



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journalhome : www.cu-relizane.dz

ISSN : 2507-7554

E-ISSN : 2661-7595



Contribution à l'étude des propriétés des alliages ScGaN

Open
AccessBELOUFA NABIL^{1*}, BOUCHENTOUF MOHAMED AMINE¹.

¹Laboratoire de Micro et Nanophysiques (LaMiN), Département de physique, Ecole Nationale Polytechnique Maurice Audin, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Oran

RESUME

Article history:

Received in revised form 24 march 2020

Accepted 03 April 2020

Keys word: $Sc_xGa_{1-x}N$, LMTO, LDA, zinc blend structure, rocksalt structure.

En utilisant le calcul de premier principe de l'énergie totale dans la méthode LMTO, nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des alliages $Sc_xGa_{1-x}N$ en fonction de la concentration de Sc de 0% à 100%, dans la phase zinc blende (l'état fondamental de GaN) et dans la phase rocksalt (l'état fondamental de ScN). Nous avons trouvé que pour les concentrations de Sc égales ou inférieures à 0,25%, la structure favorisée est le zinc blende, tandis que pour les concentrations Sc supérieures à 0,25%, la structure favorisée est rocksalt. On constate également que, dans la phase zinc blende, le gap est large et direct. Pour la phase rocksalt, le gap est petit et indirect.

Copyright©2020.....-Allrightsreserved

1. Introduction

Les matériaux nitrures III/V ont fait l'objet d'intérêt considérable dans la technologie des Diodes Electroluminescentes et Lasers (LEDs) qui fonctionnent en longueurs d'ondes larges du visible à l'ultraviolet [1]. D'un point de vue fondamental, les semi-conducteurs III-V à base denitrures présentent aussi des propriétés intéressantes ayant des applications en microélectronique et en optoélectronique.

Parmi ceux-ci, les nitrures-III binaires des semi-conducteurs tels que GaN, AlN et InN qui ont reçu une large attention grâce à leurs grande conductivité thermique, leur mobilité électronique [2] [3] et leurs bandes interdites larges [4]. L'ingénierie de la bande interdite peut conduire à la fabrication des composants optoélectroniques avec des propriétés spécifiques [5] [6]. En fait, la largeur de la bande interdite qu'ils possèdent ($E_{g(AlN)}=6.2\text{eV}$, $E_{g(GaN)}=3.4\text{eV}$, $E_{g(InN)}=1.9\text{eV}$) fait que leurs alliages ternaires iso-cristallins, tels que $Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$, $Sc_xGa_{1-x}N$...conviennent pour les applications optoélectroniques dans la gamme UV au visible. Bien que la combinaison des binaires iso-cristallin pour former des alliages ternaires isocristallins a des avantages évidents, il serait plus important de voir ce qui se passe dans le cas de recombinaison des binaires non-iso-cristallin pour former de nouveaux alliages ternaires.

Récemment, deux auteurs [Ranjan et Bellaiche] ont prédit que la combinaison de GaN-wurtzite avec ScN-rocksalt conduirait à un nouvelalliage ternaire $Sc_xGa_{1-x}N$, qui a une structure hexagonale [7]. Ils ont aussi prédit que $Sc_xGa_{1-x}N$ présenterait : i) une large gamme de bande interdite ii) une grande réaction avec l'augmentation de la concentration de Sc.

* beloufa.nabil@gmail.com

Du coté expérimental, il n'y a pas beaucoup de travaux sur ce matériau, Little et Kordesh ont fait la croissance de ScGa_N par *pulvérisation* et ont rapporté des couches microcristallines ou amorphes. De plus, ils ont constaté que le gap optique diminue linéairement (de 2eV à 4.5eV) avec l'augmentation de la concentration Sc [8].

Dans cet travail, on présentera notre calcul *ab initio* de Sc_xGa_{1-x}N dans les deux phases zincblende (B3) et NaCl (Rocksalt, B1) ainsi que les différents résultats qu'on a pu obtenir. Ces calculs ont été faits pour une concentration de Sc de 100%, 75%, 50%, 25% et 0%.

2. Méthodes de calcul

2.1 La méthode FP-LMTO

La méthode linéaire des orbitales muffin-tin (LMTO) est parmi les techniques qui jouent un rôle très important pour résoudre les équations de la fonctionnelle de la densité pour un système de matière condensée. Cette approche est caractérisée par deux points :

- L'utilisation des fonctions de base d'atome centre qui sont définies par le moment angulaire, construites en dehors des fonctions de Hankel.
- L'utilisation de l'augmentation pour introduire les détails atomiques dans les fonctions de base à proximité de chaque noyau. De façon générale, le raisonnement de cette approche est de construire les fonctions de base qui ressemblent beaucoup aux fonctions d'ondes du début.

En fait la fonction d'onde utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger s'écrit en fonction d'ondes partielles dépendantes de l'énergie :

$$\psi_i(r) = \sum_{RL} \phi_{RL}(\varepsilon_i, r_R) v_{RL,i} + \psi_i(\varepsilon_i, r) \quad (1)$$

où l'onde partielle est :

$$\phi_{RL}(\varepsilon_i, r_R) = \phi_{RL}(\varepsilon_i, r_R) Y_l^m(r) \quad (2)$$

R est la position d'un atome et $r_R = r - R$. Y_l^m est une harmonique sphérique et $\phi_{RL}(\varepsilon_i, r)$ est solution de l'équation Schrödinger radiale :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + v_R(r) - \varepsilon \right] r \phi_{RL}(\varepsilon, r) = 0 \quad (3)$$

La fonction d'onde dans la région interstitielle, $\psi_i(\varepsilon_i, r)$, peut être obtenue par une expansion d'ondes planes ou par une continuation analytique de l'expansion en onde partielle. Une onde partielle est supposée disparaître à l'extérieur de sa propre sphère, et une fonction interstitielle disparaît en dehors de la zone interstitielle.

Le développement de la méthode LMTO (Linear Muffin-Tin Orbital) au cours de ces dernières années (vers le milieu des années 90) grâce aux travaux d'Andersen [9] a permis l'apparition de la FP-LMTO et lui a valu l'appellation «méthode troisième génération».

La méthode LMTO-ASA a précédé l'apparition de la méthode FP-LMTO. Elle est basée sur l'approximation des sphères atomiques. Cette approximation consiste à éliminer la partie interstitielle de l'approximation MT. Le rayon des sphères est donc augmenté pour égaler le rayon des sphères atomiques de Wigner-Seitz. Le potentiel à l'intérieur des sphères est supposé complètement sphérique. L'énergie cinétique des fonctions de base définies dans la zone interstitielle est constante et généralement choisie comme étant nulle. L'approximation ASA est très précise pour les structures compactes du type cubique faces centrées ou hexagonale compacte. Contrairement à l'approximation ASA la méthode FP-LMTO (Full Potential-LMTO) tient compte de la non-sphéricité du potentiel et de la densité électronique [10-11]. Les sphères MT ne se recouvrent plus, l'espace est donc divisé en sphères entourant les atomes et en une zone interstitielle entourant ces sphères. Les fonctions d'ondes sont représentées différemment dans les deux types de régions.

3. Résultats et discussions

3.1 Propriétés structurales

Cette première partie consiste une étape importante pour développer les calculs qui suivent puisqu'elle consiste à déterminer le paramètre de réseau a_0 et le calcul des autres propriétés tels que le module de compressibilité B et sa dérivée B' , en dépend. Nous avons calculé l'énergie totale pour différentes valeurs de volume prises au voisinage des volumes expérimentaux. Les paramètres à l'équilibre sont obtenus en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction du volume. Dans ce travail, juste deux structure ont été investiguées : la structure zinc blende (B3) et la structure NaCl (B1).

L'alliage est formé pour des fractions molaires de scandium (x) allant de 0 à 1 avec un pas de 0.25. Nous avons tracé la courbe de l'énergie totale en fonction du volume de la cellule élémentaire.

Dans les figures 1,2 et 3, nous montrons les courbes de minimisation à partir desquelles nous avons déduit les paramètres structuraux regroupés dans le tableau 1 et tableau 2. Afin de valider nos résultats, nous avons associé d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

D'après la figure 1, il est évident que le nitrure de gallium GaN ($x=0$) est stable dans la phase B3. Ce résultat est en bon accord avec les résultats trouvés dans la littérature [17] [18][26]. GaN peut passer vers la phase B1 sous une pression de $P=42.98$ GPa [17] et 42.1 GPa [21] .

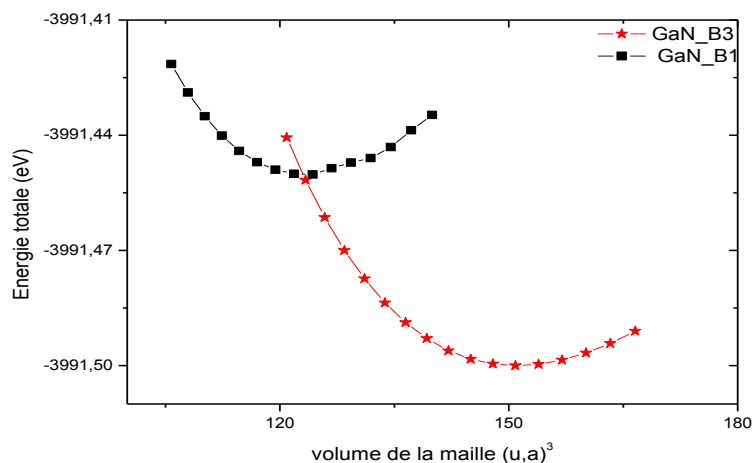


Figure 1- Energie totale en fonction du volume de GaN dans les deux phases zinc blende et NaCl.

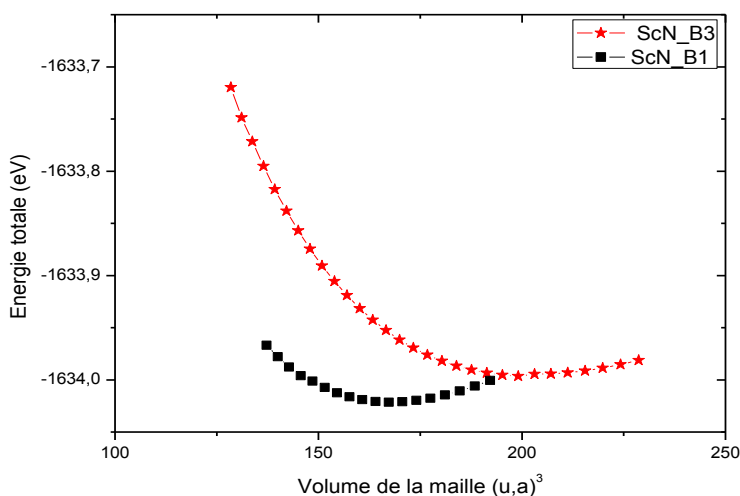


Figure 2- Energie totale en fonction du volume de ScN dans les deux phases zinc blende et NaCl.

Alors que la figure 2 montre que le nitrure de scandium ScN ($x=1$) est stable dans la phase B1 et ce résultat aussi coïncide aussi avec ceux trouvés dans la littérature [17][19][37].

D'après les figure 3, pour la fraction molaire de scandium 25%, nous avons trouvé que l'alliage $\text{Sc}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ est stable la phase B3 alors que pour les concentrations de scandium de 50% et 75 %, la structure B1 est favorable. Ces résultats sont en accord avec ceux de Zerroug et al[17].

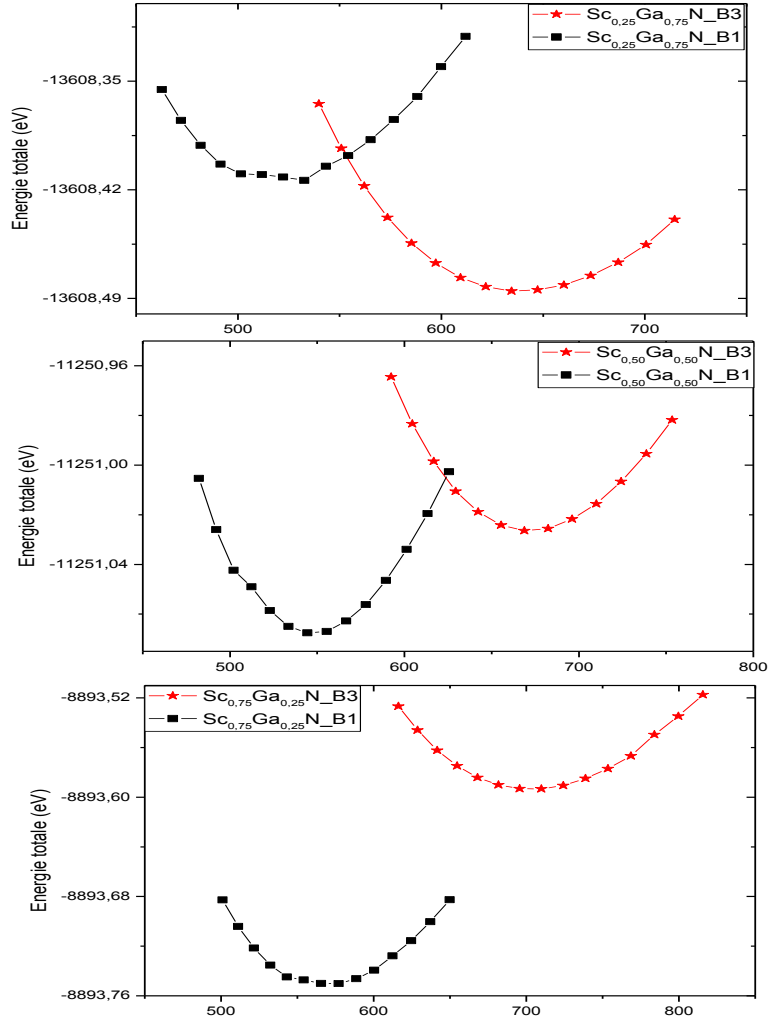


Figure 3- Energie totale des alliages $\text{Sc}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ en fonction du volume dans les phases zinc blende et NaCl.

		Notre travail	Théorie	expérience
a_0 (Å)	GaN(B1)	4.17	4.1657 ^[22] , 4.27 ^[17] , 4.225 ^[21] , 4.18 ^[26] , 3.01 ^[54]	4.234 ^[55]
	GaN B3)	4.47	4.4105 ^[22] , 4.55 ^[17] , 4.497 ^[21] , 4.46 ^[46] , 4.475 ^[45] , 4.590 ^[43]	4.531 ^[22] (zb), 4.50 ^[48]
	ScN (B1)	4.63	4.4748 ^[22] , 4.54 ^[17] , 4.54 ^[19] , 4.651 ^[37] , 3.21 ^[54]	4.501 ^[29] , 4.5047 ^[44]
	ScN (B3)	4.92	4.8231 ^[22] , 4.91 ^[17] , 4.88 ^[19] , 4.939 ^[37]	
B_0 (GP a)	GaN(B1)	250.96	240 ^[24] , 243 ^[49] , 198 ^[54]	248 ^[55]
	GaN(B3)	196.97	196 ^[24] , 187 ^[46] , 205.38 ^[45] , 191 ^[43] , 184 ^[26]	185 ^[47]
	ScN (B1)	210.21	201 ^[19] , 210.364 ^[37] , 201 ^[54]	(182±40) ^[29]
	ScN (B3)	159.31	153 ^[19] , 145.195 ^[37]	
B'	GaN(B1)	4.57	4.81 ^[17] , 4.5 ^[21]	5.5 ^[55]
	GaN(B3)	4.00	4.53 ^[17] , 4.2 ^[21] , 4.14 ^[43] (LDA), 4.25 ^[43] (GGA)	
	ScN (B1)	3.31	3.71 ^[17] , 3.31 ^[19] , 3.1225 ^[37]	
	ScN (B3)	3.10	3.47 ^[17] , 3.34 ^[19] , 3.433 ^[37] (FP-LMTO.LDA)	

Tableau 1- Paramètres structuraux de GaN, ScN dans les phases phases zinc blende (B3) et NaCl (B1) (a_0 est le paramètre du réseau à l'équilibre, B_0 est module de compressibilité à l'équilibre et B' sa dérivée par rapport à la pression).

		Notre travail	Théorie
a_0 (Å)	$Sc_{0.25}Ga_{0.75}N(B1)$	4.49	4.2601 ^[22] , 4.36 ^[17] , 3.07 ^[54]
	$Sc_{0.25}Ga_{0.75}N(B3)$	4.57	4.5458 ^[22] , 4.66 ^[17]
	$Sc_{0.50}Ga_{0.50}N(B1)$	4.53	4.3486 ^[22] , 4.42 ^[17] , 3.13 ^[54]
	$Sc_{0.50}Ga_{0.50}N(B3)$	4.78	4.6573 ^[22] , 4.75 ^[17]
	$Sc_{0.75}Ga_{0.25}N(B1)$	4.57	4.4042 ^[22] , 4.48 ^[17] , 3.16 ^[54]
	$Sc_{0.75}Ga_{0.25}N(B3)$	4.88	4.75072 ^[22] , 4.83 ^[17]
B_0 (GPa)	$Sc_{0.25}Ga_{0.75}N(B1)$	221.39	189 ^[17] , 197 ^[54]
	$Sc_{0.25}Ga_{0.75}N(B3)$	177.41	150 ^[17]
	$Sc_{0.50}Ga_{0.50}N(B1)$	199.47	183 ^[17] , 178 ^[54]
	$Sc_{0.50}Ga_{0.50}N(B3)$	158.43	147 ^[17]
	$Sc_{0.75}Ga_{0.25}N(B1)$	209.92	185 ^[17] , 186 ^[54]
	$Sc_{0.75}Ga_{0.25}N(B3)$	153.72	142 ^[17]
B'	$Sc_{0.25}Ga_{0.75}N(B1)$	4.47	4.32 ^[17]
	$Sc_{0.25}Ga_{0.75}N(B3)$	3.55	4.14 ^[17]
	$Sc_{0.50}Ga_{0.50}N(B1)$	2.97	4.17 ^[17]
	$Sc_{0.50}Ga_{0.50}N(B3)$	3.87	3.61 ^[17]
	$Sc_{0.75}Ga_{0.25}N(B1)$	4.33	3.99 ^[17]
	$Sc_{0.75}Ga_{0.25}N(B3)$	3.14	3.40 ^[17]

Tableau 2- Paramètres structuraux de $Sc_xGa_{1-x}N$ dans les phases zinc blende (B3) et NaCl (B1) (a_0 est le paramètre du réseau à l'équilibre, B_0 est module de compressibilité à l'équilibre et B' sa dérivée par rapport à la pression).

Les valeurs trouvées dans la littérature sont indiquées.

^[17] FP-LAPW.GGA., ^[19] FP-LAPW.GGA, ^[22] ASA.FP-LAMTO.LDA, ^[24] LDA, ^[37] FP-LMTO. LDA, ^[43] (PPPW. LDA/GGA), ^[45] FP-LAPW, ^[46] (PWPP : plane wave pseudo-potential), ^[49] (FP-LMTO. LDA).

En confrontant nos résultats à ceux de la littérature, nous voyons bien, en général, qu'il y a une assez bonne concordance. Notre calcul des paramètres a_0 et B_0 de GaN (B3) concorde bien avec la référence [21]. Pour le GaN(B1), notre résultat montre un bon accord avec celui de la référence [22] malgré la différence de la méthode de calcul (ASA.FP-LAMTO.LDA). Pour ScN (B1 et B3), un bon accord est noté avec d'autres résultats les résultats [37].

Cependant, pour $Sc_xGa_{1-x}N$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$), nous avons obtenu des résultats légèrement différentes de ceux de la littérature [54].

3.2 Propriété électroniques

La théorie de bandes d'énergie des solides est une approche qui permet l'étude des propriétés électroniques des structures périodiques, ce qui permet la classification de tous les cristaux en matériaux, semi-conducteurs et isolants suivant le degré de remplissage de bande d'énergie dans leur état fondamental.

Les propriétés électroniques des semi-conducteurs peuvent être déduites à partir de leur structure de bandes dont la largeur du gap caractérise le niveau de conduction. Durant des décennies, des efforts ont été concentrés sur la détermination précise (théorique et expérimentale) des structures de bandes des matériaux, le calcul de la structure de bandes d'énergie d'un semi-conducteur donné, représente un problème des plus ardu. Cela est dû à l'absence d'une expression analytique de l'énergie potentielle.

Dans cette partie, on présente les diagrammes des structures des bandes d'énergies et les densités d'états totales et partielles calculés pour nos composés.

Les diagrammes de la structure des bandes montrent comment les énergies électroniques dépendent du vecteur d'onde $\vec{k}$, selon des points de haute symétrie dans la première zone de Brillouin.

3.2.1 Calcul des propriétés électroniques

3.2.1.1 Le GaN :

La figure 4 montre que le composé GaN a un gap indirect dans sa phase NaCl (B1) ($E_g=0.7$ eV) car le maximum de la bande de valence au point entre K et Γ et le minimum de la bande de conduction au point X de la première zone de Brillouin.

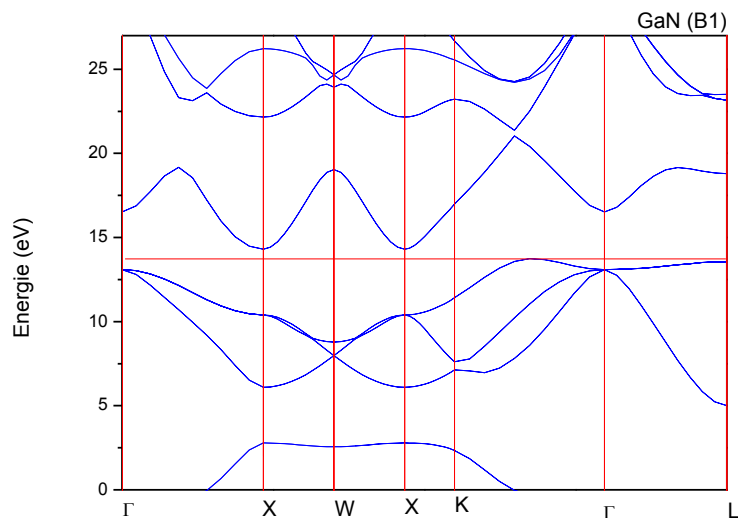


Figure 4- structures des bandes de GaN dans la phase NaCl (B1).

GaN	E_g (eV)	
	Zinc de blende (B3)	NaCl (B1)
Nos résultats	2.27 (direct)	0.7 (indirect)
Résultats théoriques	3.3 ^[25]	1 ^[26] (indirect)
Résultats expérimentaux	3.299 ^[48] (direct)	

Tableau 3- La largeur de la bande interdite (E_g) de GaN dans les phases B1 et B3.

^[25](nonlinear least-squares method).

Les valeurs obtenues sont inférieures à celles calculées ou mesurées par les autres travaux, car la méthode que nous avons utilisé (la LDA) sousstime la valeur du gap.

La figure 5 montre les DOS partielles et totales de GaN (B1). La bande de valence est divisée en deux régions :

- Une faible région entre 6.82 eV et 8.73 eV résultante de la contribution de toutes les orbitales de Ga et N.
- Une forte région entre 8.73 et 13.98, dominée par 2p (N).

La bande de conduction commence à partir de 14.76 eV, due à la contribution des orbitales 4s (Ga), 4p (Ga), 2s(N) et 2p (N).

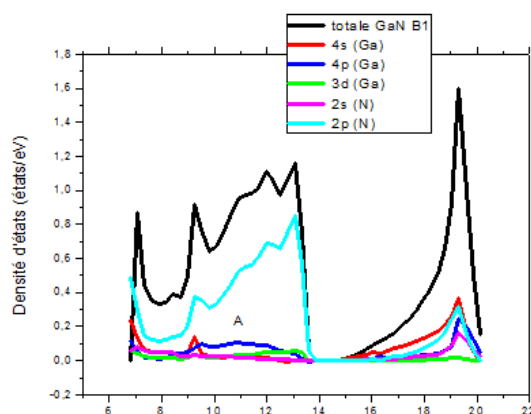


Figure 5- Densité d'états totale et partielle de GaN dans la phase NaCl (B1)

La figure III.18 montre les DOS partielles et totale de GaN (B3). La bande de valence est divisée en deux régions :

- La région entre 9.4 eV et 11.4 eV résultante de la contribution de toutes les orbitales de Ga et N.
- La région entre 11.4 et $E_f=15.83$ eV dominée principalement par 2p (N) et on note un faible apport de 4p (Ga) et 3d (Ga).

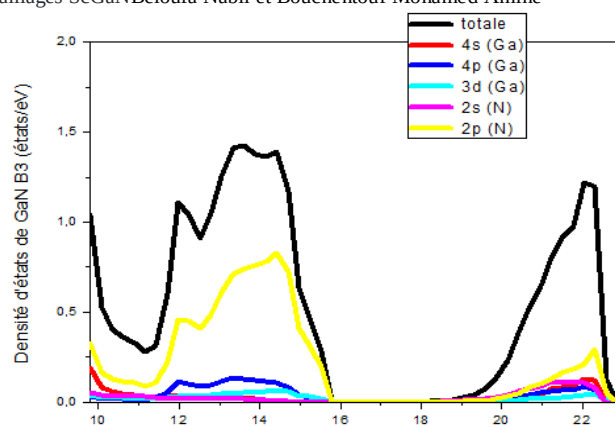


Figure 6- Densité d'états totale et partielle de GaN (B3)

3.2.1.2 Le ScN

Les structures de bandes de ScN (dans les deux phases B1 et B3) sont représentées dans les figures 7 et III.8.

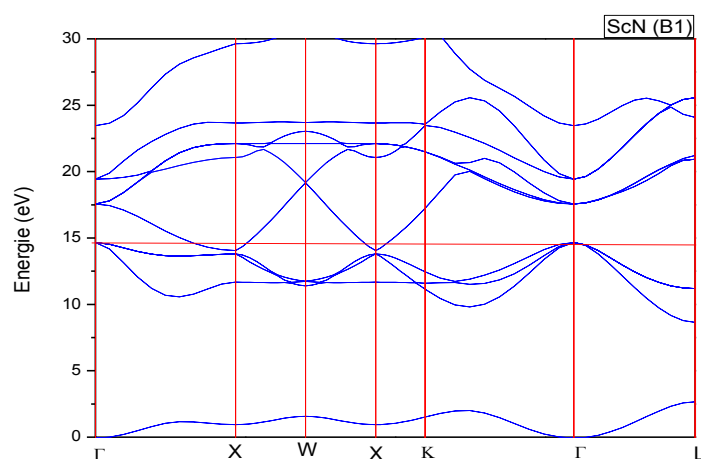


Figure 7- structure de bandes de ScN dans la phasesNaCl (B1).

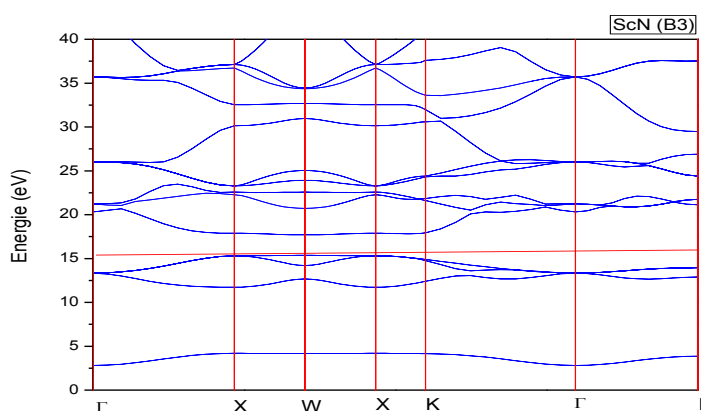


Figure 8- structure de bandes de ScN dans la phase zinc de blende (B3).

La figure 7 montre que le composé ScN dans la structure NaCl, est un semi-métal, alors que d'autres travaux [27,42] ont montré que ScN est un semiconducteur avec un gap indirect. Cela est probablement dû à l'approximation utilisée

dans nos calculs. Cependant, nous avons trouvé un gap indirect $E_X^W = 2.36$ eV dans la structure zinc de blende. Nous présentons ces résultats dans le tableau 4

ScN	La largeur de la bande interdite (eV)	
	Zinc de blende (B3)	NaCl (B1)
Nos résultats	2.44 (indirect)	« -1 » (indirect)
résultatsthéoriques	2.4 ^[19] , 2.36 ^[37]	0.89 ^[25] , 0.9 ^[27] , 1.58 ^[42]
résultatsexpérimentaux		1.34 ^[29]

Tableau 4- La largeur de la bande interdite (E_g) de ScN dans les phases B1 et B3.

La figure 9 montre les DOS partiels et total de ScN (B1). La bande de valence est divisée en deux régions :

- La 1^{ère} région entre 7.48 eV et 8.17 eV est due à la contribution de toutes les orbitales de Ga et N.
 - La 2^{ème} région entre 8.83 eV et 14.5 eV est dominée principalement par 2p (N) suivie par 3d-Sc et 4p-Ga.
- La bande de conduction commence à partir de 15.5 eV, elle est dominée par 3d-Sc.

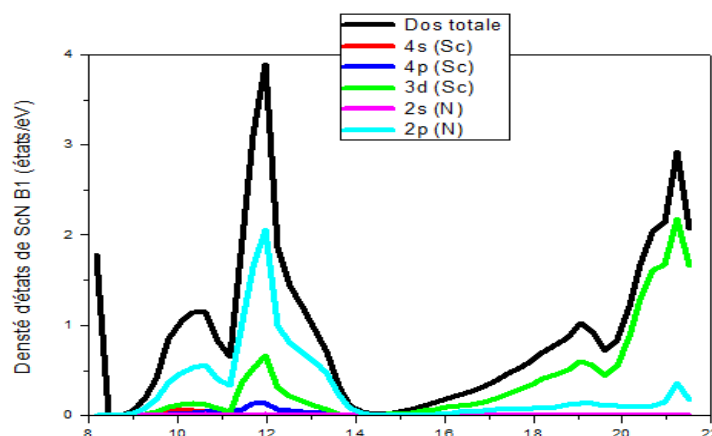


Figure 9- Densité d'états totale et partielle de ScN (B1)

Ces résultats concordent bien avec ceux des références [39-41] puisque d'après ces références ; dans la phase NaCl (B1), l'orbitale p de l'azote joue un rôle important au dessous du niveau de Fermi avec une forte combinaison avec l'orbitale d du scandium. Cependant et loin du niveau de Fermi, c'est l'orbitale d du scandium qui domine.

La figure 10 montre les DOS partielles et totale de ScN (B3). Nous notons la présence d'une partie située en haut de la BV, dominée par les états 2p-N suivies les états 3d-Sc.

Loin du commencement de BC (17.63 eV), c'est les états 3d-Sc qui dominant suivies par les états 2p-N.

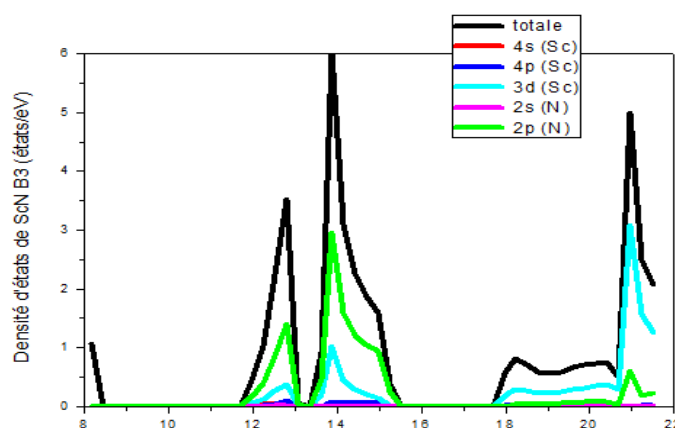


Figure 10- Densité d'états totale et partielle de ScN(B3)

3.2.1.3 Les alliages $\text{Sc}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

La figure 11 montre les structures de bandes des alliages $\text{Sc}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (x : 0.25, 0.50, 0.75) dans les deux phases B1 et B3.

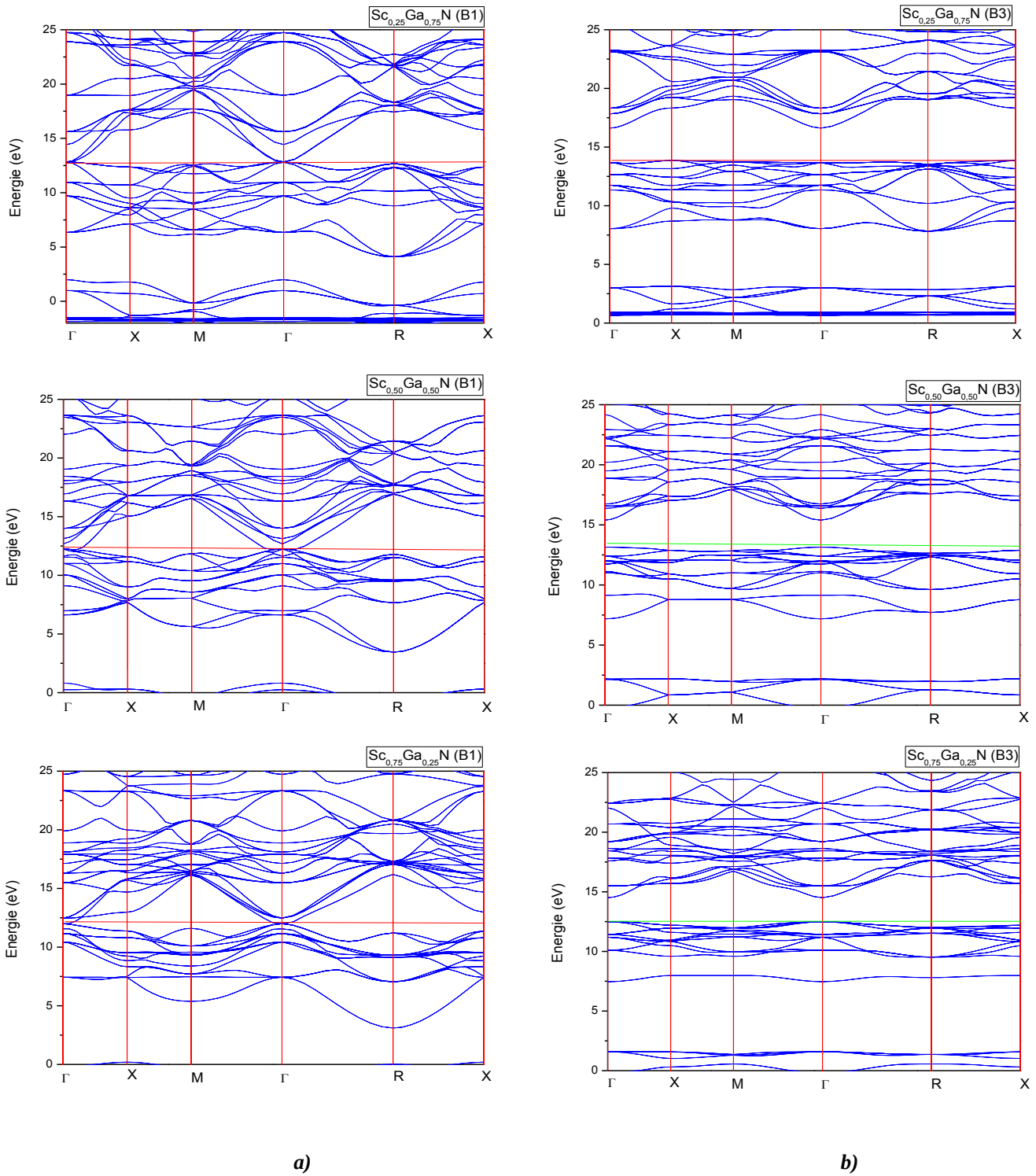


Figure 11- structures des bandes des alliages $Sc_{0.25}Ga_{0.75}N$, $Sc_{0.50}Ga_{0.50}N$, $Sc_{0.75}Ga_{0.25}N$ dans la phase :a) (B1) et b)(B3)

Dans la phase B1, il est bien évident que les alliages $Sc_{0.25}Ga_{0.75}N$, $Sc_{0.50}Ga_{0.50}N$ et $Sc_{0.75}Ga_{0.25}N$ sont des semimétaux (chevauchement de bande de valence et bande de conduction). Alors que dans la phase B3, les alliages $Sc_{0.50}Ga_{0.50}N$, $Sc_{0.75}Ga_{0.25}N$ présentent un gap direct au point Γ au contraire de l'alliage $Sc_{0.25}Ga_{0.75}N$ qui un gap indirect. Les valeurs des ces gap ainsi que leur nature sont présentées dans le tableau 5.

	Sc _{0.25} Ga _{0.75} N (B3)		Sc _{0.50} Ga _{0.50} N (B3)		Sc _{0.75} Ga _{0.25} N (B3)	
	E _g (eV)	Nature du gap	E _g (eV)	Nature du gap	E _g (eV)	Nature du gap
Notre résultat	3.1	direct	2.5	direct	2.07	direct
Autresrésultatsthéoriques			2.225 ^[20]	direct		
Autresrésultatsexpérimentaux	2.0-3.5 ^[30] ,					

Tableau 5- Largeur de la bande interdite des alliages Sc_{0.25}Ga_{0.75}N, Sc_{0.50}Ga_{0.50}N et Sc_{0.75}Ga_{0.25}N dans la phase zinc blende (B3).

Concernant la valeur calculée du gap, en comparant nos résultats regroupés dans le tableau 5, avec ceux révélés par la courbe donnant la variation du gap mesuré des alliages Sc_xGa_{1-x}N pour différentes concentrations de scandium allant de 0 à 100% de la figure 12, nous constatons qu'il y a assez bonne concordance.

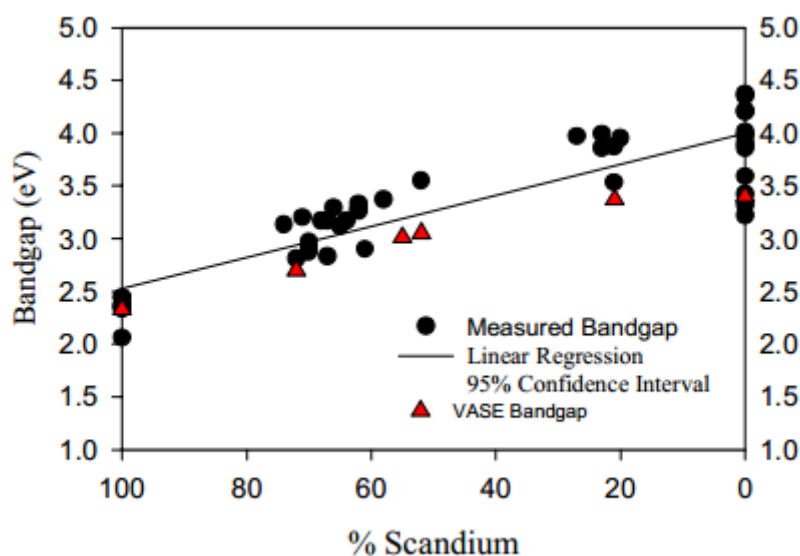


Figure 12- variation du gap expérimental de Sc_xGa_{1-x}N en fonction de x la concentration du scandium [30]

La valeur trouvée pour $x = 0.25$; $E_g = 3.1$ eV est bien confirmée par la courbe expérimentale de la figure 13, donnant la variation de l'énergie du gap des échantillons Sc_xGa_{1-x}N élaborés avec différentes techniques et ceci pour $0 \leq x \leq 0.26$.

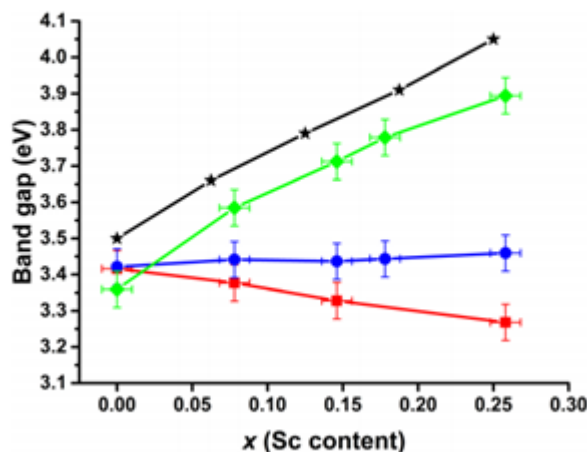


Figure 13- variation de gap en fonction de Sc pour Sc_xGa_{1-x}N (0 < x < 0.26) élaborés par différentes techniques de croissance. Les carrés : Sc_xGa_{1-x}N sur GaN MBE, Les cercles : Sc_xGa_{1-x}N sur GaN MOVPE [31].

La figure 14 montre les DOS partielles et totale de $\text{Sc}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ (B3). La bande de valence est divisée par deux régions :

- Une très faible région entre 6.76 eV et 7.12 eV.
- Une deuxième région forte entre 7.8 eV et 13.88 eV, dominée par 2p (N) et 3d (Sc).

La bande de conduction commence à partir de 17 eV dominée par 3d (Sc)

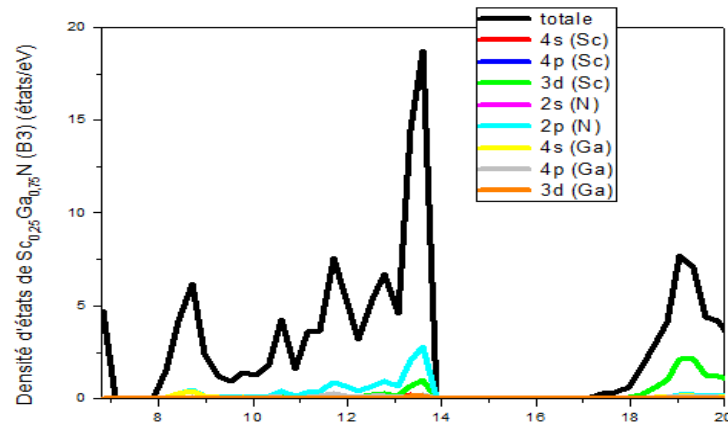


Figure 14- Densité d'états totale et partielle de $\text{Sc}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{N}$ dans la phase zinc blende (B3).

La figure 15 montre les DOS partielles et totale de $\text{Sc}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ (B3). La bande de valence est deux régions :

- Une première région entre 7.3 eV et 8.2 eV dominée par 4s (Ga) et petites contributions de 2p (N) et 3d (Sc).
- Une deuxième région entre 9.5 eV et 12.5 eV dominée par 2p(N) et 3d (Sc).

La bande de conduction commence à partir de 14.7 eV dominée par 3d(Sc).

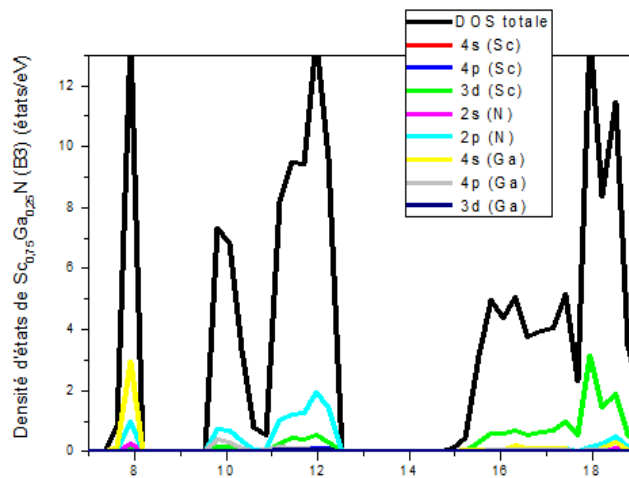


Figure 15-Densité d'états totale et partielle de $\text{Sc}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ dans la phase zinc blende (B3)

3.3 Propriétés optiques

La figure 16 montre les courbes de la partie imaginaire (ϵ_2) de la fonction diélectrique des semi conducteurs GaN, ScN, $\text{Sc}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$, $\text{Sc}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{N}$, $\text{Sc}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ dans la phase B3.

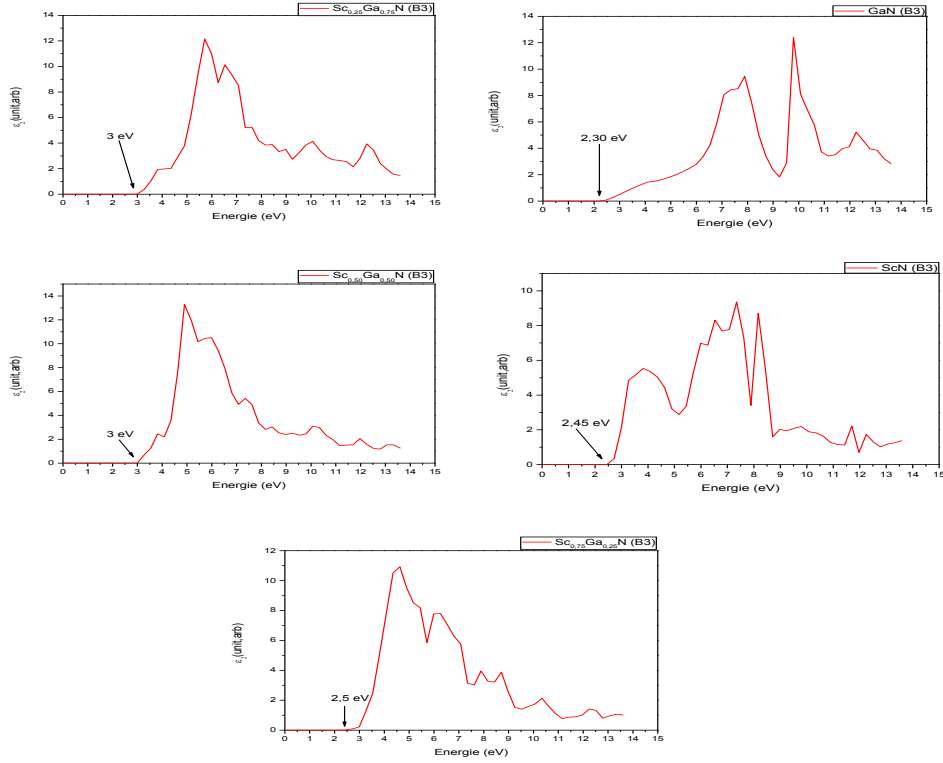


Figure 16- la partie imaginaire (ϵ_2) de la fonction diélectrique des semi-conducteurs GaN, ScN, $Sc_{0.25}Ga_{0.75}N$, $Sc_{0.50}Ga_{0.50}N$, $Sc_{0.75}Ga_{0.25}N$ dans la phase B3.

Nous avons calculé la fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$. Cette dernière est une fonction complexe qui s'écrit sous la forme [50] :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (4)$$

Pour caractériser les propriétés optiques, il suffit de calculer la partie imaginaire $\epsilon_2(\omega)$ de la fonction diélectrique.

On a :

$$\epsilon^{xx}(\omega) = \epsilon^{yy}(\omega) = \epsilon^{zz}(\omega) = \epsilon_2(\omega) \quad (5)$$

$\epsilon^{xx}(\omega)$, $\epsilon^{yy}(\omega)$ et $\epsilon^{zz}(\omega)$: sont les éléments diagonaux de la matrice diélectrique $\epsilon^{ij}(\omega)$, $\epsilon_2(\omega)$ est donnée par [51] :

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{8}{3\pi\omega^2} \sum_{nn} \int |P_{nn}(k)|^2 \frac{dS_k}{\nabla\omega_{nn}(k)} \quad (6)$$

$P_{nn}(k)$: sont les éléments de la matrice dipolaire entre un état initial $|nk\rangle$ et l'état final $|\dot{n}k\rangle$, leurs énergies propre sont $E_n(k)$ et $E_{\dot{n}}(k)$ respectivement.

$$\omega_{nn}(k) = E_n(k) - E_{\dot{n}}(k) \quad (7)$$

$S(k)$ est une surface équi-énergétique exprimée par :

$$S_k = \{K, \omega_{nn}(k) = \omega\}$$

La partie réelle de la fonction $\epsilon(\omega)$ peut être dérivée de la partie imaginaire en utilisant les relations de Kramers-Kronig[52,53] :

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \quad (8)$$

P : représente la valeur principale

La figure 16 montre la fonction diélectrique $\epsilon_2(\omega)$ des semi-conducteurs GaN, ScN, $Sc_{0.25}Ga_{0.75}N$, $Sc_{0.50}Ga_{0.50}N$ et $Sc_{0.75}Ga_{0.25}N$ (dans la phase B3) calculée en utilisant l'approximation LDA.

L'analyse de la courbe $\epsilon_2(\omega)$ montre que l'absorption commence aux énergies : 2.30 eV et 2.45 eV pour les composés GaN (similaire à la référence [37]) et ScN respectivement. Par identification avec la structure de bande, ces énergies correspondent au gap optique direct au point Γ pour GaN et au point X pour ScN.

Le maximum de l'absorption est situé à 9.8 eV et 7.3 eV pour GaN et ScN respectivement. Ces absorptions sont dues aux transitions ($W \rightarrow W$) et ($\Gamma \rightarrow \Gamma$).

Concernant les composés $\text{Sc}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$, $\text{Sc}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{N}$ et $\text{Sc}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$, l'analyse du spectre de $\varepsilon_2(\omega)$ montre que le premier point optique critique de la fonction diélectrique se situe aux énergies 3eV, 3eV et 2.5 eV pour ces composés respectivement. Il représente le seuil des transitions optiques entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction, c'est le début de l'absorption.

4. Conclusion

Dans le cadre de cette thèse, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et optiques des l'alliages $\text{Sc}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pour des concentration de x : 0,0.25, 0.50, 0.75 et 1.0, en utilisant un calcul ab initio du premier principe basé sur la méthode LMTO-APW couplé avec l'approximation de la densité locale. Nous avons effectué les calculs aussi bien dans la structure zinc blende que dans la structure rocksalt. Les travaux théoriques et expérimentaux ont montré que ces deux structures peuvent constituer les phases d'équilibre de GaN et de ScN respectivement.

Nous avons fait la variation de l'énergie totale de chaque composé en fonctions du volume de la maille élémentaire dans les deux structures NaCl (B1) et zinc de blende (B3) pour mettre en évidence la phase la plus stable. Nous avons confirmé que pour GaN et ScN ; la phase la plus stable est B3 et B1 respectivement alors que l'alliage $\text{Sc}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ a présenté la B3 et $\text{Sc}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{N}$ et $\text{Sc}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$, ont présenté la B1, comme phase à l'équilibre.

Nous avons pu déterminer le paramètre de réseau à l'équilibre a_0 , le module de compressibilité B ainsi que sa dérivée. Ces résultats ont un intérêt important pour concevoir des dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes, les diodes lasers... Nous avons trouvé parfois un désaccord avec d'autres résultats émanant de la littérature, et cela revient à la diversité des méthodes de calcul.

D'autre part, nous trouvons que ScN (B1) est un semiconducteur à gap indirect avec un maximum de bande de valence situé au point Γ et un minimum de bande de conduction au point X alors que GaN (B3) est un semiconducteur à gap direct au point Γ . L'alliage $\text{Sc}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ a présenté un gap indirect identique à celui de ScN alors que deux autres alliages ($\text{Sc}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{N}$ et $\text{Sc}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$) ont présenté tous les deux, un gap direct au point Γ identique à celui de GaN.

La décroissance de la valeur du gap avec l'augmentation de la concentration du scandium dans l'alliage étudié est plus ou moins confirmée.

Par conséquent, les $\text{Sc}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ s'avèrent prometteurs à des fins technologiques, toutefois, il nous reste beaucoup de points à comprendre concernant leurs propriétés. Enfin, nous espérons que cette étude va modestement contribuer à la compréhension du comportement électronique de ces matériaux.

REFERENCES

- [1]- H. Morkoc, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns, J. Appl. (1994) Phys.76, 1363.
- [2]- B.Monemar, P.P. Paskov, A. Kasic. (2005).Superlattices and Microstructures 38, 38
- [3]- E. Monroy et al., J. Appl. (2003).Phys. 94(5), 3121
- [4]- S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, Y. Sugimoto, and H. Kiyoku,Appl. (1997).Phys. Lett.70, 1417
- [5]- J. W. Orton and C. T. Foxton, Rep. Prog. Phys.61, 1
- [6]- S. Nakamura, (1998).Group III Nitride Semiconductor Compounds. Physics and Applications, edited by B. Gil (Clarendon Press, Oxford, 1998), p. 391.
- [7]- V. Ranjan, L. Bellaiche, and E. J. Walter, (2003).Phys. Rev. Lett. 90, 257602
- [8]- M.E. Little, M.E. Kordes, (2001). Appl. Phys. Lett. 78, 2891 .
- [9]- Andersen O.K, C. Arcangeli, R.W. Tank, T. Saha-Dasgupta, G. Krier, O.Jepsen, Dasgupta, (1998).in tight bending approach to computational Materials science, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 491
- [10]- Andersen O. K, 1984. The Electronic of structure of Complex Systems . Plenum, New York,
- [11]- Savrasov S. Y, Phys. (1996) Rev. B 54 16470.
- [12]- P. Hohenberg and W. Kohn, (1964) Phys. Rev. B 136 864.
- [13]- W. Kohn and L. J. Sham, (1965) Phys. Rev. 140 A1133.
- [14]- <http://mindlab.physics.ucdavis.edu/>.
- [15]- J.P. Perdew and Y. Wang, (1992) Phys. Rev. B 45 13244.
- [16]- U. S. Sharma, P. S. Bisht and U. P. Verma, J. Phys. (2009) Cond. Matt.21 025501.
- [17]- Zerroug, Ali Sahraoui, and Bouarissa. J. (2008).Appl. Phys.103, 063510 .
- [18]- H. Achour et al(2014). PhysicsProcedia 55 17 – 23.
- [19]- N. Takeuchi, (2002).Phys.Rev.B65, 045204 .
- [20]- L. Boudaoud et al. (2010) / Superlattices and Microstructures 47 361368.

- [21]- J. Serrano, A. Rubio, E. Hernandez, A. Muñoz, and A. Mujica 2000, Phys. Rev. B 62, 16612.
- [22]- C. Powell, N.-E. Lee, Y.-W. Kim, and J. E. Greene, J. (1993). Appl. Phys. 73, 189 .
- [23]- W. Saslow, T. K. Bergstresser and M. L. Cohen, (1966). Phys. Rev. Lett. 16, 354
- [24]- E. O. Kane, (1966). Phys. Rev. 146, 558 .
- [25]- B. Saha, J. Acharya, T. D. Sands, U. V. Waghmare. J. (2010). Appl. Phys. 107, 033715 .
- [26]- I. Gorczyca, N. E. Christensen. 15 august 1994. physical review B, volume 50, number 7.
- [27]- W. R. L. Lambrecht, (2000). Phys. Rev. B 62, 13 538 .
- [28]- D. Gall, I. Petrov, L. D. Madsen, J.-E. Sundgren, J. E. Greene, J. Vac. Sci. Technol. (1998) A16 2411.
- [29]- D. Gall, I. Petrov, N. Hellgren, L. Hultman, J. E. Sundgren, and J. E. (1998). Greene, Journal of Applied Physics 84, 6034
- [30]- M. E. Little, M. E. Kordesch, (2001). Appl. Phys. Lett. 78, 2891 .
- [31]- H. C. L. Tsui, L. E. Goff, S. K. Rhode, S. Pereira, H. E. Beere, I. Farrer, C. A. Nicoll, D. A. Ritchie, and M. A. Moram. (2015). Applied Physics Letters 106, 132103 .
- [32]- J. P. Dismukes and T. D. Moustakas, (1996). Proceedings of the III-V Nitride Materials and Processes Symposium, ECS, 96-11, 111
- [33]- X. Bai, (2000). Growth and Characterization of III-B-nitride Semiconductors and Devices, Ph.D. Dissertation, Physics Department, Ohio University, Athens, USA
- [34]- C. Constantin, M. B. Haider, D. Ingram, A. R. Smith, N. Sandler, K. Sun, and P. Ordejon, J. (2005). Appl. Phys. 98, 123501
- [35]- S. Zhang, D. Holec, W. Y. Fu, C. J. Humphreys, and M. A. Moram, J. (2013). Appl. Phys. 114, 133510 .
- [36]- D. Gall, M. Stadelé, K. Jarrendahl, I. Petrov, P. Desjardins, R. T. Haasch, T.-Y. Lee, and J. E. Greene, (2001). Phys. Rev. B 63, 125119.
- [37]- A. Tebboune, D. Rached, A. Benzair, N. Sekkal and A. H. Belbachir. (2006). phys. stat. sol. (b) 243, No. 12 .
- [38]- Arthur R. Smith, Hamad A. H. AL-Britthen, and David C. Ingram. J. 15 August 2001. Appl. Phys., Vol. 90, No. 4, [39] R. Monnier, J. Rhyner, T. M. Rice, and D. D. Koelling, (1985). Phys. Rev. B 31, 5554
- [40]- T. Eibler, M. Dorrer, and A. Neckel, (1983). Theor. Chim. Acta 63, 133
- [41]- G. Travaglini, F. Marabelli, R. Monnier, E. Kaldis, and P. Wachter, (1986). Phys. Rev. B 34, 3876.
- [42]- C. Stampfl, R. Asahi and A. J. Freeman. (2002). Phys. rev B, volume 65, 161204 .
- [43]- C. Stampfl and C. G. Van de Walle. (1999). phys rev B, volume 59, number 8 (PPPW. LDA)
- [44]- M. A. Moram, T. B. Joyce, P. R. Chalker, Z. H. Barber, and C. J. Humphreys, J. (2006). Appl. Phys. 100, 023514 .
- [45]- S. Berrah, H. Abid, A. Boukourt, M. Sehil. (2006). Turk J Phys 30 .
- [46]- F. Alan Wright and J. S. Nelson. 15 July 1994. phys rev B. volume 50, number 4.
- [47]- M. E. Sherwin and T. J. Drummond. J. 15 June 1991 Appl. Phys. 69, 8423.
- [48]- I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan 1 June 2001. journal of applied physics. volume 89, number 11, page 5835.
- [49]- S. Limpijumnong, W. R. L. Lambrecht. 2001 phys rev B 63 104103.
- [50]- M. Fox, (2001). Optical properties of Solids, New York, Oxford University Press .
- [51]- M. A. Khan, A. Kasphyop, A. K. Solanki, T. Nautiyal, and S. auluck, (1993). Phys. Rev. B 23, 16974 .
- [52]- J. S. Tell, Phys. Rev. 104 (1956).
- [53]- R. De. L. Kronig, J. Opt. Soc. (1926). Am. J. 12, 547, 1760.