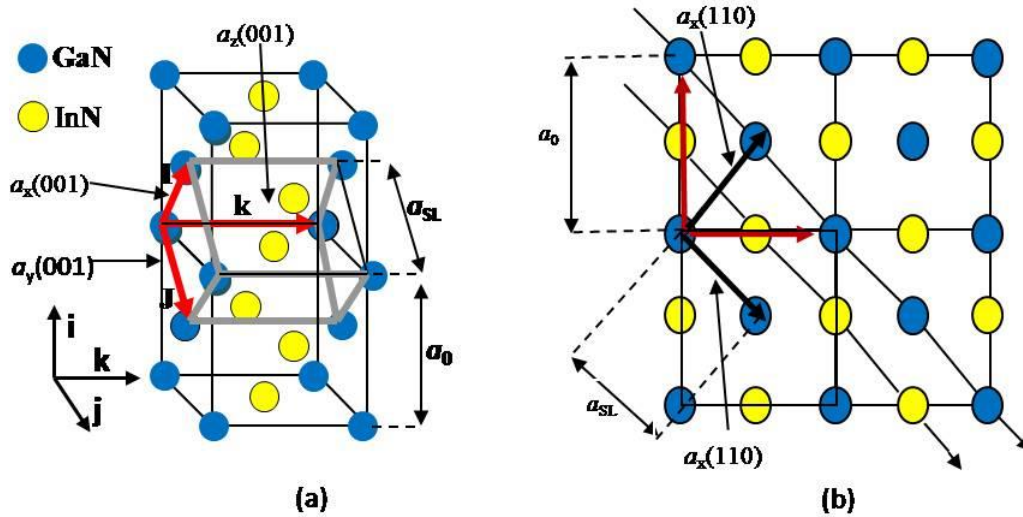
$$\begin{cases} \vec{I} = \vec{I}_{SL} - \vec{J}_{SL} \\ \vec{J} = \vec{I}_{SL} + \vec{J}_{SL} \\ \vec{K} = 1/L \vec{K}_{SL} \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} \vec{I} \\ \vec{J} \\ \vec{K} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{L} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{I}_{SL} \\ \vec{J}_{SL} \\ \vec{K}_{SL} \end{bmatrix}, \quad L = \frac{u+v}{2} \quad (VI-16)$$

$\vec{I}$ ,  $\vec{J}$ ,  $\vec{K}$  les vecteurs de translation

$$\frac{a_{SL}^2}{c_{SL}} = b_{SL}^2 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 \Rightarrow a_{SL} = \frac{a}{\sqrt{2}} \Rightarrow \frac{c_{SL}}{a_{SL}} = \sqrt{2} \quad (VI-17)$$

Avec  $a$  : le paramètre de maille du massif, et  $a_{SL}$ ,  $b_{SL}$  et  $c_{SL}$  sont les paramètres de maille du superréseau. Dans le cas où  $L \neq 1$  c'est le rapport  $c_{SL}/a_{SL}$  qui va changer :

$$\frac{c_{SL}}{a_{SL}} = L\sqrt{2} \quad (VI-18)$$



**Figure IV-17 :** Représentation du semi-conducteur massif et du superréseau SL avec une monocouche InN et différents nombres de monocouches de GaN. L'ensemble des vecteurs de translations primitives  $a_x$ ,  $a_y$  et  $a_z$  des SLs sont également représentés sur cette figure.

(a) SLs (001) et (b) SLs (110)

Les positions atomiques sont parmi les facteurs les plus importants pour les calculs des SLs. Les équations suivantes indiquent comment un vecteur de position quelconque s'écrit aussi bien dans la base du massif ainsi que celle du superréseau et montrent aussi la correspondance entre les deux bases.

- Pour le cas des SLs orientés (001) les positions atomiques sont données par les équations suivantes :

$$\vec{R} = X_{SL}\vec{I}_{SL} + Y_{SL}\vec{J}_{SL} + Z_{SL}\vec{K}_{SL} \quad \text{et} \quad \vec{R} = X\vec{I} + Y\vec{J} + Z\vec{K} \quad (\text{VI-19})$$

$$\begin{cases} X_{SL} = Y + X \\ Y_{SL} = X + Y \\ Z_{SL} = LZ \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} X = \frac{X_{SL} - Y_{SL}}{2} \\ Y = \frac{X_{SL} + Y_{SL}}{2} \\ Z = \frac{1}{L}\vec{K}_{SL} \end{cases} \quad (\text{VI-20})$$

- Pour le cas des SLs orientés (110) les positions atomiques sont données par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \vec{I}_{SL} = \frac{1}{2}\vec{I} - \frac{1}{2}\vec{J} \\ \vec{J}_{SL} = \frac{L}{2}\vec{I} + \frac{L}{2}\vec{J} \\ \vec{K}_{SL} = \vec{K} \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} \vec{I}_{SL} \\ \vec{J}_{SL} \\ \vec{K}_{SL} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{L}{2} & \frac{L}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{I} \\ \vec{J} \\ \vec{K} \end{bmatrix}, \quad L = \frac{u+v}{2} \quad (\text{VI-21})$$

Dans le SL(1,1), c'est-à-dire ( $L=1$ ), le réseau direct du superréseau SL(110) est identique à celui du SL (001) pour  $u+v=2$ .

$$\begin{cases} (2b_{SL})^2 = (La)^2 + (La)^2 \Rightarrow b_{SL} = \frac{La}{\sqrt{2}} \\ a_{SL}^2 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 \Rightarrow a_{SL} = \frac{a}{\sqrt{2}} \\ c_{SL} = a \end{cases} \quad (VI-22)$$

Ou  $X_{SL}$ ,  $Y_{SL}$  et  $Z_{SL}$  sont les coordonnées exprimées dans la base du superréseau.

D'après la *figure IV-17b*, les vecteurs de base du superréseau suivant l'axe de croissance (110) s'écrivent en fonction des vecteurs du massif comme suit :

$$\begin{cases} \frac{b_{SL}}{a_{SL}} = L \\ \frac{c_{SL}}{a_{SL}} = \sqrt{2} \end{cases} \quad (VI-23)$$

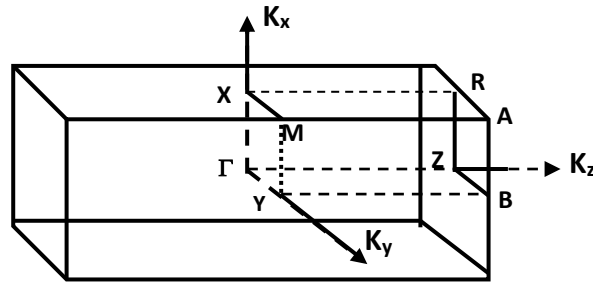
Dans le cas du SL(1,1), c'est-à-dire ( $L=1$ ), le réseau direct du SL suivant l'axe de croissance (001) est identique à celui de (110) pour  $m+n=2$ .

$$\vec{R} = X\vec{I} + Y\vec{J} + Z\vec{K} \quad \text{et} \quad \vec{R} = X_{SL}\vec{I}_{SL} + Y_{SL}\vec{J}_{SL} + Z_{SL}\vec{K}_{SL} \quad (VI-24)$$

Donc la maille primitive du SLs suivant l'axe de croissance (110) possède une symétrie tétragonale avec :

$$\begin{cases} X = \frac{X_{SL}}{2} + \frac{LY_{SL}}{2} \\ Y = \frac{X_{SL}}{2} + \frac{LY_{SL}}{2} \\ Z = Z_{SL} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} X_{SL} = X - Y \\ Y_{SL} = \frac{X}{L} + \frac{Y}{L} \\ Z_{SL} = Z \end{cases} \quad (VI-25)$$

La *figure IV-18* représente la zone de Brillouin du superréseau SL(1,1) dans les deux orientations (001) et (110) ou les points de hautes symétries  $B$  et  $Y$  diffèrent de  $R$  et  $X$  respectivement, sauf lorsque  $m=n=1$  le cas pour le quel ils deviennent identiques.



**Figure IV-18** : La zone de Brillouin et les points de haute symétrie de la cellule tétragonale dans l'axe de croissance (001) et (110) du SLs ( $m,n$ ).

### V-2-2 Propriétés structurales et électroniques des superréseaux InN/(GaN) $n$

L'étude des propriétés structurales et électroniques dans les SLs  $(\text{InN})_m/(\text{GaN})_n$  le long des axes de croissance (001) a été considérablement focalisée au cours de la dernière décennie, mais la caractéristique la plus intéressante est de connaître l'effet des orientations cristallines sur leurs propriétés et leurs applications potentielles [24]. Parmi les directions de croissances utilisées dans notre travail les directions (001) et (110). Il est rapporté que les SLs orientés (110) présentent des caractéristiques considérablement différentes de celles orientés le long de la direction (001). Les calculs de ce travail sont effectués sur des cas idéaux dans lesquels tous les atomes des massifs ou SLs sont situés dans des positions idéales. En choisissant les SLs qui ont une courte période, on peut supposer que le paramètre de réseau est constant dans tout le cristal car la distance entre les interfaces successives est très faible. Cette approximation nous libère de tout calcul de relaxation.

#### IV-2-2-1 Détails numériques

Pour les SLs orientés dans les deux directions (001) et (110), la plus petite structure ordonnée est une cellule tétragonale à quatre atomes, correspondant à SL (1,1) et la plus grande structure ordonnée est une cellule tétragonale à seize atomes, correspondant au SL (1,7). Les énergies totales calculées à de nombreux volumes différents autour de l'équilibre ont été ajustées par l'équation d'état de *Murnaghan* [3] afin d'obtenir la constante de réseau d'équilibre  $a_0$  et le module de compressibilité  $B$ .

Le procédé d'itération est identique à celui utilisé pour le calcul des systèmes massifs, c.-à-d., que toute l'énergie totale converge avec une exactitude minimale de  $10^{-4}$  Ryd. Il convient de noter que la période de nos SL est  $D = L \times a_{SL}$ ,  $a_{SL}$  étant la constante de réseau d'équilibre des SLs dans la direction x. Nous avons sélectionné une série de SLs  $(\text{InN})_m / (\text{GaN})_n$  où  $n = 1, 3, 5, 7$  et  $m = 1$  (c'est-à-dire que le nombre total de monocouches varie de 2 à 8). Nous nous limitons au cas pour lequel  $(m + n)$  est pair.

Pour les calculs de l'énergie d'échange et de corrélation des électrons décrite dans l'approximation du gradient généralisé GGA96 nous avons utilisé la paramétrisation de *Perdew et al* [2]. Le rayon de MTS utilisé pour les structures étudiées est donné dans le *tableau IV-5*.

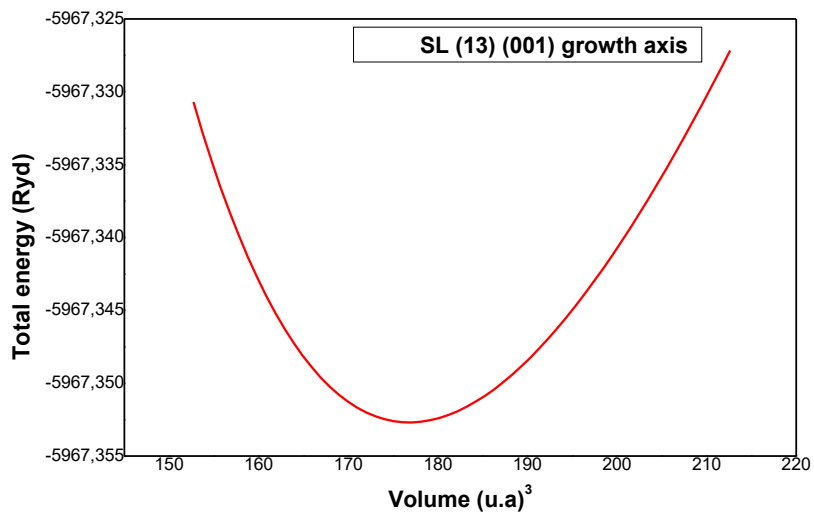
	<i>RMTS (Ga)</i>	<i>RMTS (In)</i>	<i>RMTS (N)</i>
(001) et (110) SL(1,1)	2,202	2,202	1,77
(001) SL(1,3)	2,12	2,12	1,715
(110) SL(1,3)	2,127	2,166	1,712
(001) SL(1,5)	2,07	2,105	1,752
(110) SL(1,5)	2,058	2,093	1,736
(001) SL(1,7)	2,05	2,126	1,727
(110) SL(1,7)	2,055	2,131	1,722

**Tableau IV-5** : Le rayon de la sphère muffin tin *RMTS* (unités atomiques) pour les SLs.

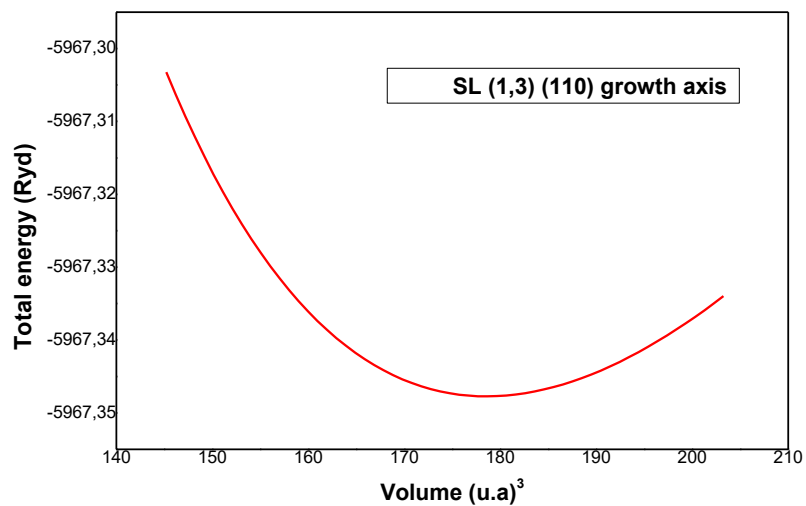
#### IV-2-2-2 Les propriétés structurales des superréseaux InN/GaN

L'ajustement de l'énergie totale du système en fonction du volume nous permet de déterminer les propriétés structurales des structures étudiées. La variation de cette énergie en fonction du volume pour les SL (1,1), SL (1,3), SL (1,5), SL (1,7), pour les deux axes de croissances (001) et (110) est représentée par les *figures IV-19, IV-20, IV-21, IV-22, IV-23, IV-24*. Le *Tableau IV-6* représente les paramètres

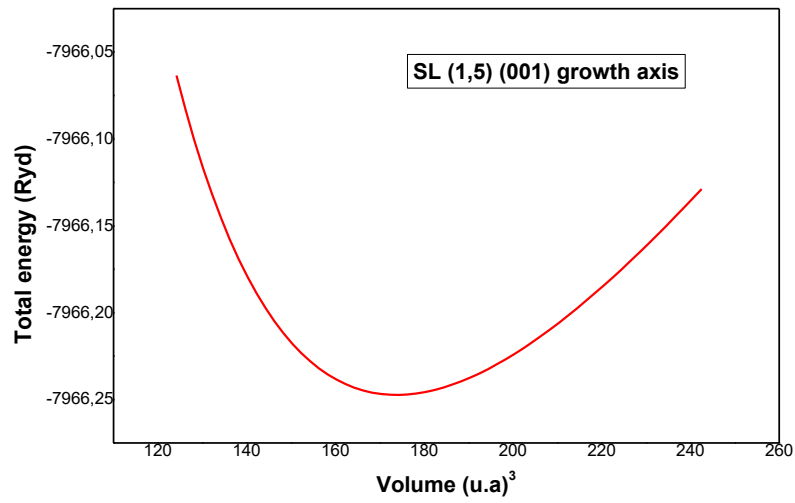
structuraux pour les SLs InN/GaN suivant les deux orientations en utilisant la méthode *FP-LMTO* avec l'approximation *GGA96*.



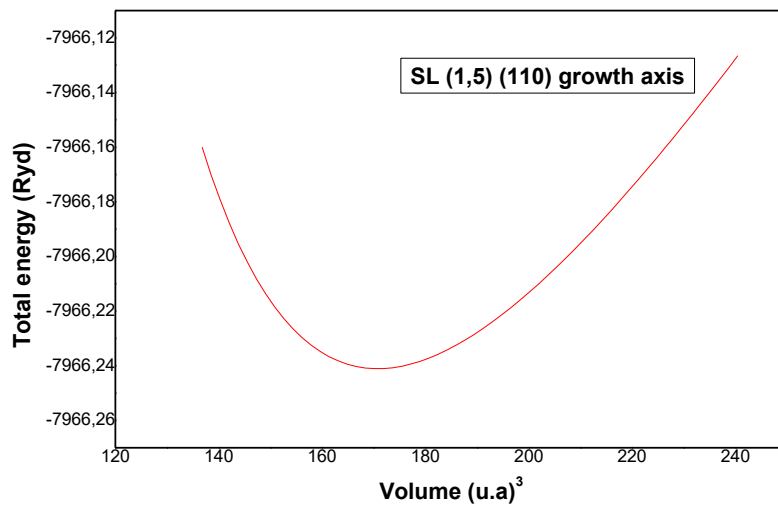
**Figure IV-19** : Variation de l'énergie totale du SL (1, 3) en fonction du volume suivant l'orientation (001).



**Figure IV-20** : Variation de l'énergie totale du SL (1, 3) en fonction du volume suivant l'orientation (110).

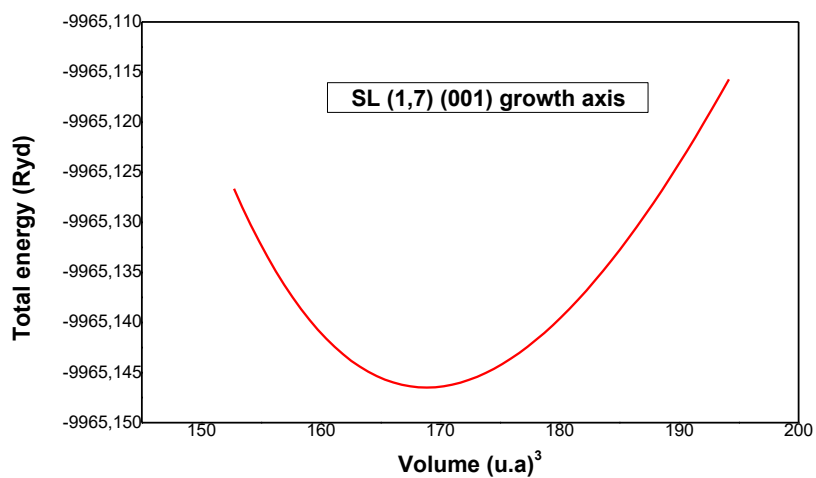


**Figure IV-21** : Variation de l'énergie totale du SL (1, 5) en fonction du volume suivant l'orientation (001).

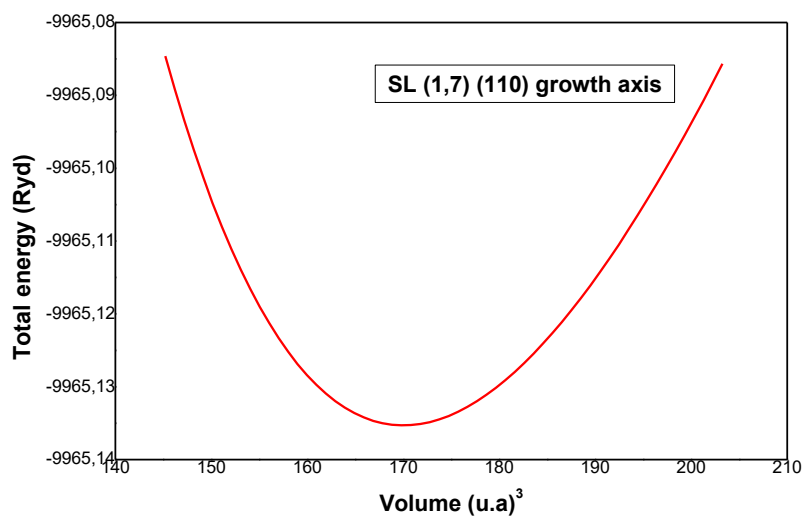


**Figure IV-22** : Variation de l'énergie totale du SL (1, 5) en fonction du volume suivant l'orientation (110).





**Figure IV-23** : Variation de l'énergie totale du SL (1, 7) en fonction du volume suivant l'orientation (001).



**Figure IV-24** : Variation de l'énergie totale du SL (1, 7) en fonction du volume suivant l'orientation (110).

	$V_0(\text{Å}^3)$	$a_0(\text{Å})$	$a_{SL}(\text{Å})$	$c_0/a_0$	B (GPa)	B'	$E_{form}$ (eV)
<b>SL (1,n) (001) avec n=1, 3, 5, 7 m =1</b>							
InN <sub>1</sub> /GaN <sub>1</sub>	28.609	4.854	3.433	1.414	127.836	4.516	-0.0074
InN <sub>1</sub> /GaN <sub>3</sub>	26.157	4.712	3.332	2.828	146.225	4.874	-0.0072
InN <sub>1</sub> /GaN <sub>5</sub>	25.712	4.685	3.313	4.243	214.630	3.872	-0.0057
InN <sub>1</sub> /GaN <sub>7</sub>	24.975	4.640	3.281	5.657	310.397	4.856	-0.0048
<b>SL (1,n) (110) avec n= 3, 5, 7 m =1(pour le cas : n = 1 est déjà représenté)</b>							
InN <sub>1</sub> /GaN <sub>3</sub>	26.417	4.728	3.343	1.414	146.666	4.006	- 0.0097
InN <sub>1</sub> /GaN <sub>5</sub>	25.273	4.658	3.294	1.414	210.661	4.931	- 0.0082
InN <sub>1</sub> /GaN <sub>7</sub>	25.158	4.651	3.289	1.414	306.866	4.438	-0.0075

**Tableau IV-6 :** Les paramètres structuraux pour superréseaux.  $V_0$  est le volume d'équilibre.  $a_0$  le paramètre de maille à l'équilibre pour les binaires.  $B_0$  est le module de rigidité.  $a_{SL}$  est la constante du réseau du SL.  $V_0 = (c_0/a_0)$ .  $a_0^3/4$  est le volume des superréseaux avec ( $a_0 = \sqrt{2} \cdot a_{0,SL}$ )

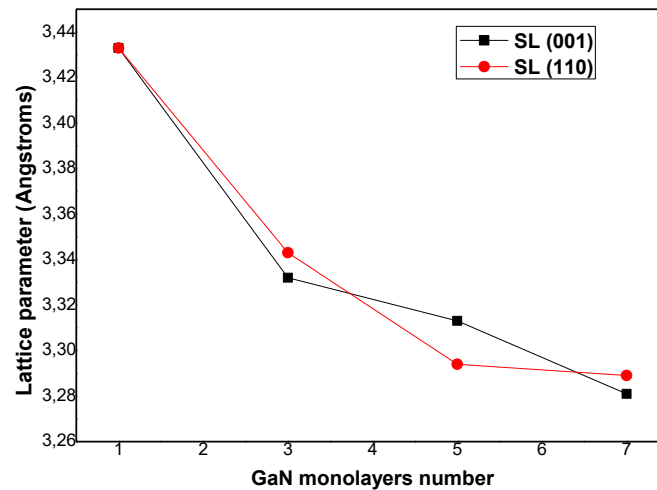
Comme prévu, les calculs de SL (1,1) pour les orientations (001) et (110) donnent les mêmes résultats puisque la symétrie est la même. Les figures VI-25 et VI-26 représentent les variations du paramètre de réseau et du coefficient de compressibilité respectivement en fonction de nombre de monocouches GaN dans les SLs. Il ressort que la constante de réseau dans tous les SLs diminue lorsque le nombre de monocouches du GaN augmente. Ainsi il est très clair d'après le tableau IV-6 que le module compressibilité pour le SL (InN)/(GaN)<sub>n</sub> dans les deux directions augmente avec l'augmentation du nombre de monocouche n, ce qui suggère la même augmentation pour la compressibilité de chaque composé. Ces composés sont devenus plus durs lorsque le nombre de monocouches n augmente. Il représente les effets de renforcement ou d'affaiblissement des liaisons induits par la modification de la composition.

La stabilité de SLs (InN) / (GaN)<sub>n</sub> est étudiée en calculant les énergies de formation. L'énergie de formation par atome  $E_{form}$  en fonction du nombre de monocouches  $n$  pour tous les SLs est calculée comme suit [25] :

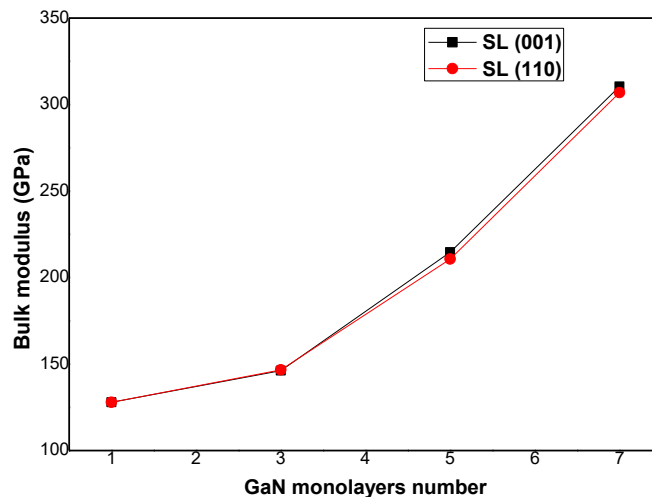
$$E_{Form} = E_{tot}^{InN/GaN} - (E_{tot}^{InN} + E_{tot}^{GaN})/2 \cdot (n + 1) \quad (IV-26)$$

Où  $E_{tot}$  est l'énergie totale du SLs (InN) / (GaN)<sub>n</sub> et de ses parties constitutives GaN et InN. A partir de l'analyse du tableau IV-6, on remarque que l'énergie de

formation pour ces SLs a des valeurs négatives et elle diminue d'une petite quantité en fonction des nombre de monocouches. Le signe de l'énergie de formation indique que ces systèmes sont énergétiquement plus stables avec l'augmentation de  $n$ , par suite on peut conclure que ces SLs sont exothermiques et peuvent également être synthétisés expérimentalement [25]. Les SLs orienté (001) ont une énergie de formation légèrement inférieure à l'énergie de formation des SLs orienté (110).



**Figure IV-25 :** Variation du paramètre de réseau en fonction de nombre de monocouches GaN dans les SLs



**Figure IV-26 :** Variation de module de rigidité en fonction de nombre de monocouches GaN dans les SLs

### IV-2-2-3 Les propriétés électroniques des superreseaux $(\text{InN})_n / (\text{GaN})_n$

#### IV-2-2-3-1 Structures de bandes électroniques

Les structures de bandes et la variation des gaps des SLs  $(\text{InN})_n / (\text{GaN})_n$  sont calculées le long des principales lignes de haute symétrie de la zone de Brillouin (ZB) avec l'utilisation de l'approximation GGA96. Le but de cette étude est de voir l'influence des paramètres de symétrie sur ces propriétés, et plus précisément les propriétés électroniques. Il est à noter que les points de haute symétrie dans les SLs n'ont pas la même signification que dans les binaires et les ternaires sauf pour le gap  $\Gamma$ - $\Gamma$ .

À partir des résultats des énergies de la bande interdite des SLs calculées dans les deux directions (001) et (110) en fonction de l'épaisseur des monocouches GaN, nous constatons que ces matériaux ont une bande interdite directe, le maximum de bande de valence et le minimum de bande de conduction se trouvant au point  $\Gamma$ , ce qui est intéressant pour les dispositifs optoélectroniques.

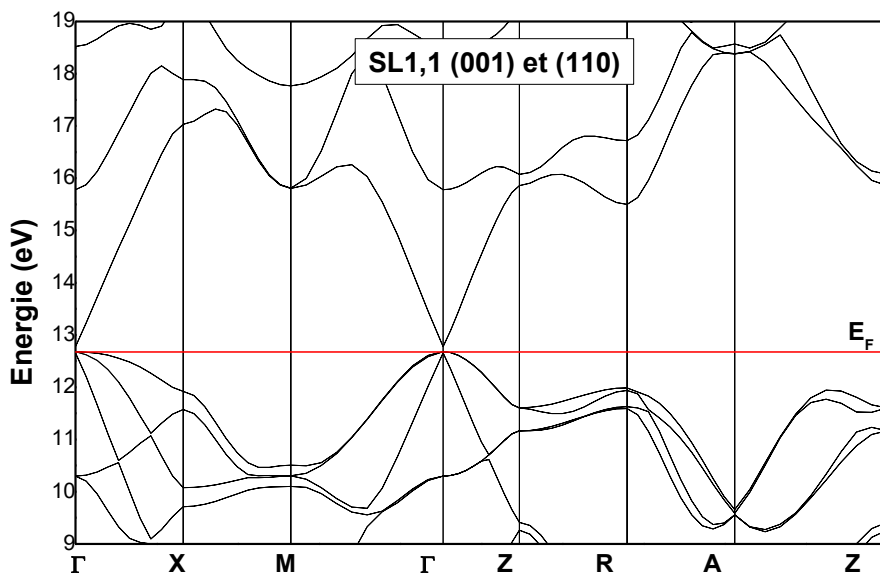


Figure IV-27 : Structure de bande du SLs  $\text{InN}_1/\text{GaN}_1$  suivant les deux orientations (001) et (110).

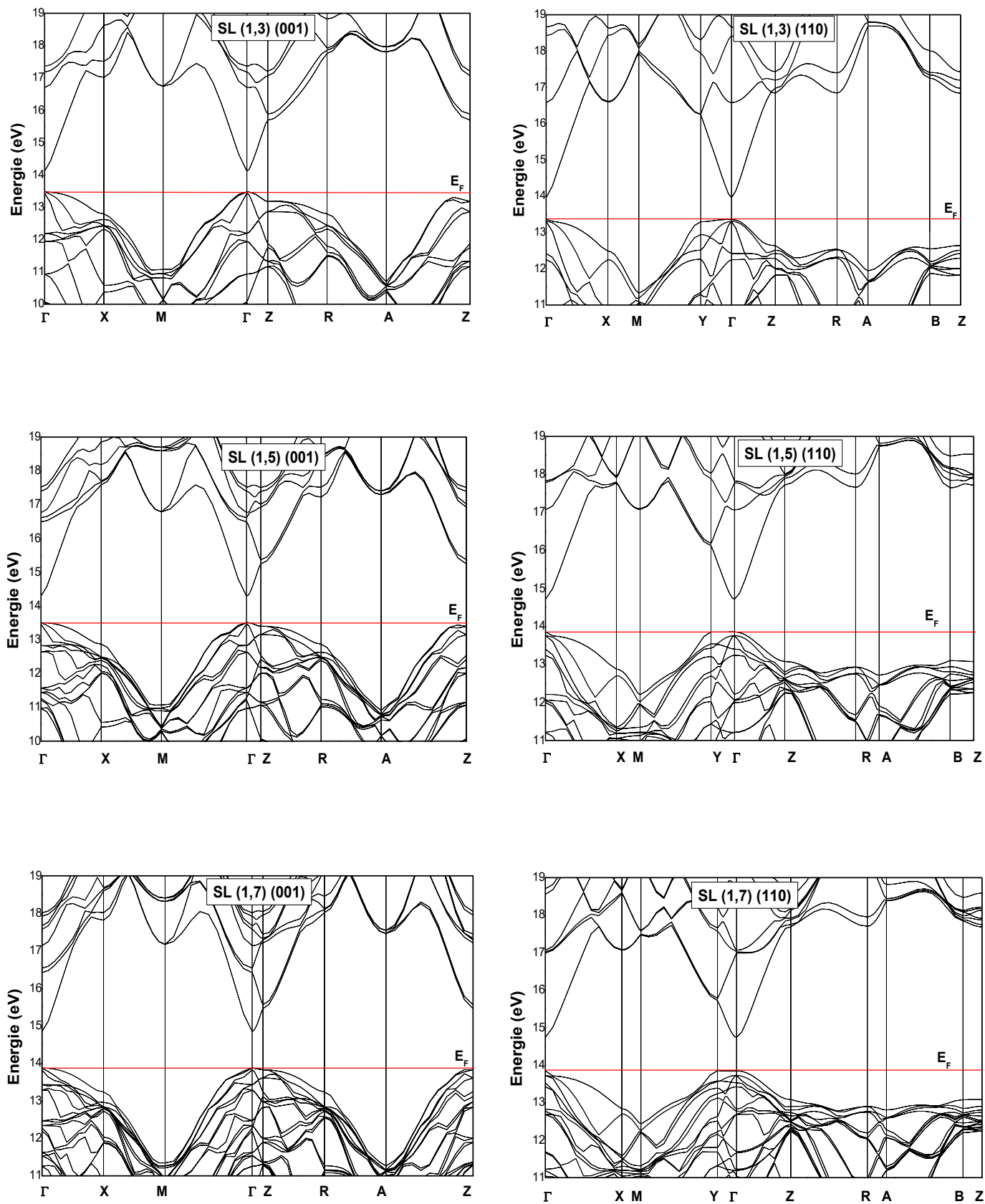


Figure IV-28 : Structure de bandes des SLs  $\text{InN}_1/\text{GaN}_n$  avec  $n=3,5$  et  $7$  suivant les deux orientations (001) et (110).

Les points de haute symétrie de la *figure IV-27* et la *figure IV-28* qui se réfèrent à la ZB sont  $(X, M, \Gamma, Z, A$  et  $R)$  dans le cas de la direction  $(001)$ , et  $(X, M, Y, \Gamma, Z, A, R$  et  $B)$  dans le cas de la direction  $(110)$ .

Pour le cas de SL  $(1,1)$  les points de haute symétrie  $B$  et  $Y$  sont identiques à  $R$  et  $X$  respectivement, mais  $B$  devient différent de  $R$  et  $Y$  différent de  $X$  lorsque le nombre  $n$  de monocouche augmente  $n+m>2$ .

Nous remarquons également des changements significatifs dans le comportement de la  $BC$  près de  $M, A, Y$  et  $Z$  pour l'orientation  $(110)$  par rapport à  $(001)$ . Lorsque  $n$  augmente, le bas de la  $BC$  en  $M$  et  $A$  devient plus haut et c'est en  $Z$  pour les SLs  $(001)$  et  $Y$  pour les SL  $(110)$  que le bas de la  $BC$  commence à s'abaisser rapidement. Cette concurrence entre les différents points de haute symétrie des SLs est principalement due à l'effet de la zone de *folded* qui est une caractéristique typique des SLs. En d'autres termes, les ZB des binaires sont pliés (*folded*) dans la plus petite zone dans un SL [26].

D'après la *figure IV-29* qui représente les variations de l'écart  $\Gamma-\Gamma$  en fonction de l'épaisseur  $n$  du SLs dans les deux orientations, on constate que le comportement du gap  $\Gamma-\Gamma$  du SLs  $(\text{InN})/(\text{GaN})_n$  augmente avec l'épaisseur de  $n = 1$  à  $n = 7$  de 0,0819 eV à 0,971 eV et 0,879 eV respectivement pour les deux directions  $(001)$  et  $(110)$ . Nous remarquons également que l'écart  $\Gamma-\Gamma$  pour  $n = 7$  dans la direction  $(001)$  diffère de plus de 92meV que celui dans la direction  $(110)$ , cela peut être compris en considérant la dépendance de l'orientation du potentiel de commande. Dans ce cas aussi si on assigne le potentiel constant  $V_{\text{InN}}$  aux couches InN et  $V_{\text{GaN}}$  aux couches GaN, nous pouvons approximer les potentiels de commande comme suit : Dans la direction  $(110)$ , le potentiel de commande est simplement la différence  $(V_{\text{GaN}} - V_{\text{InN}})$  indépendante de la période de répétition. Dans la direction  $(001)$ , le potentiel de commande est de  $2*(V_{\text{GaN}}-V_{\text{InN}})/n$  [27]. En augmentant le nombre de monocouches GaN, l'écart suivant la direction  $(001)$  devient légèrement élevé par rapport à celui de la direction  $(110)$ . il faut noter que le gap  $\Gamma-\Gamma$  suivant les deux orientations cristalline  $(001)$  et  $(110)$  est inférieur à la valeur moyenne du gap de ses parents massifs GaN et InN, sauf dans le cas  $n = 7$  pour la direction  $(001)$  où ils sont presque identiques. Le phénomène d'augmentation de l'écart  $\Gamma-\Gamma$  pour les SLs en fonction de  $n$  est l'inverse de ce qui est observé dans les systèmes massifs.

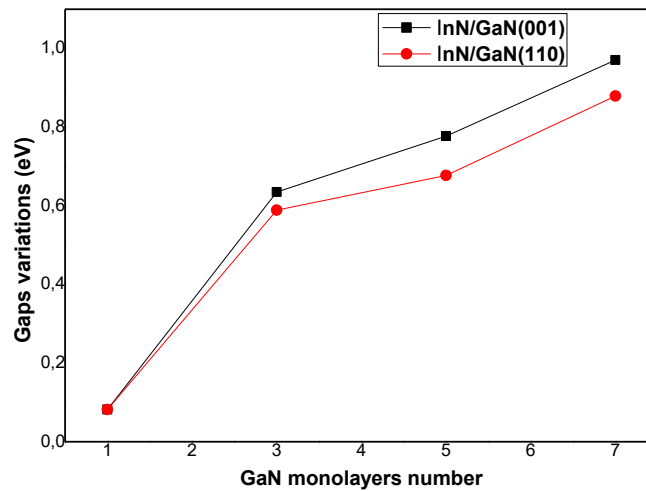


Figure IV-29 : Variation des gaps d'énergies ( $\Gamma-\Gamma$ ) en fonction du nombre de monocouches des SLs  $InN/GaN_n$ , pour les orientations (001) et (110)

D'après la figure ci-dessus (figure IV-30), on remarque qu'il existe des similarités électroniques entre les SLs suivant les deux orientations. La compétition entre les gaps possède quelques caractéristiques intéressantes, car les gaps concurrents de  $\Gamma-\Gamma$  varient selon les valeurs de  $n$ . En plus, on remarque que quand les valeurs  $n$  augmentent, les gaps  $\Gamma-A$  et  $\Gamma-Z$  sont en compétition avec le gap  $\Gamma-\Gamma$ . Cependant, Pour les autres gaps ils présentent des variations oscillantes. Le tableau IV-7 regroupe les résultats trouvés pour les deux axes de croissances pour les différents cas.

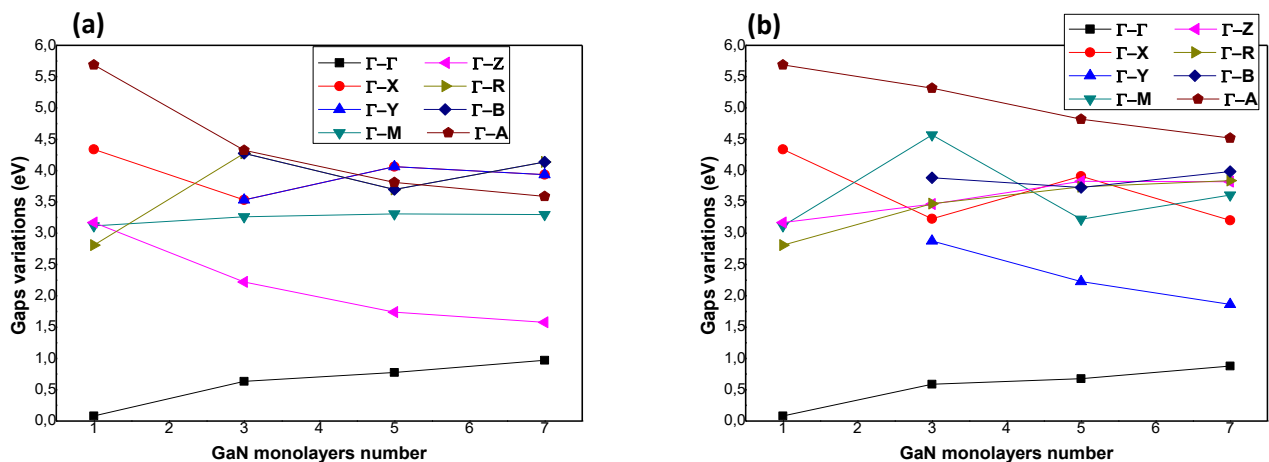


Figure IV-30 : Variation des gaps d'énergies en fonction du nombre  $n$  de monocouches dans le super-réseau  $InN_m/GaN_n$  ( $m$  est fixé à 1), (a) pour les SLs (001), (b) pour les SLs (110).

Gaps	Both (001) and (110) SL (1,1)	(001)-SL (1,3)	(001)-SL (1,5)	(001)-SL (1,7)	(110)-SL (1,3)	(110)-SL (1,5)	(110)-SL (1,7)
$\Gamma$ - $\Gamma$	0.0819	0.635	0.777	0.971	0.589	0.677	0.879
$\Gamma$ -X	4.339	3.532	4.0631	3.936	3.229	3.912	3.207
$\Gamma$ -Y	<i>Y n'existe pas pour SL(1,1)</i>	Like $\Gamma$ -X	Like $\Gamma$ -X	Like $\Gamma$ -X	2.877	2.227	1.864
$\Gamma$ -M	3.116	3.261	3.308	3.298	4.568	3.222	3.610
$\Gamma$ -Z	3.169	2.222	1.738	1.577	3.464	3.829	3.823
$\Gamma$ -R	2.809	4.276	3.698	4.136	3.472	3.741	3.838
$\Gamma$ -B	<i>B n'existe pas pour SL(1,1)</i>	Like $\Gamma$ -R	Like $\Gamma$ -R	Like $\Gamma$ -R	3.885	3.731	3.985
$\Gamma$ -A	5.687	4.323	3.811	3.589	5.317	4.819	4.520

**Tableau IV-7 :** Les gaps entre les différents points de haute symétrie des SLs  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$  suivant les deux axes de croissance (001) et (110).

#### IV-2-2-3-2 Densités d'états

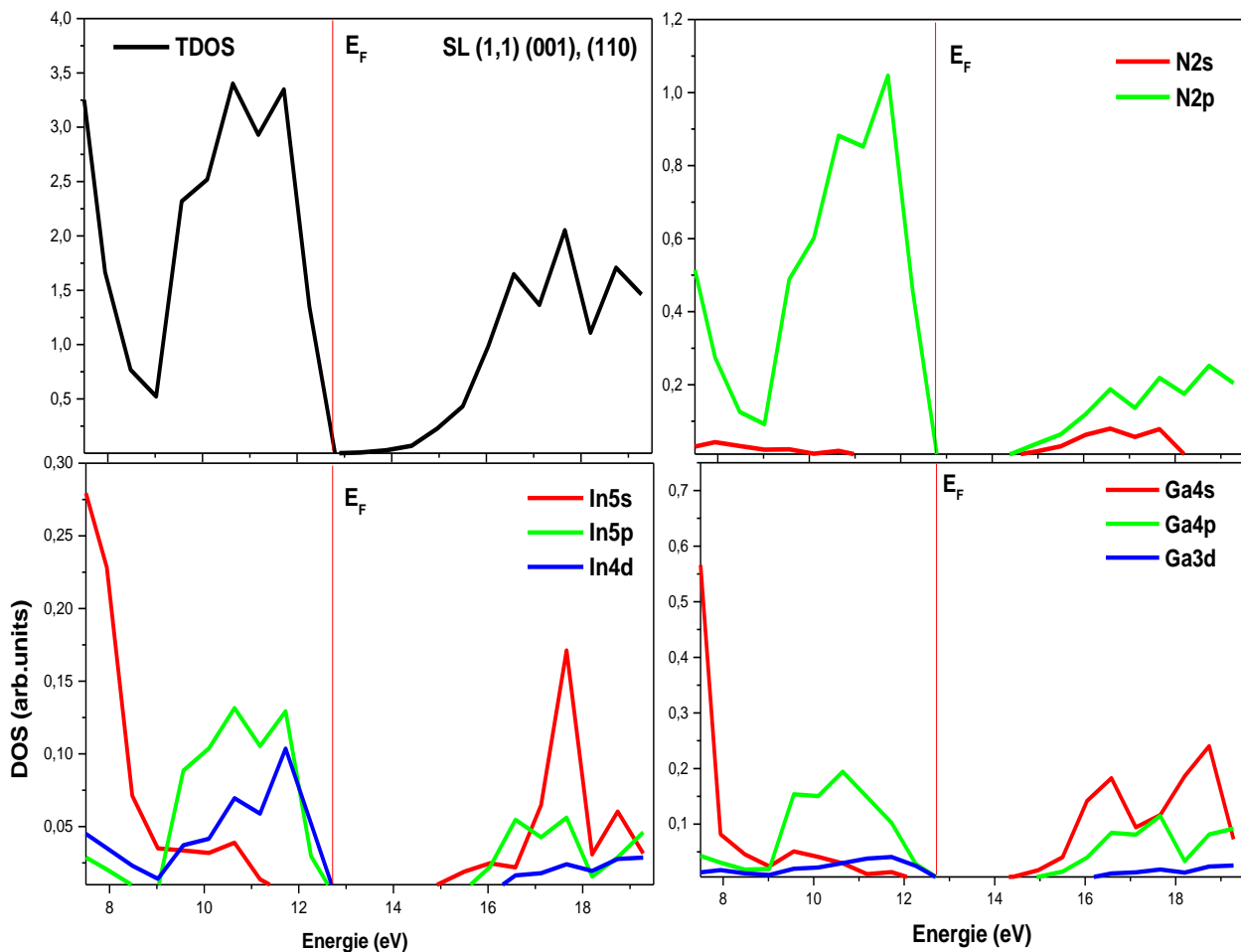
Dans ce qui suit, nous voulons comprendre ce qui se passe dans les deux cas de SLs en comparant directement les pics des différentes courbes de densité d'états (DOS) et en analysant les densités partielles en fonction des différents nombres de monocouches de GaN dans les SLs. D'après les détails donnés sur la densité d'états des binaires dans le paragraphe précédent, on remarque que les contributions des orbitales  $s$ ,  $p$  et  $d$  des SLs  $(\text{InN})/(\text{GaN})_n$  suivant les deux axes de croissance sont similaires à celle des constituants binaire InN et GaN, ce qui laisse deviner une certaine constance au niveau du gap  $\Gamma$ - $\Gamma$  des superréseaux  $(\text{InN})/(\text{GaN})_n$  par rapport aux directions de croissance. Ceci nous mène à penser qu'il faudrait étudier la variation de la contribution des orbitales aux niveaux des autres points de haute symétrie qui font compétition au point  $\Gamma$ , car c'est peut être à ce niveau que se trouve la différence.

Nous montrons sur les figures IV-31, IV-32, IV-33 et IV-34 la densité d'états totale et partielle des deux orientations avec ( $n = 1, 3, 5$  et  $7$ ). La valeur du gap qui est très claire sur ces courbes, nous avons déjà déterminé sa nature directe dans les calculs précédents des structures de bandes. Les profils des DOS total et partiels illustrent la participation des orbitales aux interactions électroniques. Le premier pic



qui se produit dans la  $BV_{min}$  des SLs (001) et (110) montre une forte contribution de l'orbitale  $s$  de l'atome In et Ga comme étant les plus dominantes. En allant vers les plus hautes énergies, nous avons la région  $BV_{max}$  ou il y a une forte contribution des orbitales  $p$  des trois atomes N, Ga et In et une contribution de l'orbitale  $d$  des atomes Ga et In. Les pics de la  $BC$  sont tous dus à un mélange des orbitales  $p$ ,  $s$  et  $d$  des atomes N, Ga et In pour les SLs orientés (001) et (110).

Il ressort clairement de ces résultats que les orbitales contribuent de manière presque similaire aux  $BV_{max}$  et aux  $BC_{min}$  dans les SLs orientés (001) et (110), qui est un résultat intéressant en soi. La conclusion donnée dans cette section sera confirmée par les recherches sur les propriétés optiques présentées ci-dessous.



**Figure IV-31** : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs  $InN_n/GaN_n$  pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $n = 1$  et  $m = 1$ )

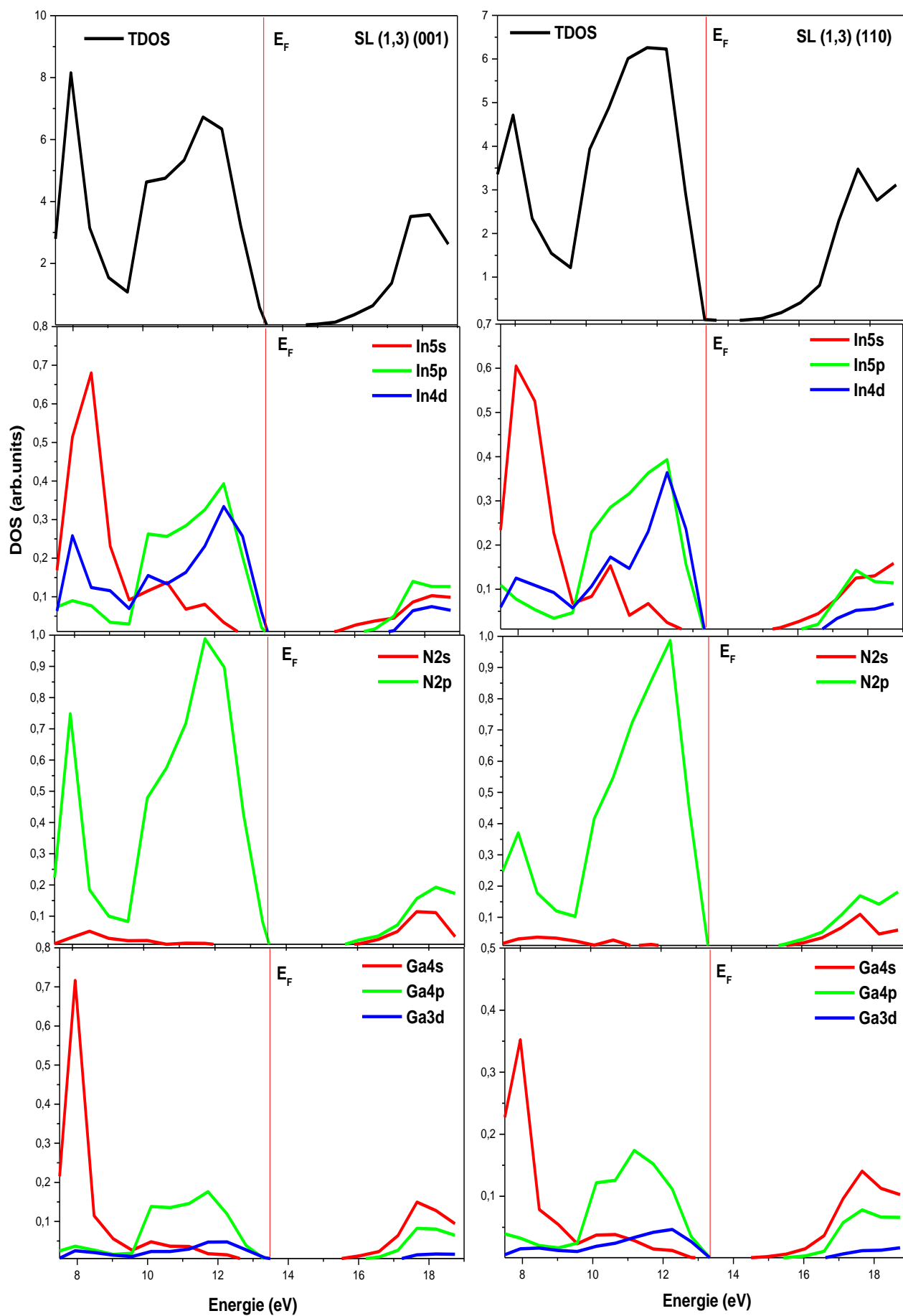


Figure IV-32 : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs  $InN_m/GaN_n$  pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $m = 1$  et  $n = 3$ )

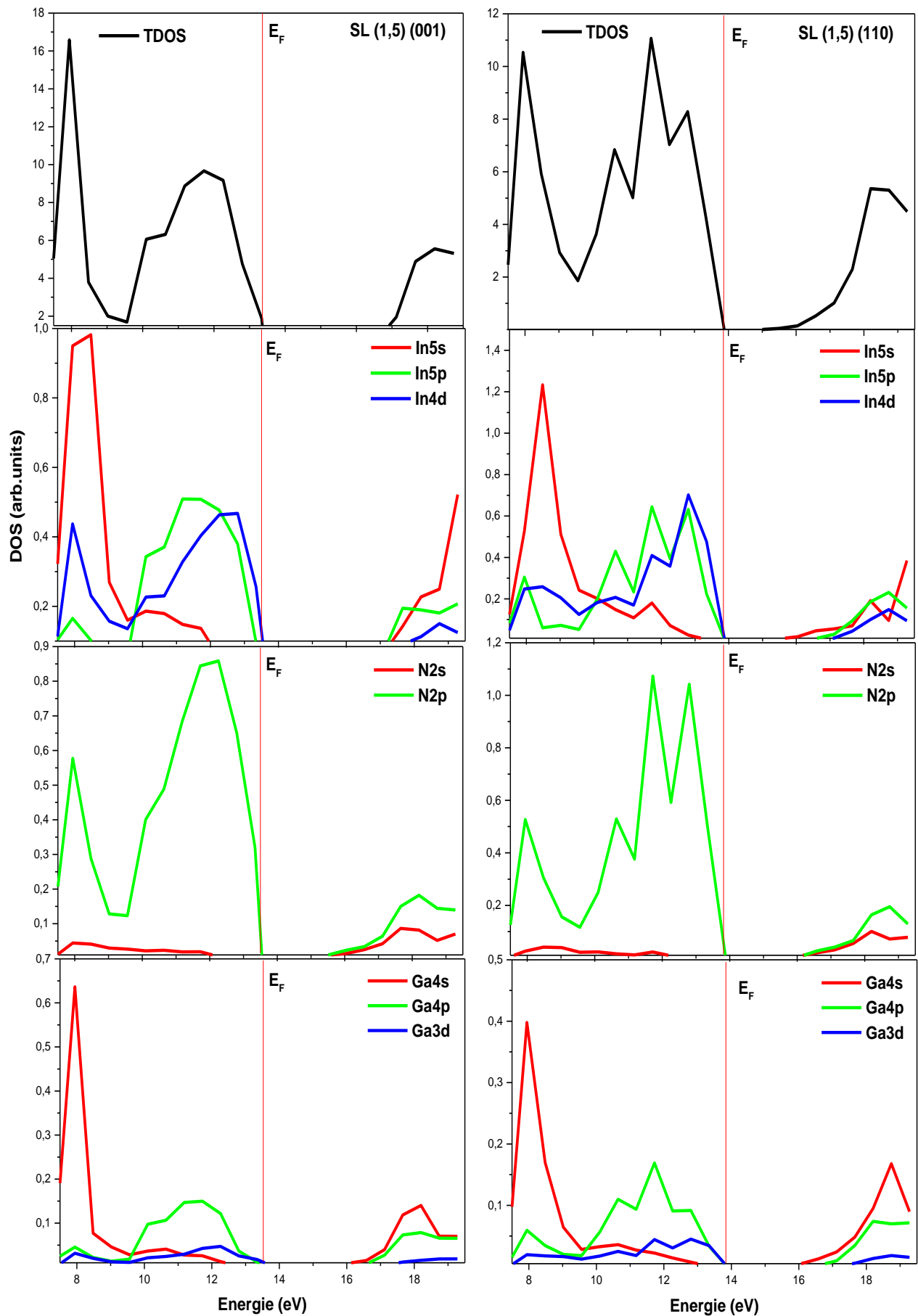


Figure IV-33 : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs InN<sub>m</sub>/GaN<sub>n</sub> pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $m = 1$  et  $n = 5$ )

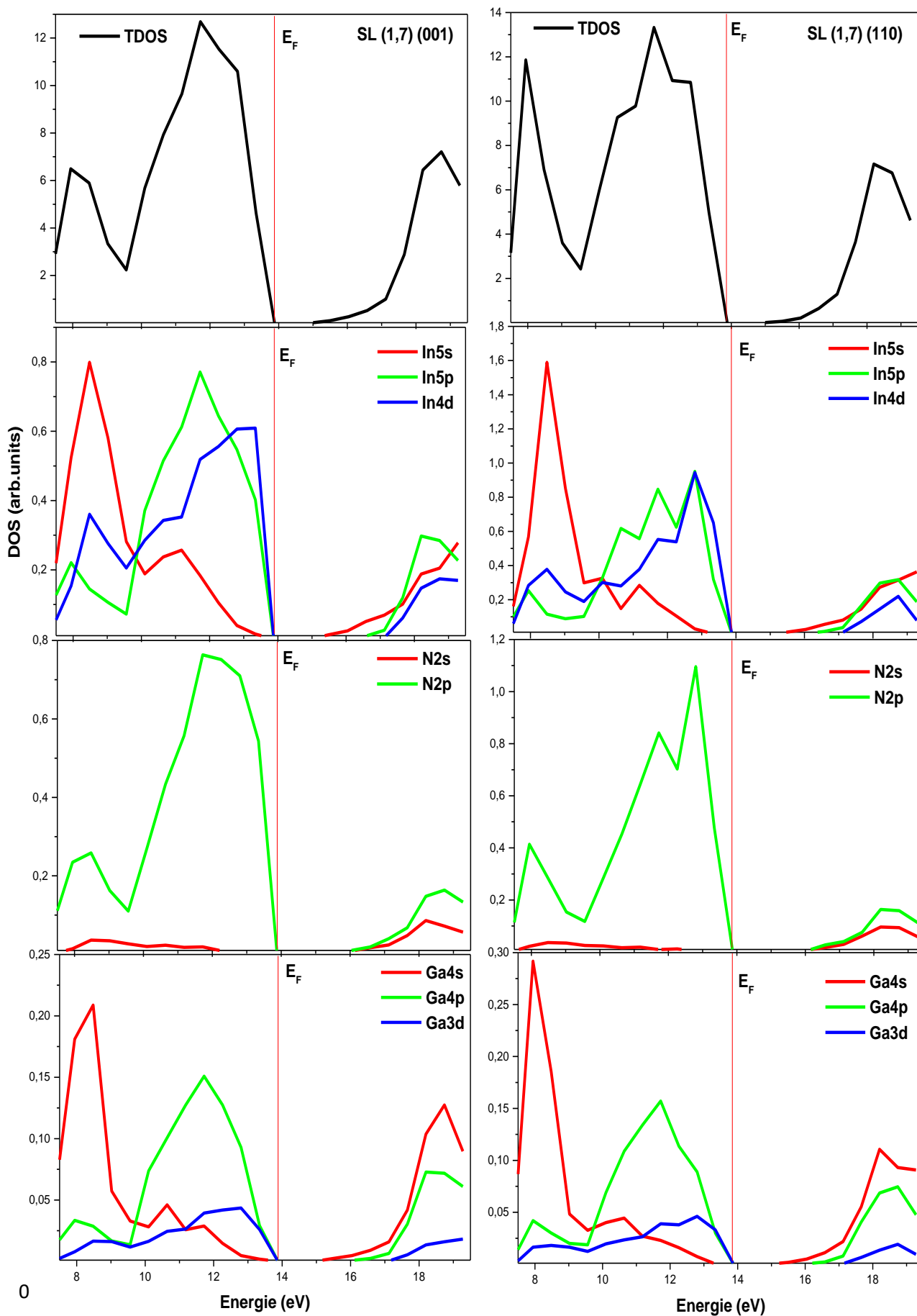


Figure IV-34 : La densité d'état (DOS) totale et partielle des SLs  $InN_m/GaN_n$  pour les deux axes de croissance (001) et (110) ( $m = 1$  et  $n = 7$ )

### IV-2-3 Propriétés optiques des superréseaux (SLs) InN<sub>m</sub>/GaN<sub>n</sub>

L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [28]. Ces propriétés sont primordiales pour connaître l'activité optique des matériaux pour leurs applications dans les dispositifs optoélectroniques puisqu'elles régissent le déplacement de la lumière dans le composant. Par exemple, dans un composant composé de différents matériaux, la lumière a tendance à se propager dans les matériaux ayant le plus fort indice de réfraction. On peut alors confiner la lumière dans une couche particulière, comme dans les lasers. Cette propriété est aussi très intéressante pour les applications de cellules solaires afin d'augmenter les efficacités d'absorption de la lumière [29].

Ces propriétés importantes sont liées à la fonction diélectrique complexe  $\varepsilon(\omega)$  relation (IV-27), qui est principalement déterminée par la transition entre les bandes de valence et de conduction. Où  $\varepsilon_1(\omega)$  et  $\varepsilon_2(\omega)$  sont les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique, respectivement [30]. La partie imaginaire de la fonction diélectrique,  $\varepsilon_2(\omega)$  est calculée directement à partir des éléments de la matrice d'impulsion en faisant la somme de toutes les transitions possibles des états occupés aux ceux qui sont vides [31]. La partie réelle  $\varepsilon_1(\omega)$  de la fonction diélectrique peut être dérivée de la partie imaginaire en utilisant la relation de *Kramers–Kronig* [32].

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i \cdot \varepsilon_2(\omega) \quad (IV-27)$$

Les parties réelles et imaginaires permettent le calcul de fonctions optiques importantes telles que l'indice de réfraction  $n(\omega)$  et le coefficient d'absorption  $\alpha(\omega)$  en utilisant les relations suivantes [33] :

$$n(\omega) = \left[ \frac{[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]^{\frac{1}{2}} + \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (IV-28)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{\lambda} \cdot k(\omega) \quad (IV-29)$$

Où  $k$  est le coefficient d'extinction,  $\lambda$  est la longueur d'onde de la lumière dans le vide.

Pour bien représenter les propriétés optiques, il est nécessaire d'utiliser un échantillonnage le plus fin possible de la zone de Brillouin. A cet effet, après calcul de la structure électronique par auto-cohérence, le calcul des valeurs propres  $E_i$  et des vecteurs propres correspondants est effectué pour un très grand nombre de points  $k$  ( $k=600$ ).

Pour décrire le comportement des SLs  $\text{InN}_1/\text{GaN}_n$  soumis à l'effet d'une excitation extérieure (lumière), nous avons calculé la fonction diélectrique  $\epsilon(\omega)$  dans les deux directions (001) et (110) et pour différentes monocouches  $n$  ( $n = 3, 5, 7$ ). Pour caractériser toutes ces propriétés optiques, il suffit de calculer la partie imaginaire  $\epsilon_2(\omega)$  de la fonction diélectrique. En utilisant le paramètre du réseau optimisé, les calculs ont été effectués en utilisant l'approximation GGA dans une gamme d'énergie allant de 0 à 30 eV.

Les figures IV-35 montre la partie imaginaire de la fonction diélectrique pour les composés InN et GaN. On note que ces spectres optiques représentés dans cette figure sont presque similaires avec des petites différences (la position et la hauteur des pics). L'analyse des spectres de  $\epsilon_2(\omega)$  indique que les premiers points critiques de la fonction diélectrique qui correspond aux seuils d'absorption fondamentale commencent à environ 0.6 et 2.4 pour l'InN et GaN respectivement. L'origine de ces points est due à la transition optique entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction correspondant à la transition  $\Gamma \rightarrow \Gamma$ . Nous remarquons aussi que l'allure des ces spectres présentent approximativement les mêmes pics  $E$ . Les valeurs numériques correspondantes de ces pics sont résumées dans le tableau IV-8. Le maximum de l'absorption pour les deux binaires est situé à 8.39 et 7.79 pour l'InN et GaN respectivement. La plupart des transitions optiques contribuent à ces pics se produisent à partir de l'orbitale  $p$  occupée des atomes In, Ga et N localisé dans le haut de la bande de valence vers l'orbite  $s, p$  inoccupée des atomes In, Ga et N localisés dans le bas de la bande de conduction.

La variation de la partie réelle de la fonction diélectrique  $\epsilon_1(\omega)$  en fonction de l'énergie est illustrée sur la figure IV-36. Les spectres montrent des pics d'intensité élevée autour de 1.8 pour l'InN et 6 eV pour le GaN. Cela est connu sous le nom le seuil l'absorption fondamental. D'après les valeurs calculées de la constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$  on constate qu'un faible gap énergétique donne une

grande valeur de  $\varepsilon_1(0)$ . Ceci peut être expliqué par le modèle de Penn [34] donné par l'expression :

$$\varepsilon_1(0) \approx 1 + \left( \frac{\hbar\omega_P}{E_g} \right)^2 \quad (IV-30)$$

En utilisant l'expression (IV-28), l'indice de réfraction des deux binaires a été étudié. Nos résultats sont représentés sur la *figure IV-37*. Les indices de réfraction statiques  $n(0)$  des binaires sont estimés à partir des spectres de réfraction (tableau IV-8). A partir de ce tableau, nous remarquons qu'il y a une augmentation des valeurs de  $n(0)$  et  $\varepsilon_1(0)$  de l'InN par rapport à celles du GaN, cela est dû au numéro atomique élevé de l'atome d'indium. L'indice de réfraction maximal est atteint pour l'énergie photonique autour de 1.2 eV pour l'InN et 6 eV pour le GaN.

Les spectres d'absorption optique des deux binaires sont représentés sur la *figure IV-38*. Nous observons à partir des courbes que le seuil d'absorption commence à partir des valeurs d'énergie de 0.6 eV pour l'InN et 2.4 eV pour le GaN. L'évolution de ces spectres montre que les valeurs de  $\alpha(\omega)$  atteignent une valeur maximale aux énergies d'environ 12 eV et 13.2 eV pour l'InN et GaN respectivement, puis le coefficient d'absorption diminue brusquement pour des énergies supérieures à 30 eV.

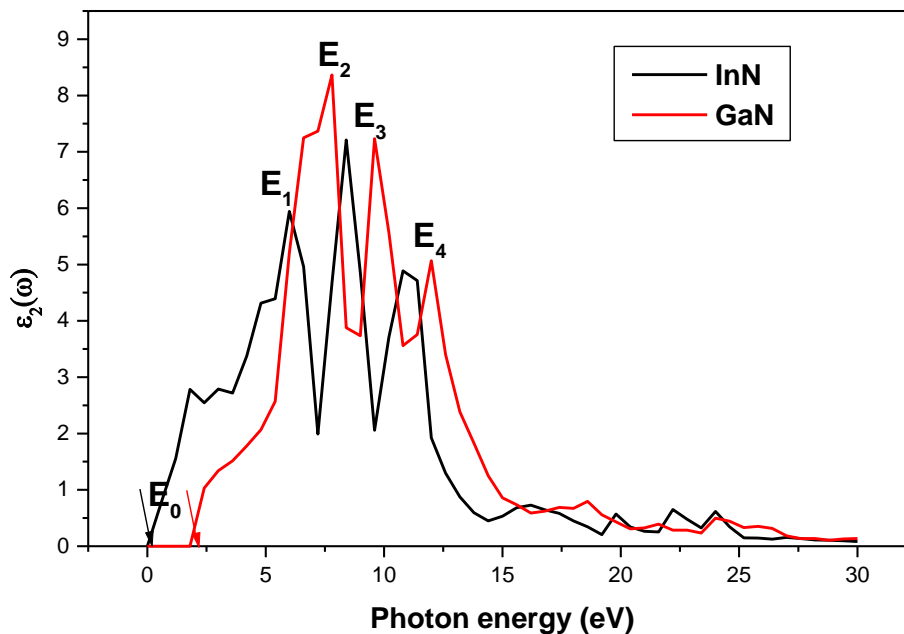


Figure IV-35 : Parties imaginaires des binaires InN et GaN.

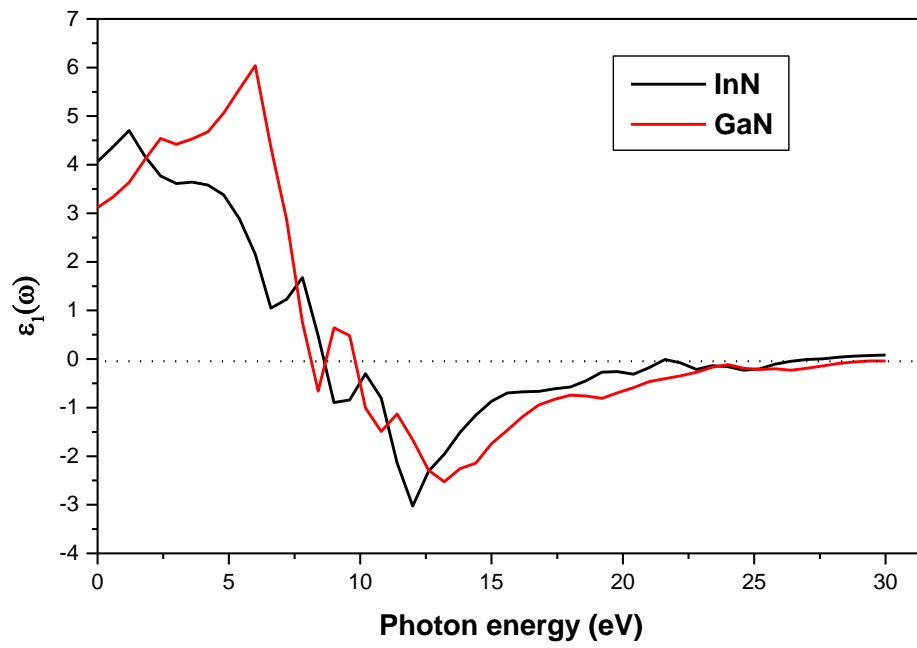


Figure IV-36 : Parties réelles des binaires InN et GaN.

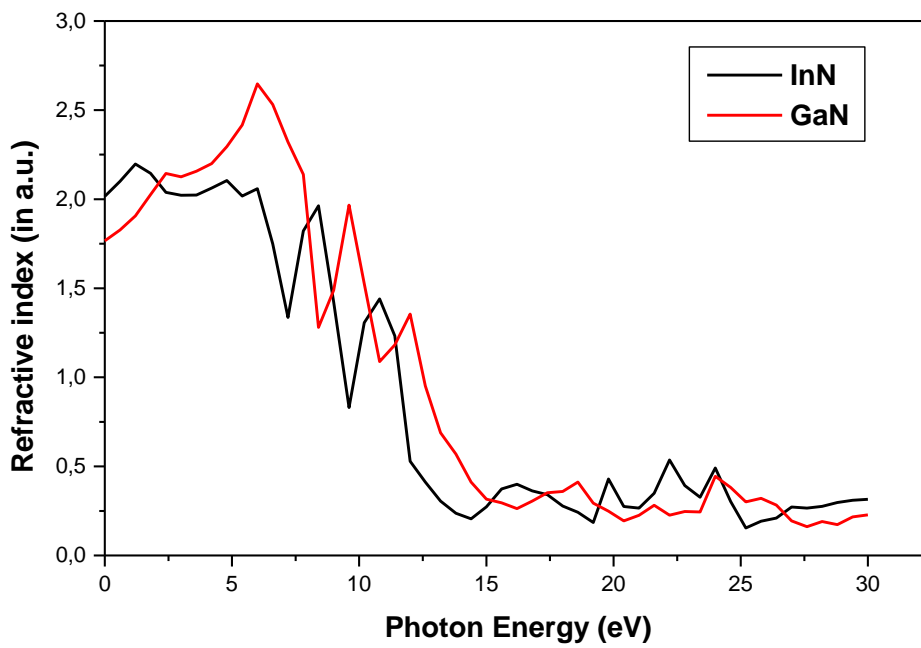


Figure IV-37 : Indices de réfraction  $n(\omega)$  pour l'InN et GaN.



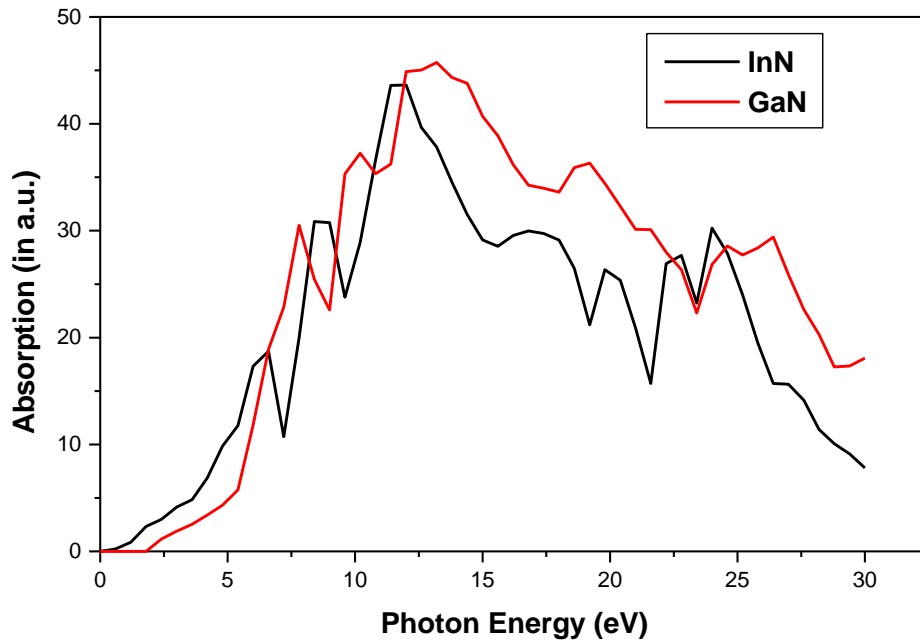


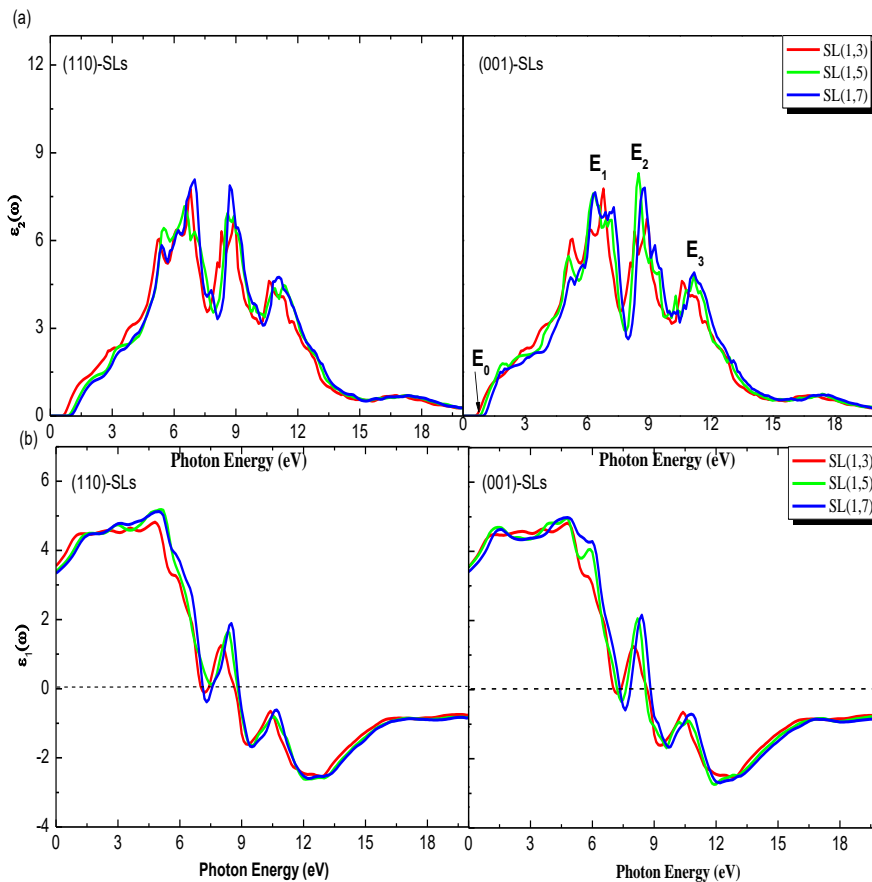
Figure IV-38 : Coefficients d'absorption  $\alpha(\omega)$  pour l'InN et GaN.

Materials	Critical points					Static dielectric constant index $\epsilon_1(0)$	Static refractive index $n(0)$
	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$		
InN	0.6	6	-	8.39	10.8	4.373	2.016
Autres calculs						5.76 ; 5.09[35]	3.404[37]
GaN	2.4	-	7.97	9.59	12.0	3.338	1.766
Autres calculs						4.48 ; 4.75[35]	2.210[36]

Tableau IV-8 : Constantes optiques statiques calculées  $\epsilon_1(0)$ , indice de réfraction statique  $n(0)$  et les points critiques pour l'InN et GaN.

Pour montrer toutes les transitions optiques possibles dans les SLs  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ , nous avons augmenté le nombre de points spéciaux dans la première ZB jusqu'à 600 k-points, avec une plage d'énergie jusqu'à 20 eV. La figure IV-39 montre les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique pour les composés SL (1,3), SL (1,5) et SL (1,7) pour les deux axes de croissance. L'apparition des pics dans  $\epsilon_2(\omega)$  est principalement produite par les transitions optiques inter-bandes ou intra-

bandes. La contribution des transitions intra-bande n'est importante que dans le cas des métaux [38]. Les spectres  $\varepsilon_2(\omega)$  représentés en termes de transition optique entre les états remplis et vide de divers SLs dans les deux cas (001) et (110) sont assez différents et reflètent diverses transitions optiques. En augmentant le nombre de monocouches  $n$ , les pics se déplacent vers une énergie plus élevée, qui pourrait être fortement dépendante de la polarisation ionique des SLs en raison de la grande électronégativité de N.

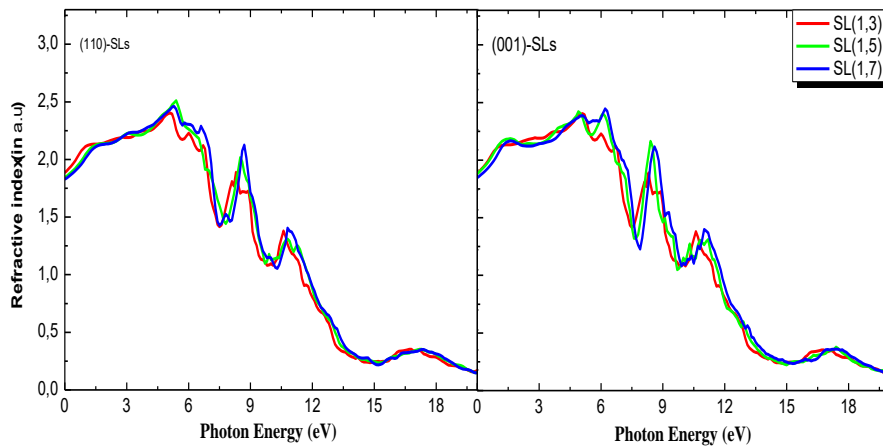


**Figure IV-39** : Parties imaginaires (a) et parties réelles (b) des SLs  $(\text{InN})_1 / (\text{GaN})_n$  avec  $n = 3, 5, 7$  dans les deux axes de croissance.

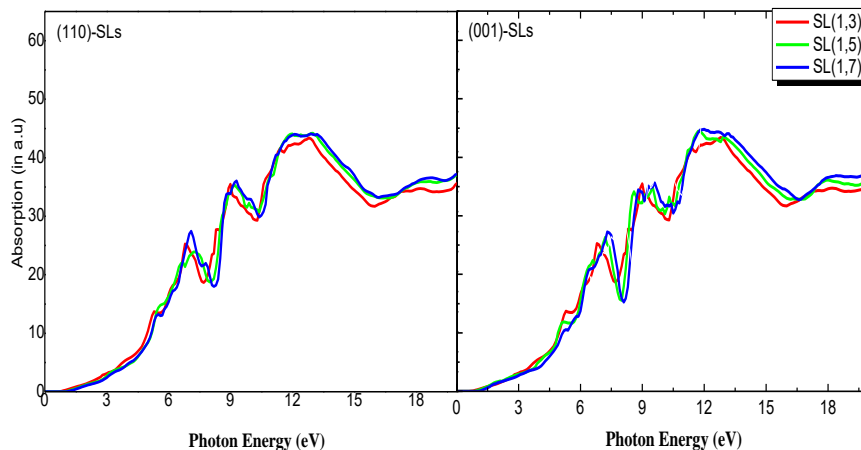
Les courbes de  $\varepsilon_2(\omega)$  indiquent que l'énergie de seuil (premier point critique) se produit à 0,665, 0,833, 0,998 eV dans le cas (001) et (0,605, 0,866, 0,899 eV dans le cas (110)) pour  $n = 3, 5, 7$  respectivement. Ces valeurs correspondent à la valeur de transition électronique ( $\Gamma_V \rightarrow c$ ). Ce point représente le seuil des transitions optiques directes entre l'état le plus élevé de la bande de valence et l'état le plus bas de la bande de conduction, qui est identifié comme le front d'absorption fondamental.

Au-delà de ces points, les courbes augmentent rapidement. Comme observation générale, toutes les courbes de la *figure IV-39 (a)* montrent trois pics majeurs dans nos calculs; ( $E_1$ ,  $E_2$  et  $E_3$ ), apparaissant le comportement de résonance. Nous remarquons aussi que les fonctions diélectriques du superréseau (InN) / (GaN)<sub>n</sub> dans les deux directions (001) et (110) présentent approximativement les mêmes pics  $E$ . Les valeurs numériques correspondantes de ces pics pour tous les SLs dans les deux orientations sont résumées dans le *tableau IV-9*. La partie imaginaire de la fonction diélectrique reflète l'absorption du matériau. L'absorption maximale pour les trois SL est située à 6,80, 6,366, 8,799 eV dans le cas (001) et (6,766, 6,50, 7,01 dans le cas (110)), respectivement. Pour les SLs orientés à la fois (001) et (110), la plupart des transitions optiques contribuent à ces pics se produisent à partir de l'orbite  $p$  occupée des atomes In, Ga et N et de l'orbitale  $d$  de l'atome Ga localisé dans le haut de la bande de valence vers l'orbite  $s$  inoccupée des atomes In et Ga localisés dans le bas de la bande de conduction.

La variation du  $\epsilon_1(\omega)$  en fonction de l'énergie pour les SLs est représentée sur la *figure IV-39 (b)*. Nous avons noté que ces spectres optiques représentés sur la figure indiquée sont similaires avec de petites différences (la position et la hauteur des pics pour les deux axes de croissance). La valeur limite de la partie réelle de la fonction diélectrique complexe obtenue à une fréquence d'irradiation proche de zéro est appelée constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$ . Pour une dispersion nulle (l'inexistence de la diffusion) l'absorption est maximale. Nos valeurs calculées de  $\epsilon_1(0)$  trouvées de cette manière sont résumées dans le *tableau IV-9*. La constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$  diminue avec l'augmentation de monocouches  $n$ , ce qui est cohérent avec l'augmentation de la valeur de la bande interdite directe, indiquant qu'elle est en relation inverse avec la bande interdite selon le modèle de Penn [34]. Nous avons conclu que le nombre de monocouches utilisées a un effet sur les parties réelles des fonctions diélectriques pour toutes les configurations. Les valeurs de  $\epsilon_1(0)$  deviennent inférieures pour (110) par rapport à (001).



**Figure IV-40** : Indices de réfraction  $n(\omega)$  pour SLs  $(\text{InN})_1 / (\text{GaN})_n$  avec  $n = 3, 5, 7$  dans les deux axes de croissance



**Figure IV-41** : Coefficients d'absorption  $\alpha(\omega)$  pour SLs  $(\text{InN})_1 / (\text{GaN})_n$  avec  $n = 3, 5, 7$  dans les deux axes de croissance.

L'indice de réfraction des SLs  $(\text{InN})/(\text{GaN})_n$  est un outil précieux pour la conception de dispositifs photovoltaïques et optoélectroniques. Afin d'étudier la transparence des SLs en réponse à une lumière incidente, la relation de l'équation (IV-29) est utilisée pour calculer les valeurs d'indice de réfraction théorique pour tous les SLs. Les spectres de réfraction  $n(x)$  et l'indice de réfraction statique  $n(0)$  sont représentés sur la figure IV-40 et rapportés dans le tableau IV-9. Pour les SLs calculés, les indices de réfraction statiques  $n(0)$  sont estimés à partir des spectres de

réfraction  $n(x)$  (voir *tableau IV-9*). L'indice de réfraction maximal est atteint pour l'énergie photonique autour de 5,0, 4,89, 6,23 eV pour le cas (001) et (5,10, 5,40, 5,30 eV pour le cas (110)), respectivement. Les spectres de l'indice de réfraction de la *figure IV-40* montrent une augmentation de 2,424 (pour  $n = 3$ ) à 2,449 (pour  $n = 7$ ) dans les SLs (001), et sa valeur augmente de 2,424 (pour  $n = 3$ ) à 2,457 (pour  $n = 7$ ) pour les SLs orientés (110).

Les spectres d'absorption optique sont calculés afin de discerner la nature optique dans les SLs. La dispersion dans les spectres d'absorption optique du SL(1, $n$ ) dans les deux directions pour ( $n = 3,5,7$ ) est représentée sur la *figure IV-41*. Le pic d'absorption des deux directions passe à une énergie plus élevée lorsque  $n$  augmente, et l'énergie de seuil augmente. Nous observons à partir des courbes de la *figure IV-41* que le seuil d'absorption commence à partir des valeurs d'énergie de 0.600, 0.833 et 1.0 eV pour le cas (001) et (0.600, 0.766 et 0.9 eV pour le cas (110)), respectivement. Il se déplace vers une énergie plus faible par rapport au GaN massif dont le seuil est situé à  $E_s = 2,4$  eV. Deux pics majeurs à environ 7 eV et 8,9 eV dans le coefficient d'absorption pour les deux axes de croissance représentent l'absorption de la lumière à deux longueurs d'onde différentes. La valeur maximale de  $\alpha(\omega)$  est d'environ 12,5 eV pour le cas (001) et (12,8 eV pour le cas (110)) pour toutes les valeurs de  $n$ , puis le coefficient d'absorption diminue brusquement pour le photon lumineux au-dessus de ces énergies.

D'après les résultats calculés de la partie réelle de la fonction diélectrique, nous avons déterminé la constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$  donnée par la limite inférieure de l'énergie de  $\epsilon_1(\omega)$ . Les valeurs de la constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$  et de l'indice de réfraction statique  $n(0)$  obtenus pour les SLs sont regroupées dans le *tableau IV-9*.

Materials	Critical points				Static dielectric constant index	Static refractive
	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$\epsilon_1(0)$	$n(0)$
<b>(001) SL(1,n) systems with <math>n=1,3,5</math></b>						
SL(1,3)	0.70	6.36	8.80	11.21	3.55	1.885
SL(1,5)	0.79	6.26	8.51	11.17	3.54	1.882
SL(1,7)	1.00	6.50	8.34	11.40	3.41	1.846
<b>(110) SL(1,n) systems with <math>n=1,3,5</math></b>						
SL(1,3)	0.60	6.79	8.85	10.65	3.55	1.885
SL(1,5)	0.90	6.50	8.58	11.27	3.39	1.842
SL(1,7)	0.90	7.02	8.66	11.03	3.33	1.827

**Tableau IV-9** : Constantes optiques statiques calculées  $\epsilon_1(0)$ , indice de réfraction statique  $n(0)$  et les point critiques pour SL  $(\text{InN})_1 / (\text{GaN})_n$

### IV-3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons traité nos calculs en utilisant la méthode la méthode *FP-LMTO* avec l'approximation du gradient généralisé *GGA96* pour évaluer les propriétés structurales, électroniques et optiques des alliages  $(\text{In,Ga})\text{N}$  et des SLs  $(\text{InN})_m/(\text{GaN})_n$ . Les résultats des propriétés électroniques des systèmes massifs  $\text{InGaN}$  montrent que l'influence du paramètre de la contribution du volume de déformation, semble le plus grand des paramètres de courbure dans ce système. Ainsi on a trouvé pour les matériaux massifs et les SLs (Dans les deux directions) une bande interdite directe, ce qui est intéressant pour les dispositifs optoélectroniques. De plus dans l'étude de la *DOS*, il est remarquable que les contributions des orbitales *s*, *p* et *d* des SLs  $(\text{InN})/(\text{GaN})$  suivant les deux axes de croissance sont similaires à celle des constituants binaire  $\text{InN}$  et  $\text{GaN}$ .

Nous avons ensuite établie une étude comparative entre les deux axes de croissance (001) et (110), la principale conclusion à retenir c'est que la direction de croissance (110) n'améliore pas l'activité optique. La contribution similaire des

orbitales atomiques aux propriétés électroniques dans les deux orientations (001) et (110) est probablement la principale raison pour laquelle les propriétés optiques ne devraient pas être modifiées de manière significative. On suppose que la contribution des grandes cellules ne changera pas les présentes conclusions, car l'augmentation de la cellule ne fera que rendre la contribution importante par rapport à celle de l'interface et ne pourra plus améliorer l'activité optique. En outre, les fonctions diélectriques, l'indice de réfraction et les spectres d'absorption calculés des SLs (001) ont tendance à ne pas être tout à fait différents de ceux des SLs (110).

## Références bibliographiques

- [1] S. Y. Savrasov, Phys. Rev. B 54 (1996) 16470.
- [2] J. P. Perdew, Y. Wang. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy Phys. Rev. B 45, 13244 (1992).
- [3] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, Vol 30 (1944) 5390
- [4] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, J. Appl. Phys. 94 (2003) 3675.
- [5] P. Rinke, M. Winkelkemper, A. Qteish, D. Bimberg, J. Neugebauer, M. Scheffler, Phys. Rev. B. 77 (2008) 075202.
- [6] C. Y. Yeh, Z. W. Lu, S. Froyen, A. Zunger, Phys. Rev. B 46 (1992) 10 086.
- [7] S. Goumri-Said, M. B. Kanoun, A. E. Merad, G. Merad, H. Aourag, Chemical Physics 302 (2004) 135.
- [8] Bo-Ting Liou, Jpn. J. Appl. Phys. 47 (2008) 3350.
- [9] I. Gorczyca, T. Suski, G. Staszczak, N. E. Christensen, A. Svane, X. Wang, E. Dimakis, T. Moustakas, Jpn. J. Appl. Phys. 52 (2013) 08JL06.
- [10] S. g. Zhu, J. j. Shi, S. Zhang, M. Yang, Z.-q. Bao, M. Zhang, Appl. Phys. B 104 (2011) 105.
- [11] M. J. Espitia R, O. S. Parra, C. O. López, J. Magn. Mater. 451 (2018) 295.
- [12] H. Achour, S. Louhibi-Fasla, F. Mana, Phys. Procedia. 55 ( 2014 ) 17.
- [13] S. P. Tamariz-Kaufmann, A. A. Valladares, A. Valladares, R. M. Valladares, J. Non-Cryst. Solids. 420 (2015) 7.
- [14] W. Li, M. Pessa and J. Likonen, Appl. Phys. Lett. 78 (2001) 2864.
- [15] Z Dridi, B Bouhafs and P Ruterana, Semicond. Sci. Technol. 18 (2003) 850–856
- [16] R. Ahmed, H. Akbarzadeh, F. e-Aleem, Phys. B 370 (2005) 52.
- [17] L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, Appl. Phys. Lett. 80 (2002) 1177.
- [18] Bakhtiar Ul Haq, R. Ahmed, A. Shaari, F. El Haj Hassan, Mohammed Benali Kanoun, Souraya Goumri-Said, Solar Energy 107 (2014) 543–552.
- [19] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, Phys. Rev. B 1, 3351 (1970); R. Hill and D. Richardson, J. Phys. C 4, L289 (1971).
- [20] A. BERGHOUT « Etude ab initio de composés et d'alliages ternaires II-VI à base de béryllium » thèse de doctorat en Physique de la Matière Condensée, Université PAUL VERLAINE-METZ (2007).
- [21] J. E. Bernard and A. Zunger. Phys. Rev. B 36, 3199 (1987).



- [22] *M. Ferhat and F. Bechstedt*, First-principles calculations of gap bowing in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  alloys: Relation to structural and thermodynamic properties, *Phys. Rev. B.* 65, (2002) 075213.
- [23] *J. A. Van Vechten and J. K. Bergstresser*, *Phys. Rev. B* 1, (1970) 3351.
- [24] *Perdew J P and Wang Y*, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 13244.
- [25] *K. Talbi, Y. Cherchab, N. Sekkal*, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 58 (2012) 30103.
- [26] *S. Froyen, D. M. Wood, A. Zunger*, *Appl. Phys. Lett.* 54 (1989) 2435.
- [27] *J.P.L. Herve et L.K.J. Vandamme*, *Infrared. Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [28] *V. GORGE* « Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V », thèse de doctorat en physique, UNIVERSITE PARIS-SUD 11 (2012).
- [29] *S. Adachi*, *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, Edit, John Wiley & Sons, Ltd., (2009), DOI:10.1002/9780470744383
- [30] *D. Allali, A. Bouhemadou, E. Muhammad Abud AlSafi, S. Bin-Omran, M. Chegaar, R. Khenata, A. H. Reshak*, *Phys. B* 443 (2014) 24.
- [31] *P. Y. Yu, M. Cardona*, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*, 4th edn. (Springer, Berlin, 2010).
- [32] *V. Antonov, B. Harmon, A. Yaresko*, *Electronic Structure and Magneto-Optical Properties of Solids*, 1st edn. (Kluwer Academic Publishers, New York, 2004).
- [33] *D.R. Penn*, *Phys. Rev* 128 (1962) 2093.
- [34] *M. I. Ziane, Z. Bensaad, B. Labdelli and H. Bennacer*, *Sensors & Transducers*, Vol. 27, Special Issue, (2014) 374–384.
- [35] *Herve P Vandamme K L J*, *infraed Phys*, 35 (1994) 609.
- [36] *A.H.Yafaiedh, N.Bouarissa*, *Mater. Chem. Phys.* (2008), doi :10.1016/j. matchem phys.2008 .11 . 036.
- [37] *M.Merabet, D. Rached, R. Khenata, S. Benalia, B. Abidri, N. Bettahar, S. Bin Omran*, *Physica B* 406 (2011) 3247.
- [38] *W. Sun, C. K. Tan, N. Tansu*. *Scientific Reports* 7 (2017) 6671.

# Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, et optiques des composés binaires InN, GaN et leurs alliages ternaires  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , ainsi que l'étude des propriétés des super-réseaux  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$  en fonction du nombre de monocouches  $n$  et suivant les deux axes de croissances (001) et (110), en effectuant des calculs du premier principe en se basant sur la méthode linéaire des orbitales muffin-tin avec un potentiel totale (*FP-LMTO*) implémentée dans le code de calcul *ImtART*.

Les calculs faits sur nos ternaires  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  massifs et les binaires qui les forment nous ont permis d'analyser dans un premier temps les propriétés structurales et électroniques (paramètre de réseau d'équilibre, module de rigidité  $B$  et sa première dérivée) obtenus en employant l'approximation du gradient généralisé (*GGA*), et de les comparer avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux publiés dans d'autres travaux de recherches.

Les résultats indiquent que la *GGA* surestime la constante de maille et sous-estime le module de compressibilité. De plus les calculs montrent que le GaN est moins compressible que l'InN à cause de la liaison réduite entre le Ga et N. En suite on a calculé le paramètre de maille d'équilibre de tous nos alliages ternaires en fonction de la concentration  $x$  par le procédé de minimisation de l'énergie, on a obtenu une augmentation de ce paramètre qui est justifiée par le fait que la taille atomique de l'indium est plus grande que celle de l'atome Ga. Pour les structures de bandes des binaires et des ternaires, la différence entre les valeurs calculées des bandes interdites par rapport aux valeurs expérimentales indique que la *GGA* sous-estime les écarts d'énergie dans les semi-conducteurs. Ainsi que, l'In incorporé conduit à une diminution du gap d'énergie de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , ce dernier conserve la nature du gap direct de leurs constituant binaires.

Dans l'analyse de la densité d'état (*DOS*) des alliages, dans la  $BV_{min}$  on a une augmentation de la contribution de l'orbitale  $s$  de l'atome In en fonction de la diminution de la concentration  $x$ . Par contre, près du gap de la bande de valence

$BV_{max}$  il y a une contribution de l'orbitale  $p$  et  $d$  de l'atome In pour tous les cas, avec une diminution de la contribution de l'orbitale  $d$  en fonction de  $x$ , ce qui prouve que la partie haute de la bande de valence ( $BV_{max}$ ) est reliée par l'augmentation de l'indium dans l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$ .

Dans la deuxième partie de notre travail, nous avons étudié les différentes propriétés des SLs de types  $InN_m/GaN_n$ . On a trouvé que le module compressibilité pour les SLs dans les deux directions de croissances augmente avec l'augmentation du nombre de monocouche  $n$ , ce qui est l'inverse de ce qui est observé pour le paramètre de réseau. D'autre part nous avons remarqué que les SLs ont une bande interdite directe, ce qui est intéressant pour des applications optoélectroniques. De plus l'écart énergétique  $\Gamma-\Gamma$  dans les deux orientations augmente en fonction de l'épaisseur de la barrière, avec une différence pour  $n=7$  où l'écart dans la direction (001) diffère de plus de 92meV que celui dans la direction (110).

De même pour l'analyse de la densité d'état (DOS) des SLs, Il est remarquable que les contributions des orbitales  $s$ ,  $p$  et  $d$  des SLs (InN)/(GaN) suivant les deux axes de croissances sont identiques à celle des constituants binaire InN et GaN. De plus ces orbitales contribuent de manière presque similaire aux  $BV_{max}$  et aux  $BC_{min}$  dans les deux orientations (001) et (110).

Dans une partie suivante de ce travail, nous avons présenté les propriétés optiques des deux binaires ainsi que celle des SLs dans les deux axes de croissances (001) et (110). Ces propriétés sont liées à la fonction diélectrique. Les premiers points critiques de cette fonction correspondent aux seuils d'absorption fondamentale. L'origine de ces points est due à la transition optique  $\Gamma \rightarrow \Gamma$  entre la  $BV_{max}$  et la  $BC_{min}$ . D'autre part nous avons remarqué que l'augmentation du nombre de monocouches  $n$ , conduit à la diminution de la constante diélectrique statique  $\epsilon_1(0)$ , ce qui est cohérent avec l'augmentation de la valeur de la bande interdite directe. Donc on constate qu'un faible gap énergétique donne une grande valeur de  $\epsilon_1(0)$ . De plus, le calcul des fonctions diélectriques, l'indice de réfraction et les spectres d'absorption des SLs (001) ont tendance à ne pas être tout à fait différents de ceux des SLs (110). La raison en est une légère différence entre les contributions des orbitales atomiques aux propriétés électroniques dans les deux sens.

Comme perspective, nous pouvons par exemple citer la poursuite de l'étude visant l'effet du nombre de monocouches  $m$  sur les différentes propriétés des SLs  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$ , ainsi l'impact des autres orientations tel que le (111). De plus on peut poursuivre l'influence de la variation en parallèle des nombres de monocouches  $n$  et  $m$ .

## Résumé

Les dispositifs optoélectroniques à base de nitrures présentent aujourd'hui des performances exceptionnelles. Les études théoriques de ces dispositifs ont joué un rôle fondamental dans le développement des nouveaux matériaux pour diverses applications industrielles.

Le présent travail de recherche a été réalisé au sein du laboratoire des Matériaux Appliqués (AML) de l'université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès.

L'objectif de ce travail est d'apporter une contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires InN, GaN, de l'alliages ternaire InGaN, et de leurs super-réseaux InN/GaN avec deux types d'orientation (001) et (110) en utilisant la méthode linéaire des orbitales muffin-tin avec un potentiel totale (FP-LMTO) implémentée dans le code de calcul *LmtART* qui est considérée comme un outil de choix pour la prédiction de nouveaux matériaux. Ainsi l'étude des SLs de type  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$  sa nous permet de voir l'effet du nombre de monocouche  $n$  sur ces différentes propriétés.

## ملخص

تشهد الأجهزة الإلكترونية الضوئية القائمة على النيتريد في وقتنا الحالي تطورا استثنائيا. لعبت الدراسات النظرية لهذه الأجهزة دورا أساسيا في تطوير مواد جديدة للتطبيقات الصناعية المختلفة. تم إجراء هذا العمل البحثي في مختبر المواد التطبيقية (AML) بجامعة جيلالي ليايس بسيدي بلعباس. الهدف من هذا العمل هو المساهمة في دراسة الخصائص التركيبية والإلكترونية والبصرية للمركبات الثنائية InN و GaN و الثلاثية InGaN وشبكتها الممتازة InN/GaN مع نوعين من التوجهات البلورية (001) و (110) باستخدام نظرية المبدأ الأول (FP-LMTO) المطبقة في برنامج الحساب *LmtART* والذي يعتبر أداة مفضلة للتنبؤ بالمواد الجديدة. وبالتالي، فإن دراسة الشبكات الممتازة (SLs) من نوع  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$  تسمح لنا برؤية تأثير عدد الطبقات الأحادية  $n$  على مختلف الخصائص.

## Abstract

Nitride-based optoelectronic devices nowadays show outstanding performance. Theoretical studies of these devices have played a fundamental role in the development of new materials for various industrial applications.

The present research work was carried out in the laboratory of Applied Materials (AML) of the University Djillali Liabès of Sidi Bel Abbès.

The objective of this work is to contribute to the study of the structural, electronic and optical properties of the binary compounds InN, GaN, the ternary alloy InGaN, and their superlattices InN/GaN with two types of orientation (001) and (110) using the linear method of muffin-tin orbitals with a total potential (FP-LMTO) implemented in the computational code *LmtART*, which is considered a tool of choice for the prediction of new materials. Thus the study of  $\text{InN}_m/\text{GaN}_n$  sa SLs allows us to see the effect of the number of monolayer  $n$  on these different properties.