

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE
SAIDA

FACULTE DES

SCIENCES



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : **Physique des Rayonnements**

Par : **GHAOUTI TORKIA**

Sur le thème

**Etude de l'effet de dopage de vanadium dans les semi conducteurs phosphure
de galium GaP**

Soutenu le.../08/2020 devant le jury composé de :

Boutaleb Habib	Président	M.C.A	U . Saida
Boutaleb Miloud	Rapporteur	M.C.A	U . Saida
Zemouli Mostefa	Examineur	M.C.A	U . Saida
Saadaoui Fatiha	Examineur	M.A.A	U . Saida

Année Universitaire 2019 - 2020

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ
الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي
بَدَأَ خَلْقَ الْإِنسَانِ
مِنْ طِينٍ مِّنْ أَحْسَنِ
تَلْقَى
الْعِزِّ
وَالْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي
بَدَأَ خَلْقَ الْإِنسَانِ
مِنْ طِينٍ مِّنْ أَحْسَنِ
تَلْقَى
الْعِزِّ

Remerciements

Au nom d'Allah le plus grand merci lui revient de nous avoir guidés vers le droit chemin, de nous avoir aidés tout au long de nos années d'étude.

*Nous adressons notre profond remerciement à Monsieur
BOUTALEB MILOUD notre encadreur.*

*Ainsi, Nos sincères remerciements à Monsieur **BOUTALEB
MILOUD** d'avoir accepté de consacrer son temps et
sa patience à nos égards des ses orientations
éclairées et ces commentaires contribué à
l'aboutissement de ce travail.*

*Nos remercions infiniment les enseignants ainsi que
la personnel administratif et pédagogique de Université
Dr Moulay Tahar Saida*

*Nous tenons à gratifier aussi les membres
de jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche
en acceptant d'examiner notre travail.*

*En fin nos remercions tous ceux qui ont contribué
de près ou de loin à l'élaboration de ce travail.*

Ghaouti torkia

Dédicace

Je dédie ce modeste travail

A

A la lumière de ma vie mes chères parents qu'ils ont m'aider beaucoup pour terminer mes «étude, et qui m'ont beaucoup encouragé moralement et psychologiquement, qui sont prié pour moi : Spécialement à

Mon père et Ma mère

GHAOUTI BAGHDAD, BENATIA SETTI

A

Mon oncle BENATIA AEK ET SA FEMME SERHOUANI MESAOUDA

Aucune dédicace ne pourra traduire mon profond amour et gratitude pour l'affection et sacrifices illimités et l'encouragement que vous m'avez offerte.

Je prie ALLAH pour vous jouir de bonne santé toute la vie.

A

Mon fiancé BENATIA LAKHDAR

Mes très chers frères (BOUAZZA, TAHER, NOUR ELDIN, BELABDELI)

ET

Mes très chères sœurs (SAIDA, SIHEM, TORKIA, RACHIDA, FATIMA, SORIA, NAWEL, KELTOUM, et ma nièce MARYAM NOUR SEINE)

Que ce projet soit un témoignage de la profondeur des sentiments d'amour, je prie ALLAH tout puissant de vous protéger et de vous accorder réussite et bonheur.

A

MON ENCADREUR : M. BOUTALEB

A mes grands parents

A

Mes meilleurs amis ISMAHAN, HOUDA DJ, BOUCHRA, BOUCHRA SAMADI, MARIA, FATHA, MOUKHTARIA

Atout la promotion SCIENCE DE LA MATIERE

Et tous mes collègues chacun de son propre nom.

A toute la famille GHAOUTI et BENATIA

GHAOUTI TORKIA

LISTE DES ABREVIATIONS

APW : Méthode des ondes planes augmentées

DFT : Théorie de la fonctionnelle de la densité

DMS : Semi-conducteurs magnétiques dilués

DOS : Densités d'états

FLAPW : Ondes planes augmentées linéarisées a potentiel complet

FM : Ferromagnétique

GGA : Approximation du gradient généralisée

GGA+U : Approximation du gradient généralisée avec la correction del'Hubbardmagnétique

GMR : Magnéto-résistance géante

LAPW : Ondes planes augmentées linéarités

LCAO : Combinaison linéaire d'orbitales atomiques

LMTO: Orbitales muffin-tin linéarisées

MT: Métaux de transition

Mtot: Moment magnétique total

Remerciements	
Dédicaces	
Listes des figures	
Liste des tableaux	
Liste des abréviations	
Introduction général	

CHAPITRE I

Les semi-conducteurs et leurs alliages

I.1. Introduction.....	Error! Bookmark not defined.
I-Différent types de matériaux :	Error! Bookmark not defined.
I-1 Matériaux naturels :	Error! Bookmark not defined.
I-2 Matériaux artificiels :	Error! Bookmark not defined.
I-3 Matériaux synthétiques :	Error! Bookmark not defined.
I-4 Les conducteurs $\rho \leq 10^6 \Omega m$	Error! Bookmark not defined.
I-5 Les isolants :	Error! Bookmark not defined.
I-7 Les différents types des semi-conducteurs :	Error! Bookmark not defined.
I-7-1 Les semi-conducteurs intrinsèques :	Error! Bookmark not defined.
I-7-2 Les semi-conducteurs extrinsèques :	Error! Bookmark not defined.
I-8-2 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P....	Error! Bookmark not defined.
I-9- L'énergie de Gap :	Error! Bookmark not defined.
I-10 Semi-conducteurs par groupe :	Error! Bookmark not defined.
I-10-1 Groupe IV :	Error! Bookmark not defined.
I-10-2 Groupe IIIV :	Error! Bookmark not defined.
I-10-3 Groupe II-IV :	Error! Bookmark not defined.
I-12 L'intérêt des semi-conducteurs de type III-V :	Error! Bookmark not defined.
I-13 Les différents types des semi-conducteurs III-V ...	Error! Bookmark not defined.
I-13-1 Les composés Binaires :	Error! Bookmark not defined.
I-13-2 Les composés Ternaires et Quaternaires :	Error! Bookmark not defined.
I-14 La notion de bande d'énergie dans un semi-conducteur	Error! Bookmark not defined.
I-14-1 Bande interdite (gap énergétique) :	Error! Bookmark not defined.
I-15 Gap direct et gap indirect :	Error! Bookmark not defined.
I-15-1 Les semi-conducteurs à gap direct :	Error! Bookmark not defined.

I-15-2 Les semi-conducteurs à gap indirect :	Error! Bookmark not defined.
I-17 Propriétés électriques :	Error! Bookmark not defined.
I-18 Propriétés structurales :	Error! Bookmark not defined.
Structure cristallin :	Error! Bookmark not defined.
I-18-a Le paramètre de maille (a) :	Error! Bookmark not defined.
Stœchiométrie de la maille ZnS blende	Error! Bookmark not defined.
b) Indices de coordination :	Error! Bookmark not defined.
C) Coordonnées réduites :	Error! Bookmark not defined.
d) positions	Error! Bookmark not defined.
e) résultats :	Error! Bookmark not defined.
I-19 Propriété Structurale de la maille Wurtzite :	Error! Bookmark not defined.
Coordonnées réduites :	Error! Bookmark not defined.
Nombre de motifs :	Error! Bookmark not defined.
Coordination :	Error! Bookmark not defined.
I-20 Le réseau réciproque et la première zone de Brillouin :	Error! Bookmark not defined.
I-21 Les propriétés des deux mailles (ZnS blende et wurtzite)	Error! Bookmark not defined.
I-22 Les avantages des semi-conducteurs III-V :	Error! Bookmark not defined.
1)- Les circuits bas niveau :	Error! Bookmark not defined.
2)- Les circuits de puissance :	Error! Bookmark not defined.
3)- Les circuits numériques :	Error! Bookmark not defined.
I-23 Définition des matériaux étudiés	Error! Bookmark not defined.
I-23-1 Le phosphore :	Error! Bookmark not defined.
I-23-2 Le Gallium :	Error! Bookmark not defined.
I-23-3 Le vanadium :	Error! Bookmark not defined.
I-23-4 Caractéristiques notables :	Error! Bookmark not defined.
I-24 Spintronique	Error! Bookmark not defined.
I-24-1 Les quatre principes de base de la spintronique :	Error! Bookmark not defined.
I-25 Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS)	Error! Bookmark not defined.
Définition	Error! Bookmark not defined.

I-25-1 Les DMS à base des semi-conducteurs III-V :**Error! Bookmark not defined.**

Chapitre II

Méthodes des calculs

II.1.Introduction	33
II.2. Equation de Schrödinger.....	33
II.3.L'approximation de Born-Oppenheimer	34
II.4.La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT).....	35
II.4.1.Théorèmes de Hohenberg et Kohn	35
II.4.2.Equations de Kohn-Sham	36
II.5. Les approximations de la fonctionnelle d'échange et de corrélation	38
II.5.2. L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	38
II.6. Résolution des équations de Kohn-Sham	39
II.7. Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	39
II.8.La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW).....	40
II.8.1. La méthode des ondes planes augmentées (APW).....	40
II.8.2 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW).....	43
II.9. Le code WIEN2k.....	44
II.10.2Diagramme de calcul du code Wien2k.....	46

Chapitre III

Résultats et interprétations

III- Introduction	49
III-1Propriété structurales.....	49
a-Paramètre cristallin.....	50
b-Module de compressibilité	50
III-11-Description des structures.....	50

III-1-1-1 Structure binaire.....	50
III-1-1-2 Structure ternaire.....	51
a-Structure ternaire Ga ₃ VP ₄	51
b-Structure ternaire Ga ₇ VP ₈	52
III-2 Propriétés électroniques.....	54
III-2-1 Densité d'états électroniques	59
III-2-2demi-métallique ferromagnétique HMF	61
III-3 Propriétés magnétiques	62
Bibliographie.....	64
Conclusion générale.....	65
Résumé.....	

Introduction générale

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19^{ème} siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Parmi les plus célèbres, nous trouvons le silicium **Si** et le germanium **Ge** de la colonne IV du tableau périodique. Ces deux semi-conducteurs sont composés d'atomes identiques, mais d'autres, comme l'arséniure de galium **GaAsd** (III-V) sont composés d'atome d'éléments différents : **Ga** (III) et **As**(V). La composition de semi-conducteurs permet d'accéder à des propriétés électroniques et optiques que n'ont pas les semi-conducteurs purs.

Pendant très longtemps les scientifiques croyaient que vis-à-vis de la conduction Électrique, les matériaux se subdivisaient en deux classes : conducteurs et diélectriques (isolants). Cependant, vers 1830 on a découvert des matériaux dont les propriétés ne permettaient de les classer dans aucune de ces catégories.

Avant l'invention du transistor bipolaire en 1947, les semi-conducteurs sont présents dans seulement deux dispositifs électroniques que sont les photodiodes et les redresseurs. dans les années 1950, le germanium et le plus utilisé. Cependant, il ne peut pas être employé dans les applications nécessitant une faible consommation de courant et/ou soumises à de hautes températures. Le silicium, d'un cout moins élevé et permettant des application à faibles consommations, sera très utilisé dès 1960 . Alors il est nécessaire d'introduire la nouvelle notion des semi-conducteurs.

A l'état pur, ces matériaux étaient à la fois de mauvais conducteurs et de mauvais isolants, or leurs propriétés électriques, notamment la résistivité, variaient très sensiblement sous nuance des facteurs extérieurs de l'environnement (température, pression....), de la présence des impuretés, de la lumière,...etc. En occupant une place intermédiaire entre les conducteurs et les isolants ces matériaux ont Les appelés « semi-conducteurs ».

L'étude sur les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) III-V et II-VI a été motivée par l'introduction d'une fraction de métal de transition ceci par substitution avec l'atome cationique dans la structure mère a des concentrations bien données pour ajusté les propriétés structurales et électroniques de ces types des matériaux, Ces derniers associent les propriétés des semi-conducteurs avec le spin de

l'électron pour donner de nouvelles fonctionnalités. Cette élaboration donne au matériau des nouvelles propriétés magnétiques intéressantes, ces propriétés procurent nos matériaux à être des bons candidats pour le domaine de l'électronique de spin.

L'électronique de spin (ou spintronique) est une nouvelle discipline à la frontière entre magnétisme et électronique qui cherche à tirer parti du spin des électrons comme d'un nouveau degré de liberté.

Toutes les méthodes ab-initio utilisent la DFT comme base de calcul plus des méthodes d'approximations comme LDA, GGA, GGA+U et MBJ pour traiter les termes d'échange et de corrélation dans ce type de matériaux.

Dans cette étude, on va utiliser la méthode des ondes planes augmentées et linéarité (FP-LAPW) implémenté sur le code Wien2k pour investiguer les propriétés structurales, électroniques et magnétiques d'une famille bien précise de matériaux magnétiques dilués, Nous tentant à faire des calculs sur les structures des bandes d'énergie, les densités des états électroniques totale et partielles, on utilisons les paramètres structurales optimisés.

C'est dans ce contexte que nous essayons de présenter une étude sur lephosphure de galium GaP et ses ternaires dopés au vanadium $Ga_{1-x}V_xP$ avec $x=0.25$ et 0.125 , Nous introduisons une étude des propriétés structurales, électronique et magnétique de ces deux matériaux, afin de faire une petite comparaison entre la structure binaire non dopée et la structure ternaire dopée, bien sur on découvre les possibilités de la candidature de ce matériau aux applications de stockage de l'information dans le domaine de la spintronique.

Notre thèse présentée dans le cadre de cette étude comporte trois chapitres, une introduction générale et une conclusion générale. Nous commencerons par exposer dans le Chapitre I une étude bibliographique générale et une description du matériau semi-conducteur III-V à base de vanadium.

Le deuxième chapitre est consacré aux différentes méthodes de calcul ou un rappel de la théorie de la fonctionnelle de la densité (density functional theory) DFT, ainsi que le principe de la méthode « FP-LAPW ».

Dans le troisième chapitre, on présente nos résultats avec toutes les interprétations des propriétés structurales (Structure binaire, Structure ternaire), et

Propriétés électroniques (densité d'états et structure de bande), et les propriétés magnétiques du $\text{Ga}_{1-x}\text{V}_x\text{P}$ à les concentrations $X = 25\%$ et 12.5% .

Enfin on termine par une conclusion générale qui englobe toute les acquis De ce travail.

Chapitre I

I.1. Introduction

Les propriétés des matériaux sont souvent les limites de performances des systèmes conçus. La connaissance de ces propriétés s'avère primordiale mais il faut nécessairement savoir que ces propriétés macroscopiques sont très liées aux structures élémentaires de ces matériaux, c.à.d. descendre jusqu'à l'échelle atomique. Le silicium fut découvert en 1824 par J.J. Berzelius à Stockholm, en Suède. C'est, après le carbone, l'élément le plus abondant de la terre, Le germanium est découvert par le savant allemand Clemens Winkler en 1886, il peut être trouvé dans beaucoup d'endroits, mais en concentrations faibles. Actuellement les technologies de circuits intégrés utilisent encore le silicium et le germanium comme matériau semi-conducteur de base de largeur de bande interdite moyenne s'adaptant aux contraintes imposées par les applications à des températures basse progressivement à de plus hautes températures. [1]

En électronique rapide ou optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes (mobilités, transitions indirectes.....), dans de telles applications, d'autres composés semi-conducteurs sont préférables.

I-Différent types de matériaux :

Un matériau c'est une substance d'origine naturelle ou artificielle, les matériaux solides possèdent des structures très compactes et ordonnées. Les particules solides peuvent être organisées en des réseaux d'empilement compact comme la maille hexagonale et la maille cubique.

I-1 Matériaux naturels :

C'est une matière première issue de la nature sans être exposée à aucune intervention industrielle. Il existe trois types de matériaux naturels :

- Les matériaux minéraux.
- Les matériaux organiques d'origine végétale.
- Les matériaux organiques d'origine animale.

I-2 Matériaux artificiels :

Ce sont des matériaux naturels transformés pour l'exploitation et l'utilisation quotidienne comme : le verre, le polystyrène, la laine minérale.

I-3 Matériaux synthétiques :

Ce sont des matériaux fabriqués à partir de matières premières que l'on trouve dans la nature, comme le pétrole. Ces nouveaux matériaux sont créés par des processus chimiques qui les rendent distingués des autres matériaux, on peut citer la synthèse de plastique comme polymère à partir de styrène matière première issue de pétrole.

Les matériaux sont classés selon leurs propriétés physico-chimiques en plusieurs catégories. Le domaine de l'électronique a montré un intérêt majeur aux matériaux possédant des propriétés physiques avancées. Dans ce cas une famille de ces matériaux est caractérisée par la conduction du champ électrique ou par l'absence de cette conductivité, c'est pour cela on fait aménager les matériaux conducteurs, isolants et semi-conducteurs.

I-4 Les conducteurs $\rho \leq 10^6 \Omega m$

Parmi les matériaux conducteurs, on peut citer les métaux, les électrolytes (ou solutions ioniques) et les plasmas. Certains solides non métalliques, tels que le graphite, sont également conducteurs. Ce sont principalement les métaux que nous trouvons dans la catégorie des matériaux conducteurs de l'électricité. Tous les métaux sont à la température ordinaire à l'état solide, excepté le mercure qui est liquide. Ils conduisent généralement bien la chaleur et l'électricité. Ils sont, après polissage, d'un éclat particulier, dit métallique. Les alliages sont des mélanges à l'état liquide de 2 ou plusieurs métaux et présentent des propriétés bien différentes de celles des métaux qui les constituent.

Une partie des électrons possède une énergie suffisante pour se libérer totalement des forces d'interaction avec le réseau. Ces électrons libres sont les électrons de conduction des métaux, leur niveau d'énergie est situé dans la bande de conduction

I-5 Les isolants :

Un matériau isolant est un matériau qui limite les échanges d'énergie entre deux systèmes. Un isolant électrique est appelé matériau diélectrique et interdit le passage du courant entre deux matériaux conducteurs, ce qui signifie que ses électrons ne peuvent pas circuler librement. Sa résistivité se mesure en ohm-mètres ($\Omega \cdot m$) et dépend donc de sa résistance (ohms). Un isolant parfait aurait ainsi en théorie une résistance infinie. Le plastique, le verre, le papier, le bois, la pierre ou le béton sont en général de bons isolants électriques lorsqu'ils sont secs.

On distingue :

- *Les isolants électriques ;
- *Les isolants thermiques ;
- *Les isolants phoniques ;
- *Les isolants mécaniques.

Les matériaux qui ont une résistivité ρ supérieure à $10^8 \Omega \cdot cm$ sont des isolants (matériaux non conducteurs de courant électrique). La conductivité des isolants est donc très faible.

I-6 Les semi -conducteurs :

Les semi-conducteurs sont largement utilisés en électronique pour réaliser des composants tels que des diodes, des transistors, des thyristors, des circuits intégrés ainsi que des lasers à semi-conducteur. Un semi-conducteur, comme le **silicium**, c'est un matériau qui n'est ni tout à fait un conducteur d'électricité, ni tout à fait un isolant. Il peut être soit l'un, soit l'autre selon diverses conditions.

Le caractère conducteur ou isolant prend sa source dans la structure même des atomes : chaque élément du tableau périodique possède un certain nombre d'électrons qui sont agencés autour d'un noyau. C'est cet agencement sous la forme de couches d'électrons, différent selon les éléments, qui est responsable de la conductivité électrique.

Les semi-conducteurs sont des matériaux à conductivité électrique, intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sim 10^6 \Omega \cdot cm^{-1}$) et des isolants ($\sim 10^{-22}$ à $\sim 10^{-14} \Omega \cdot cm^{-1}$)

varient dans une grande proportion sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau). Les semi-conducteurs sont principalement les éléments de la colonne IV du tableau de Classification des éléments (Si, Ge) mais aussi des composés III-V (GaAs, GaN) ou II-VI (ZnS, CdTe)[2].

Tableau I.1 : Conductivité électrique et la résistivité des métaux, des semi-conducteurs et des isolants [3].

Type de matériaux	Conductivité électrique	La résistivité
Métaux	$\rho \leq 10^{-5} \Omega \cdot \text{cm}$	$\sigma = 10^6 \text{ à } 10^4 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$
Semi-conducteurs	$10^{-3} \leq \rho \leq 10^4 \Omega \cdot \text{cm}$	$\sigma = 10^2 \text{ à } 10^{-10} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$
Isolants	$\rho > 10^8 \Omega \cdot \text{cm}$	$\sigma = 10^{-14} \text{ à } 10^{-16} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$

I-7 Les différents types des semi-conducteurs :

Par son habilité à conduire le courant, un semi-conducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant. Un semi-conducteur à l'état pur (intrinsèque) n'est pas un bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments uniques les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le silicium, le germanium et le carbone [4].

Il existe deux types de semi-conducteurs, l'un pur dit intrinsèque et l'autre dopé appelé Extrinsic.

I-7-1 Les semi-conducteurs intrinsèques :

Ce sont des semi-conducteurs très purs et très bien cristallisés présentant un réseau cristallin parfaitement périodique tout en ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour 10^{13} atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température, la figure ci-dessous donne un résumé global des semi-conducteurs intrinsèques du point de vue structure de bandes et distributions des charges [5].

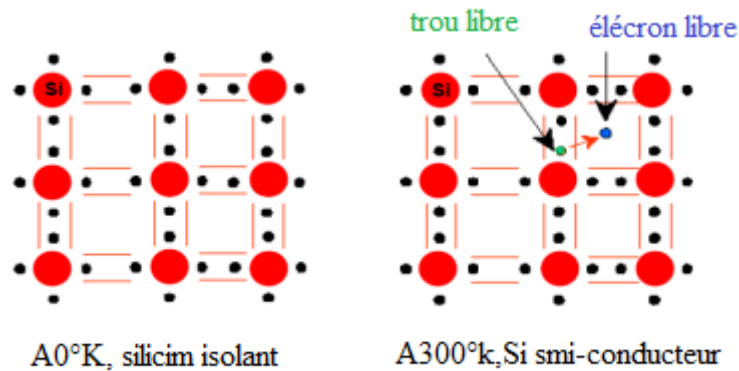


Figure .I.1 : Semi-conducteur intrinsèque

I-7-2 Les semi-conducteurs extrinsèques :

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par de impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage, lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques (diodes, transistors, etc.....) et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, etc. ...) [6].

I-8 Le dopage des semi-conducteurs

I-8-1 Semi-conducteur de type N:

En introduisant des atomes pentavalents tels que le phosphore P, l'arsenic As (dopage N) dans un cristal, certaines liaisons se casent laissant place à ces extra atomes qui ont cinq électrons de valence, ce qui comble les liaisons en laissant un électron libre dans le cristal peu lié au noyau et passe aisément dans la bande de conduction. [7] Les atomes pentavalents ou donneurs deviennent des ions positifs après le passage des électrons excédentaires dans la bande de conduction. Ce ci qui augmente considérablement la conductivité du matériau dopé. Les charges négatives (électrons) sont dits majoritaires, comme on peut le voir dans la figure suivante.

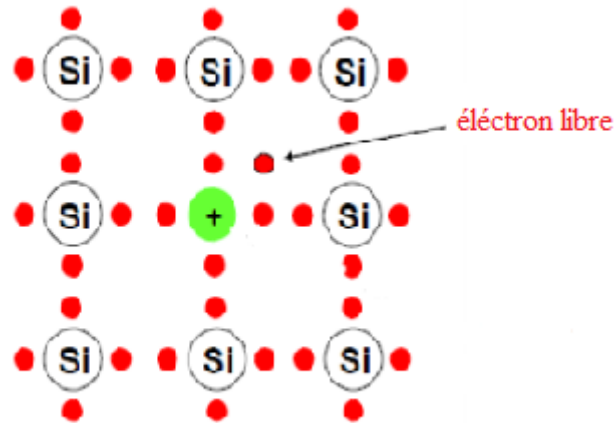


Figure .I.2. Les semi-conducteurs extrinsèques type N (exemple Silicium dopé n).

I-8-2 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P

Dans ce cas on introduit des atomes trivalents tels que gallium Ga, l'indium In, le bore B, l'aluminium Al. Il manque, alors, à l'impureté un électron de valence pour assurer les 4 liaisons avec les atomes de silicium voisins. Un faible apport d'énergie (0.05eV) suffit pour qu'un électron d'un silicium voisin soit capté par l'impureté : il y a formation d'un trou peu lié et donc mobile

Les atomes trivalents (accepteurs) deviennent des ions négatifs par capture d'un électron. Compte tenu des taux de dopage, ces trous sont beaucoup plus nombreux que les porteurs intrinsèques du cristal pur. La conduction extrinsèque de type **P** (positive) augmente et est assurée par des trous, les trous deviennent majoritaires. La figure ci-dessous explique clairement le phénomène.

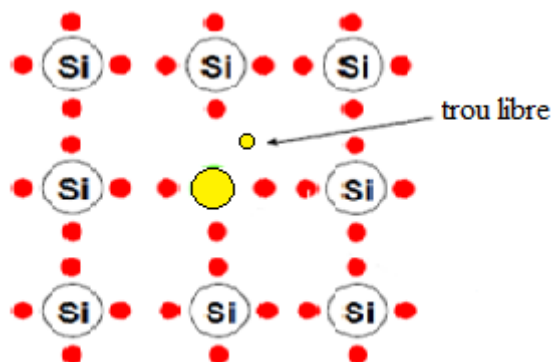


Figure. I.3. Les semi-conducteurs extrinsèques dopés p (exemple silicium dope p).

I-9- L'énergie de Gap :

En terme d'énergie, la différence entre la bande de valence et la bande de conduction est appelée un écart énergétique [8].

Il s'agit en fait de la quantité d'énergie que doit avoir un électron pour sauter de la bande de valence vers la bande de conduction. Une fois dans la bande de conduction, l'électron est libre de se déplacer à travers le matériau et n'est plus lié à aucun atome particulier.

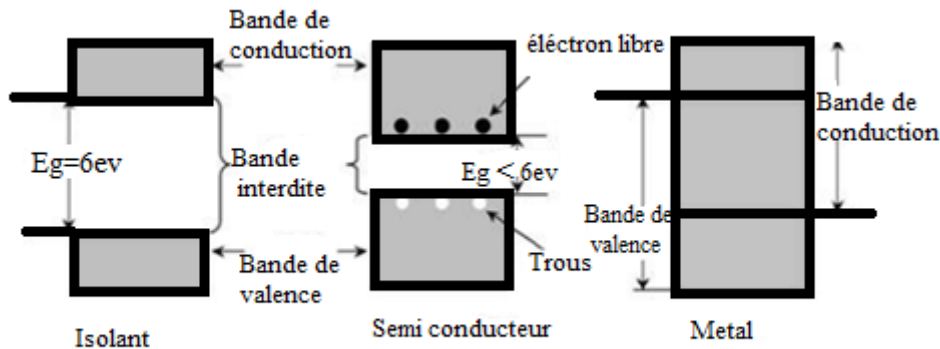


Figure I.4 : Structure en bandes d'énergie des matériaux ; isolants, semi-conducteurs et métaux [9].

Pour savoir si un matériau est isolant, conducteur ou semi-conducteur, il faut s'intéresser aux remplissages des bandes de valence et de conduction et à la taille du gap à l'état fondamental de la matière.

* Si la bande de conduction est partiellement remplie, quel que soit la taille du gap, des électrons au sein du matériau participent à la conduction électrique, le matériau est conducteur.

* Si la bande de conduction est et si le gap est grand, aucun électron du matériau ne peut participer à la conduction: le matériau est isolant ;

* Si le gap est suffisamment petit, le matériau est, au repos, « isolant ». Mais la moindre excitation, thermique ou électrique, permet à certains électrons de la Bande de valence de franchir le gap et le matériau devient conducteur. On parle Alors de matériau semi-conducteur.

Une autre définition : lorsqu'un électron quitte la bande de valence pour la bande de conduction, on dit qu'il y a création d'un trou : c'est une lacune en chargenégative, assimilable à une charge positive.

I-10 Semi-conducteurs par groupe :

I-10-1 Groupe IV :

Les éléments du groupe IV sont exceptionnels dans le tableau périodique en ce sens que l'enveloppe extérieure des atomes individuels est exactement à moitié remplie. Par un échange de quatre électrons de la coque extérieure avec un autre atome de Si, une structure cristalline tridimensionnelle sans direction préférentielle peut être relâchée. On peut aussi combiner deux différents groupes semi-conducteurs IV pour obtenir un matériau composé tel que le Sic (carbure de silicium). Sic est une matière proche de la ligne frontière entre les semi-conducteurs et des isolants avec une constante de réseau de 0,436nm écart d'énergie de 3,0 eV (413nm).

Les semi-conducteurs suivants font partie des cristallogènes :

Semi-conducteurs élémentaires : Diamant(c) ; Silicium (Si) ; Germanium (Ge)

Semi-conducteur composites : Carbure de silicium (Sic), silicium- germanium (SiGe)

I-10-2 Groupe IIIV :

Un semi-conducteur IIIV est un matériau composite fabriqué à partir d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, gallium, indium, etc.), et d'un ou plusieurs éléments de la colonne V ou (nitrogènes, azote, phosphore, arsenic, antimoine, etc...). Les semi-conducteurs III V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés :

- Ils sont robustes
- Ils possèdent une conductivité thermique élevée
- Leur point de fusion est élevé
- Ils ont une bande interdite directe

Ces matériaux sont principalement utilisés en microélectronique pour des circuits intégrés, dans les cellules photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes (DEL ou LDE en anglais). L'AlN, le GaN et l'InN possèdent respectivement des énergies de bandes interdites de 6.2 eV, 1.34 eV et -0.7 eV.

Alliages binaires :

Les matériaux sont constitués par des liaisons entre les cations qui perdent un électron ou plus pour que les anions doivent les captés. Le nombre d'électron échangé

dans le cas de groupe III-V soit trois électrons. La famille de ce groupe est caractérisée par les nitrures qui possèdent des gaps très élevés et les phosphores deviennent en deuxième position en valeur de gap. Exemple : le Nitrure d'aluminium (ALN) et le phosphore d'aluminium (Alp).

Alliages ternaires :

C'est des matériaux composés de trois atomes à des pourcentages différents. on cite à titre d'exemple le Arséniure de gallium-aluminium (AlGaAs , $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) et le Arséniure de gallium-indium (InGaAs , $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$).

I-10-3 Groupe II-IV :

Les semi –conducteurs suivants sont des alliages d'éléments appartenant au groupe 12 et aux chalcogènes, le nombre d'électron échangé entre l'anion et le cation soit deux électrons

Alliages binaires :

Ces matériaux sont formés entre deux atomes. Exemple : sulfure de cadmium (CdS), Tellure de zinc (ZnTe)

Alliages ternaires :

Exemple : Tellure de zinc- cadmium (CdZnTe , CZT), séléniure de zinc – mercure (HgZnSe) [10]

I -11 Définition des semi-conducteurs III-V :

Les matériaux semi –conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Les semi –conducteurs III-V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés :

- *ils sont robustes
- *ils possèdent une conductivité thermique élevée
- *leur point de fusion est élevé
- * ils ont une bande interdite directe

Tableau I-2 Extrait de la classification périodique des éléments. [11]

Colonne III	Colonne V
$_{11}^{5}\text{B}$	$_{14}^{7}\text{N}$
$_{24}^{13}\text{Al}$	$_{31}^{15}\text{P}$
$_{70}^{31}\text{Ga}$	$_{75}^{33}\text{As}$
$_{115}^{49}\text{In}$	$_{122}^{51}\text{Sb}$

I-12 L'intérêt des semi-conducteurs de type III-V :

Dans l'ensemble des matériaux, les semi –conducteurs III-constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance et à celui des applications.

Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs. Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs III-V interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.

En électronique rapide et en optoélectronique [12], les composés semi-conducteurs III-V sont préférables que d'autres (les propriétés du silicium par exemple sont insuffisantes des porteurs relativement petites et transition électronique indirectes au seuil d'absorption optique). On citera par exemple quelques composés binaires et ternaires, GaAs, InP, GaAlAs, Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

I-13 Les différents types des semi-conducteurs III-V

I-13-1 Les composés Binaires :

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, en particulier de la structure de bande, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants, et à structure de bande indirecte. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphore de gallium Gap entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte de porteurs, ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les

transitions opaques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent les composés à caractère métallique. On considérera donc essentiellement les composés à base de d'indium ou gallium, dont les propriétés sont les plus intéressantes.

I-13-2 Les composés Ternaires et Quaternaires :

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante [13]

Composés ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit $A_{1-x}A_xB$ Exemple: $In_{1-x}Mn_xP$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court $InMnP$.

Composés quaternaires (1+3) : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit : $A_xA'_yA''(1-x-y)B$. Exemple $GaInAlP$.

Composés quaternaires : (2+2): S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous Réseaux, soit $A_xA(1-x)B_yB(1-y)$. Exemple $Ga_xIn(1-x)PyAs(1-y)$

I-14 La notion de band d'énergie dans un semi-conducteur

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes qui est un modèle quantique en physique des solides, déterminant les énergies permises des électrons dans un solide et permet de comprendre la notion de conductivité électrique, Cette théorie est issue de la théorie des orbitales moléculaires. Dans ce modèle les énergies possibles pour un électron dans un solide forment ce qu'on appelle des bandes permises, séparées par d'autres bandes appelées bandes d'énergies interdites ou gap. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Les bandes de faible énergie sont complètement occupées; ce sont des bandes dites de valence, par contre les bandes de haute énergie sont vides ; sont appelées bandes de conduction [14].

Un matériau semi-conducteur se caractérise par sa structure de bande :

La bande de valence: c'est la bande qui correspond à la bande d'énergie la moins élevée entièrement remplie d'électrons.

La bande de conduction: est définie comme le premier niveau énergétique au-dessus de la bande de valence où accèdent les électrons excités.

La bande interdite: cette bande représente l'énergie qu'il faut fournir à un électron pour qu'il passe de la bande de valence à la bande de conduction.

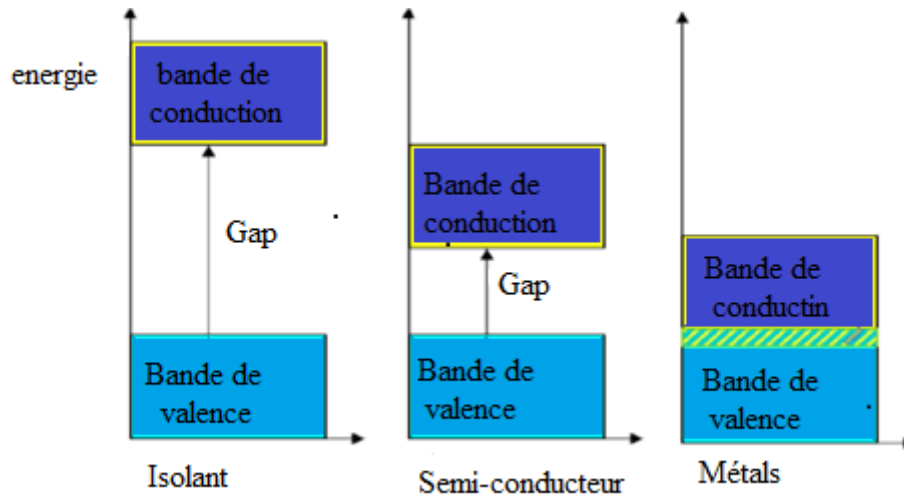


Figure. I.5. Structure des bandes d'énergie dans un isolant, un semi-conducteur et un conducteur

I-14-1 Bande interdite (gap énergétique) :

La théorie des bandes est une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre l'électron d'un solide à l'intérieur de celui-ci. De façon générale, ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles, lesquels sont séparés par des bandes d'énergie interdites (ou bandes interdites). Cette modélisation conduit à parler de bandes d'énergie ou de structure de bandes.[15]

Dans un semi-conducteur comme dans un isolant, l'écart énergétique entre la bande de conduction et la bande de valence est appelé largeur de bande interdite, ou tout simplement gap noté E_g , dans lequel, un porteur de charge ne peut se retrouver. L'énergie de bande interdite correspond à la différence entre le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence, c'est-à-dire :[16]

$$E_g = E_c - E_v \quad (\text{I.1})$$

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction.

Alors que pour les semi-conducteurs, cette bande est suffisamment petite pour qu'une excitation adéquate, permette aux électrons de la bande de valence de rejoindre la bande de conduction.

Ainsi le semi-conducteur peut transporter de l'électricité et donc devenir conducteur. Par contre dans les métaux, on rencontre un chevauchement des bandes, les électrons peuvent passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circulent dans tout le solide [17].

I-15 Gap direct et gap indirect :

En physique des semi-conducteurs, on appelle *gap* la largeur de la bande interdite, laquelle est l'intervalle d'énergies situé entre l'état de plus basse énergie de la bande de conduction et l'état de plus haute énergie de la bande de valence. On parle de gap direct lorsque ces deux extremums correspondent au même quasi-moment (quantité de mouvement associée au vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin), et de gap indirect lorsque la différence entre les vecteurs d'onde de ces deux extremums est non nulle. Les matériaux à gap direct et ceux à gap indirect se comportent très différemment du point de vue optoélectronique, car les porteurs de charge des matériaux à gap direct peuvent passer d'une bande à l'autre en échangeant simplement un photon. La quantité de mouvement est négligeable à ces niveaux d'énergie, tandis que les porteurs des matériaux à gap indirect doivent interagir à la fois avec un photon et avec un phonon afin de modifier leur vecteur d'onde, ce qui rend la transition bien moins probable. Un certain nombre de semi-conducteurs III-V sont à gap direct, comme l'arséniure de gallium GaAs et l'arséniure d'indium InAs, tandis que d'autres sont à gap indirect, comme l'antimoniure d'aluminium AlSb ; le silicium et le germanium sont également des semi-conducteurs à gap indirect.

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde k . Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [18].

I-15-1 Les semi-conducteurs à gap direct :

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k le semi-conducteur est dite à gap direct.

I-15-2 Les semi-conducteurs à gap indirect :

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k le semi-conducteur est dit à gap indirect. La distinction entre les semi-conducteur à gap direct et indirect est très importante, notamment, dans les processus radiatifs, les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [19] Les structures de bandes représentées sur la figure (I-2) font apparaitre deux types fondamentaux de semi-conducteurs :

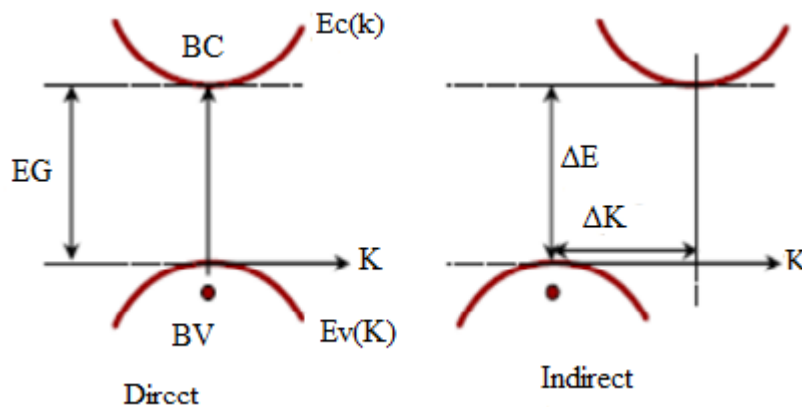


Figure 1.6 : Gap directe et gap indirect

I-16 Propriété des semi-conducteurs III-V :

La plupart des matériaux III-V cristallisent dans la structure sphalérite dit (ZincBlende). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc...), est constituée de deux sous-réseaux cubique face centrée (c f c), l'un d'éléments **III** et l'autre d'éléments **V**, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est -à-dire de $a\sqrt{3}/4$; ou adécrit le paramètre de maille du matériau.

I-17 Propriétés électriques :

Les matériaux semi-conducteurs **III-V** ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les

propriétés optiques des hétéro-structures. Les orbitales de type **s** et de type **p** de chaque atome (comme exemple le Vanadium V s'hybrident avec les orbitales des atomes de phosphore), et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type **sp³** : 4 orbitales liantes et 4 orbitales anti-liantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et formant la bande de valence. Cette bande est pleinement occupée par des électrons à $T = 0\text{K}$ pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales anti-liantes donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur E_g (bande gap en anglais). Pour les semi-conducteurs sont au point Γ . [20]

I-18 Propriétés structurales :

Structure cristallin :

Les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines. [21]

I-18-a Le paramètre de maille (a) :

Le paramètre de maille d'une telle structure dépend de la nature des éléments chimiques mis en jeu. Une maille cristalline est d'autant plus grande que le numéro atomique des éléments la constituant est grand et inversement. [22]

I-18- b Propriétés structurales de la maille zinc blende :

La plupart des matériaux semi-conducteurs binaire III-V et quelques matériaux II-IV ont une structure Zinc Blende (ZB) (**Figure I-4**), cette structure est constituée de deux sous réseaux cubique face centrée (cfc).

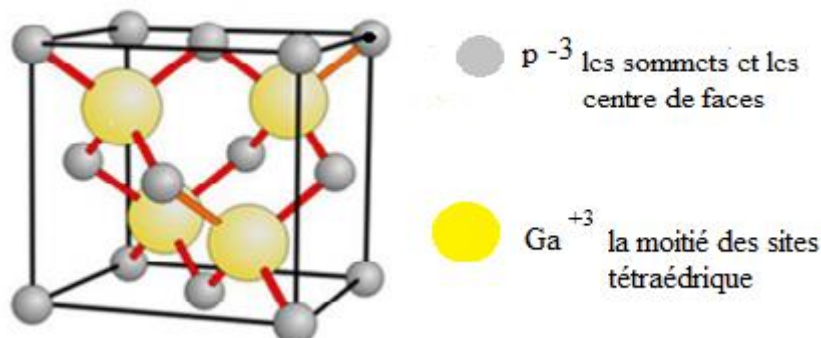


Figure I-7 : structure Zinc- Blende (GaP)

a) Stœchiométrie de la maille ZnS blende

Dans cette maille, il y a 4 ions zinc (au cœur de la maille) occupant la moitié de l'ensemble des sites tétraédriques c.-à-d. : 4sites.

Apportant chacun une contribution de 1 à la maille : $4 \cdot 1 = 4$ atomes de zinc. Il y a 8 ions sulfure (ceux des sommets) qui contribuent pour $1/8$ dans la maille et 6 ions sulfure (ceux des faces) qui contribuent pour $1/2$. Soit : $8 \cdot 1/8 + 6 \cdot 1/2 = 4$ atomes de soufre. On retombe bien sur une stœchiométrie 1-1.

b) Indices de coordination :

Chaque ion zinc est entouré de 4 ions sulfure, et chaque sulfure de 4 ions zinc il s'agit d'une coordination tétraédrique 4-4.

La condition de stabilité dans cette maille est fixée par le rapport des deux rayons cationique et anionique ($x = R^+/R^-$), on en conclut qu'un solide ionique présente une maille cubique à face centrées de type ZnS si $0,225 \leq X \leq 0,413$

C) Coordonnées réduites :

Origine sur l'anion :

$$S^{2-} : (0 \ 0 \ 0) \ (1/2 \ 1/2 \ 0) \ (1/2 \ 0 \ 1/2) \ (0 \ 1/2 \ 1/2)$$

$$Zn^{2+} : (3/4 \ 1/4 \ 1/4) \ (1/4 \ 3/4 \ 1/4) \ (1/4 \ 3/4 \ 1/4) \ (1/4 \ 1/4 \ 3/4) \ (3/4 \ 3/4 \ 3/4)$$

Si on fait une translation de type $(1/4 \ 1/4 \ 1/4)$ on obtient les nouvelles coordonnées :

Origine sur le cation :

$$S^{2-} : (1/4 \ 1/4 \ 1/4) \ (3/4 \ 3/4 \ 1/4) \ (3/4 \ 1/4 \ 3/4) \ (1/4 \ 3/4 \ 3/4)$$

$$Zn^{2+} : (0 \ 1/2 \ 1/2) \ (1/2 \ 0 \ 1/2) \ (1/2 \ 1/2 \ 0) \ (0 \ 0 \ 0)$$

L'examen de ces nouvelles coordonnées montre que les ions Zn^{2+} forment aussi un réseau CFC. la structure ZnS blende peut donc être décrite par deux réseaux CFC, l'un constitué par les anions S^{2-} , l'autre par les cations Zn^{2+} , décalés l'un de l'autre de $1/4$ selon la diagonale du cube c.à.d. par une translation de type $(1/4 \ 1/4 \ 1/4)$

d) positions

* un premier voisin : $V1 = 1/4a + 1/4b + 1/4c$

* un deuxième voisin : $V2 = 1/2a + 1/2b$

Les coordonnées respectives sont donc : $(1/4 \ 1/4 \ 1/4) \ (1/2 \ 1/2 \ 0)$

e) résultat :

Nous avons que $|a| = 5,409 \text{ \AA}$ pour le ZnS

Voisin	Calculées	Distance
Premier	$ a \cdot [(1/4)^2 + (1/4)^2 + (1/4)^2]^{1/2} = 2,34216 \text{ \AA}$	2,342°A
Deuxième	$ a \cdot [(1/2)^2 + (1/2)^2 + 0]^{1/2} = 3,82474 \text{ \AA}$	3,825°A

I-19 Propriété Structurale de la maille Wurtzite :

Quelques composés binaires semi-conducteurs II-VI tels que le ZnS se cristallisent dans la maille wurtzite (**Figure I-8**). La structure wurtzite est un empilement hexagonal.

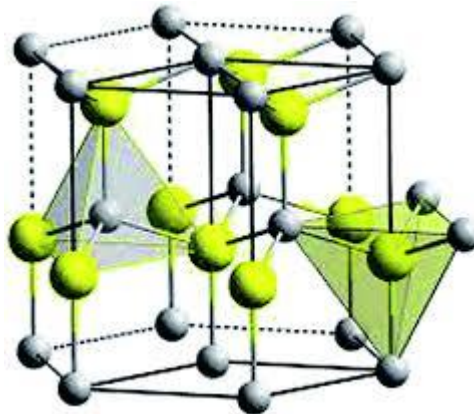


Figure I-8 : Structure wurtzite

a) Coordonnées réduites :

Origine sur l'anion : $S^{2-} : (0 \ 0 \ 0) \ (2/3 \ 1/3 \ 1/2)$. $Zn^{2+} : (0 \ 0 \ 3/8) \ (2/3 \ 1/3 \ 7/8)$

Origine sur le cation : $S^{2-} : (0 \ 0 \ 5/8) \ (2/3 \ 1/3 \ 1/8)$. $Zn^{2+} : (0 \ 0 \ 0) \ (2/3 \ 1/3 \ 1/2)$

b) Nombre de motifs :

La maille élémentaire losange de ZnS wurtzite comprend 2 cations Zn^{2+} et 2 anions S^{2-} , le nombre de groupements formulaires ZnS par la maille est donc : $z=2$.

c) Coordinance :

La coordinance des deux ions est la même. L'indice de coordination est 4 pour Zn^{2+} et 4 pour S^{2-} : coordination 4-4

Les coordonnées respectives sont donc :

d) Positions :

*un premier voisin : $V_1 = 1/3 a + 2/3 b$

* un deuxième voisin : $V_2 = a$

* un troisième voisin : $V_3 = (1 + 1/3) a + 2/3 b$

Les coordonnées respectives sont donc :

$(1/3 \ 2/3 \ 0)$ $(1 \ 0 \ 0)$ $(4/3 \ 2/3 \ 0)$. [23]

Nous avons :

$|a| = 2,456 \text{ \AA}$

$|c| = 6,693 \text{ \AA}$

e) Résultats :

Voisin	Calculées	Distance
Premier	$\{[(1/3)^2 + (2/3)^2(1/3)(2/3)]. a ^2 + 0\}^{1/2} = 1,41792 \text{ \AA}$	1,418 \text{ \AA}
Deuxième	$[(1 + 0 - 0). a ^2 + 0]^{1/2} = 2,456 \text{ \AA}$	2,456 \text{ \AA}
Troisième	$\{[(4/3)^2 + (2/3)^2 - (4/3)(2/3)]. a ^2 + 0\}^{1/2} = 2,83594 \text{ \AA}$	2,836 \text{ \AA}

I-20 Le réseau réciproque et la première zone de Brillouin :

Le réseau réciproque du réseau de Bravais correspondant à la structure blende de zinc est un réseau cubique centré. La première zone de Brillouin est définie de manière unique comme la maille primitive dans l'espace réciproque. Elle est définie par la même méthode que la maille de wurtzite dans le réseau de Bravais, et s'identifie à celle-ci dans l'espace réciproque. L'importance de cette première zone de Brillouin provient de la description en ondes de Bloch des ondes dans un milieu périodique, dans lequel il est démontré que les solutions peuvent être complètement caractérisées par leur comportement dans cette zone.

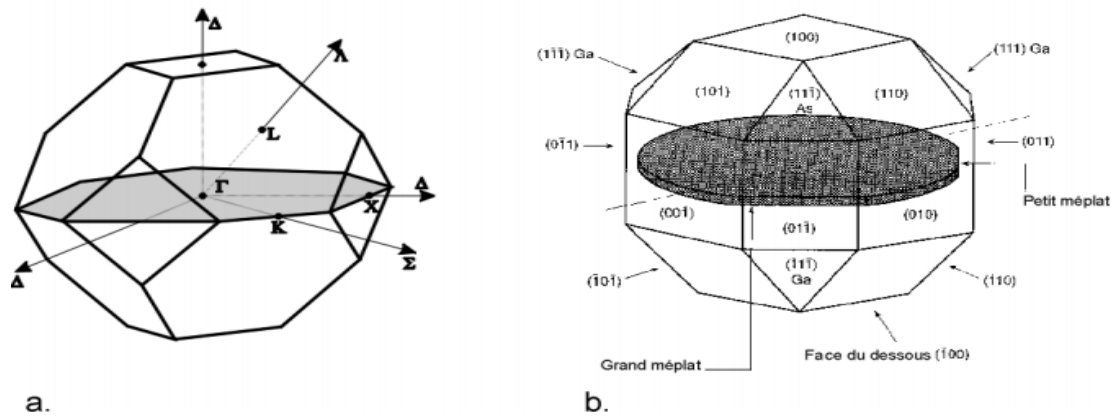


Figure I.9 : a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, b) plans et directions cristallographiques d'un substrat de GaP[24].

I-21 Les propriétés des deux maille (ZnS blende et wurtzite)

Tableau I-3 : Paramètres de chaque maille [25.26]

	ZnS blende	ZnS wurtzite
La maille	Cubique à face center (cfc)	Hexagonal
Paramètre de maille	$a=5.409\text{Å}$	$a= 3.811\text{Å}$ $b=60234\text{Å}$
	$Z=4$ $\rho = 4.1\text{g.cm}^3$	$Z= 6$ $\rho =3.98 \text{ g .cm}^3$
Motif périodique	Zns	Zn ₂ S ₂
Position atomique	Zn ²⁺ : (0.0.0) Zn ²⁺ : (1/2.1/2. 0) Zn ²⁺ : (1/2 .0. 1/2) Zn ²⁺ : (0 . 1/2 .1/2) S ²⁻ : (1 /4. 1/4 . 1/4)	Zn ²⁺ : (0.0.0) : (2 /3. 1/2. 1/2) S ²⁻ : (0.0.5/ 8) : (2 /3.1/3. 1/8)
Distance interatomique	$D_{\text{Zn-S}} = 2.342 \text{ Å}^0$	$D_{\text{Zn-S}} = 2.342 \text{ Å}^0$ $r_{\text{Zn}^{2+}} = 0.60 \text{ Å}^0$ $R_{\text{S}^{2-}} = 1.84 \text{ Å}^0$
Coordinance	$[\text{Zn}^{2+}] = 4$ $[\text{S}^{2-}] = 4$	$[\text{Zn}^{2+}] = 4$ $[\text{S}^{2-}] = 4$
Compacité	0,74	0,74
Le nombre de voisin	1	2

I-22 Les avantages des semi-conducteurs III-V :

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants:

- Leur propriété semi-isolant (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.
- Leur résistance aux radiations.
- Leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHZ à plus de 100 GHZ.

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz. [27]. La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium. [28]

Les composés III-V sont donc parfaitement appropriés à la réalisation de circuits hyperfréquences. On peut classer ces circuits par type :

1)- Les circuits bas niveau :

- Amplification faible bruit,
- Fonction de contrôle,
- commutation, etc.

2)- Les circuits de puissance :

Parmi les applications évoquée par la nouvelle technologie, le domaine des télécommunications pour les composants discrets et le balayage électronique radar pour les circuits intégrés micro-ondes

3)- Les circuits numériques :

Pour toutes les applications qui étaient couvertes jusqu'à présent par des circuits intégrés bipolaires au silicium.

I-23 Définition des matériaux étudiés :

I-23-1 Le phosphore :

Est l'élément chimique de numéro atomique 15, de symbole P. C'est un membre du groupe des pnictogènes. Le corps simple phosphore se présente sous plusieurs formes de couleurs différentes : blanc-jaune, rouge et violet-noir. Très pur, le phosphore « blanc » est transparent ; plus généralement il est blanc ambré, légèrement malléable avec une faible odeur d'ail. Les formes rouge et noire peuvent se présenter en poudre ou cristallisées. Le nom dérive du mot grec (*phosphoros*), qui signifie « porteur de lumière » et évoque la planète Vénus, l'étoile du berger. Cette origine a été attribuée au fait que le phosphore blanc émet de la lumière visible dans l'obscurité quand il est exposé à l'air, par chimiluminescence.

En raison du fait qu'il est indispensable à la vie et d'une consommation mondiale qui pourrait dépasser les ressources disponibles avant une centaine d'années, l'ONU et divers scientifiques le classent comme *matière première minérale critique*, qu'il faudrait apprendre à économiser et mieux recycler.

I-23-2 Le Gallium :

Le gallium est l'élément chimique de numéro atomique 31, de symbole **Ga**. Il appartient au groupe 13 du tableau périodique ainsi qu'à la famille des métaux pauvres.

Le corps simple gallium est un métal. Sa basse température de fusion (29,76 °C) lui permet de fondre dans la main. Des traces en sont trouvées dans la bauxite et les minerais de zinc.

Le gallium pur a un aspect argenté et il se brise sous forme solide de la même manière que le verre. Le volume du gallium augmente de 3,1 % lorsqu'il se solidifie et pour cette raison ne doit pas être stocké dans un récipient en verre ou en métal. Le gallium corrode la plupart des autres métaux en diffusant dans le réseau métallique. Du fait de son point de fusion de 29,76 °C, proche de la température ambiante, le gallium peut y être maintenu liquide grâce au phénomène de surfusion il en va de même pour le césium et le rubidium, le mercure étant le seul métal liquide avec un point de fusion inférieur à 0 °C. Il peut pour cette raison être utilisé dans les thermomètres à haute température. Il est aussi connu pour avoir une faible pression de vapeur à haute température.[29]

I-23-3 Le vanadium :

C'est l'élément chimique de numéro atomique 23, de symbole V. C'est un métal rare, dur et ductile que l'on trouve dans certains minerais. Il est principalement utilisé dans les alliages. Le vanadium possède 26 isotopes connus de nombre de masse variant entre 40 et 65, et cinq isomères nucléaires. Seul l'un de ces isotopes est stable, ^{51}V , et représente 99,75% du vanadium existant, les 0,25% restant étant constitués de ^{50}V , un radio-isotope naturel avec une demi-vie particulièrement longue de $1,5 \times 10^{17}$ années (soit 10 millions de fois l'âge de l'univers).

De ce fait, le vanadium est un élément mono isotopique, mais pas un élément mono nucléidique.

Sa masse atomique standard est de 50,9415 au, très proche de la masse isotopique de ^{51}V . Le vanadium dans la nature est formé de 2 isotopes : l'isotope ^{50}V à 0,24 %, très faiblement radioactif dû à sa demi-vie extrêmement longue de $1,5 \times 10^{17}$ ans ; et l'isotope ^{51}V à 99,76 %, stable. [30]

I-23-4 Caractéristiques notables :

Le vanadium est un métal blanc, brillant, dur et ductile, Il possède une bonne résistance à la corrosion par les composés alcalins, ainsi qu'aux acides chlorhydrique et sulfurique.

Il s'oxyde rapidement à environ 660 °C. Le vanadium possède une bonne force structurelle ainsi qu'une faible section efficace d'interaction avec les neutrons de fission, ce qui le rend utile dans les applications nucléaires.

C'est un métal qui présente à la fois des caractéristiques acide et basique. Environ 80 % du vanadium produit est utilisé dans le Ferro-vanadium et comme additif dans l'acier. [31]

I-24 Spintronique

L'électronique classique repose sur une propriété essentielle d'une particule élémentaire (électron), sa charge électrique. La spintronique permet d'exploiter une propriété supplémentaire de l'électron, la propriété quantique de spin. Elle offre des possibilités d'applications nouvelles, en particulier la réalisation de capteurs de très grande sensibilité qui ont révolutionné le stockage magnétique de l'information. La spintronique a émergé dans les années 1980 après la mise en évidence de l'existence

de courants polarisés en spin (suggérés par Mott) dans les métaux ferromagnétiques. Dans ces métaux comme le fer ou le cobalt, les libres parcours moyens des électrons sont différents selon leur spin, ce qui entraîne une différence du courant porté par ceux-ci, pouvant aller jusqu'à un facteur [32]

La spintronique est une technologie émergente qui exploite non seulement la charge mais aussi le spin de l'électron pour coder l'information. Le spin qui était totalement négligé dans les applications de la microélectronique classique, donne lieu à des phénomènes physiques nouveaux qui offrent des perspectives intéressantes en matière d'intégrabilité, de vitesse de communication, de communication et de non volatilité de l'information. C'est en ce sens que la spintronique a suscité un vif intérêt dans la communauté scientifique comme alternative à l'électronique classique qui est aujourd'hui confrontée à des obstacles physiques majeurs dus à une réduction accrue de la taille des composants .

I-24-1 Les quatre principes de base de la spintronique :

Dans un matériau non magnétique, qu'il soit métallique, isolant ou semi-conducteur, le nombre d'électrons de spin up et de spin down est le même.

Dans un matériau magnétique, par contre, le nombre d'électrons de spin up et de spin down est différent, puisque c'est justement cette différence qui donne lieu à l'apparition d'un moment magnétique macroscopique non nul. Dans les métaux magnétiques usuels (fer, cobalt, nickel et leurs alliages), les électrons responsables du magnétisme sont les mêmes que les électrons mis en jeu dans le transport électrique. L'asymétrie de spin des porteurs du courant est le premier principe de base de la spintronique. Dans un métal, le mouvement des électrons est freiné par la diffusion due aux impuretés du réseau, aux défauts (dislocations, joints de grain, ...) et aux excitations collectives (phonons, magnons) : c'est l'origine de la résistance électrique.

En première approximation, lors des collisions et autres diffusions subies par les électrons lors du passage du courant, la probabilité de diffusion avec retournement du spin est négligeable. En d'autres termes, le spin des électrons est, en première approximation, conservé. On peut donc considérer que les deux espèces électroniques (électrons de spin up et de spin down) conduisent le courant en parallèle : C'est l'approximation de Mott, le deuxième principe de base de la spintronique.

Par ailleurs, tout phénomène de diffusion nécessitant un état final dans lequel la particule peut être diffusée, on comprend tout de suite que dans un métal magnétique, puisque le nombre d'électrons (et donc la densité d'états vides) est différent pour les électrons de spin up et de spin down, la probabilité de diffusion va être différente selon que le spin des électrons conducteurs du courant est parallèle (up) ou antiparallèle (down) par rapport à l'aimantation macroscopique locale. Cette propriété, appelée diffusion dépendant du spin, est le troisième principe de base de la spintronique.

Enfin, lorsque le courant est injecté d'un matériau magnétique vers un matériau non magnétique, un désaccord apparaît à l'interface puisque le nombre d'électrons de spin up et de spin down est différent dans le métal magnétique alors qu'il est identique dans le métal non magnétique.

Le système doit donc passer d'un état de déséquilibre de spin vers un état d'équilibre de spin, ce qui induit l'apparition d'une zone de transition dans laquelle l'asymétrie de spin décroît progressivement.

La faible probabilité des diffusions avec renversement du spin, conduit à une longueur de transition, appelée longueur de diffusion de spin, Cet effet d'accumulation de spin est le quatrième principe de base de la spintronique.[33]

I-25 Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS)

Définition :

Les termes de semi-conducteur magnétique dilué (DMS pour Diluted Magnétique Semi-conductor) ou de semi-conducteur semi magnétique ont été employés à partir des années soixante lorsque ces semi-conducteurs présentaient une phase magnétique (Appelée verre de spin).

Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) sont des matériaux alliant à la fois les propriétés magnétiques et semi-conductrices, L'idée de ces matériaux vient de la volonté de maîtriser les propriétés magnétiques du matériau, et donc les propriétés liées aux spins, au travers des propriétés semi-conductrices.

La dénomination « dilué » provient du fait que les composants de la partie magnétique du matériau sont dilués dans la partie semi-conductrice.[34]

Les DMS ont commencé à voir le jour dans les 70 avec l'introduction d'impuretés magnétiques (Mn, Fe, Co) dans une matrice de semi-conducteur à base de II-VI. Non

dopés, ces DMS sont paramagnétiques à faible concentration en impuretés magnétiques, et présentent des phases verre de spin ou antiferromagnétiques à forte concentration en raison des interactions de super échange entre les états d-d. Ce n'est qu'en 1997 que par modulation de dopage de type p de puits quantiques CdMnTe, que le ferromagnétisme induit par les porteurs a pu être obtenu. [35]

Entre temps le premier DMS à base de semi-conducteur III-V a pu être fabriqué en incorporant du Manganèse (Mn) dans une matrice InAs. [36]

L'InMnAs a montré des propriétés ferromagnétiques car le Mn est un accepteur dans un semi-conducteur II-V ce qui induit le ferromagnétisme à travers les trous. L'archétype de ces DMS est le GaMnAs qui a certainement été le plus étudié et qui détient le record de la plus grande température de Curie avec $TC = 173$ K. [37]

I-25-1 Les DMS à base des semi-conducteurs III-V :

Les DMS III-V (essentiellement dopés au manganèse) font aujourd'hui l'objet de nombreuses publications. Le premier composé étudié en couches minces fut l'arséniure d'indium dopé au Mn. Le groupe d'H. Ohno a reporté en 1989 l'existence d'une phase homogène dans le $In_{1-x}Mn_xAs$ ferromagnétique [38], puis ils ont montré en 1992 que le ferromagnétisme était induit par les trous. [39]

Ces deux publications ont encouragé de nombreux groupes à étudier les semi-conducteurs III-V dopés Mn et notamment le composé $Ga_{1-x}Mn_xAs$ qui fait l'objet, depuis 1996 [21], de nombreuses publications expérimentales et théoriques. Dans les DMS III-V composés de manganèse, les ions magnétiques divalents sont accepteurs. Le couplage ferromagnétique véhiculé par les porteurs, domine. Le caractère magnétique et le dopage sont totalement liés, ce qui est un inconvénient de taille pour l'étude et la compréhension de ces systèmes.

I-25-1-a Avantage des DMS à base de semi-conducteur III-V:

Nous regroupons quelques avantages majeurs des DMS III-V. Cela permet de comprendre pourquoi ces matériaux sont très présents dans les recherches sur l'électronique de spin.

Tout d'abord, certains sont compatibles cristallographiquement avec des dispositifs existants : par exemple, on peut intégrer une couche d'aligneur de spin à base de séléniures sur un dispositif préexistant en GaAs. Ensuite ils disposent de

quelques avantages intrinsèques : grands temps de vie (jusqu'à 100 ns) des porteurs polarisés permettant leur transport sur plusieurs centaines de nanomètres ; forte efficacité dans la polarisation et l'injection de spins ; localisation des porteurs au sein d'hétérostructures dans des puits quantiques ou des boîtes quantiques.

Ajoutons à cela toutes les possibilités qu'ouvre l'ingénierie de bande sur ces matériaux : Ajustement de gap, du paramètre de maille, des contraintes, en fonction des besoins.

Ces matériaux ont également quelques propriétés magnétiques intéressantes, Bien évidemment, l'existence d'une phase ferromagnétique au-delà de la température ambiante est importante.

Citons également le fait que l'importance de leur facteur de Landé, qui quantifie le couplage entre les propriétés de spin et le champ magnétique extérieur, assure un splitting Zeeman conséquent.

Les propriétés dépendantes du spin, telle que la rotation de Faraday géante est ainsi amplifiée, et un champ magnétique assez faible peut suffire pour polariser totalement les porteurs au niveau de Fermi [40].

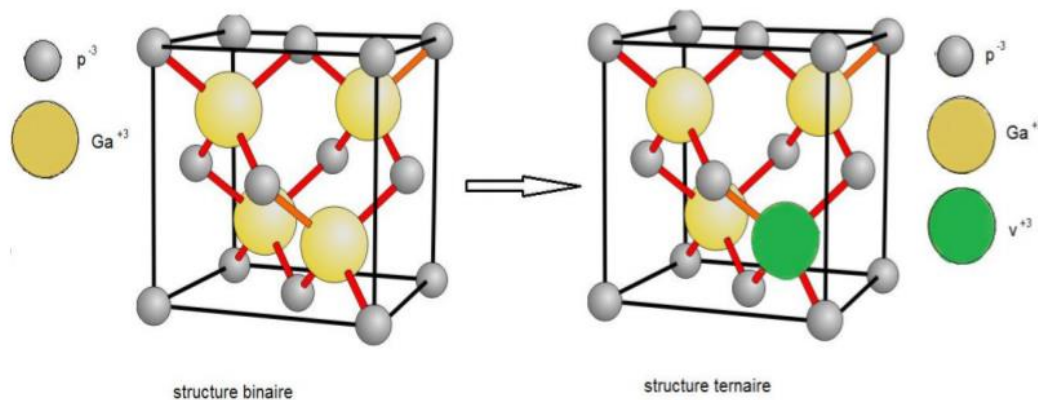


Figure I.10 : Préparation de DMS à partir de structure binaire.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les propriétés physiques des matériaux III-V ainsi que les structures cristallines, les bandes d'énergie. L'utilisation des matériaux composés apporté de nombreux avantages en termes des propriétés des matériaux. En effet, le but de leur fabrication est de profiter des bonnes propriétés de

chaque matériau afin d'en former un qui sera mieux adapté à certaines application. La combinaison de deux matériaux ou plus, permet donc d'améliorer les propriétés d'un matériau. Cela a fait l'objet de plusieurs études et l'intérêt de plusieurs chercheurs.

Bibliographies

- [1]: S. Datta et B. Das, Appl. Phys. Lett, 56 (7) (1990)
- [2]: évolution du paramètre exciton de Bohr en fonction des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs III-V. thèse doctorat. (2013).
- [3]:M. Thierry, Thèse de doctorat, Université de Strasbourg, (2001).
- [4]: F. Lévy, « Physique et technologie des semi-conducteurs », Ed PPUR presses polytechniques, (1995).
- [5] : a et b en K.S.A. Butcher et T.L Tanslay, superlattices and Microstructures 38,1 (2005)
- [6]. Michel Sauzade, " Introduction à l'électronique analogique «, Paris sud, 1995
- [7] : Languy Fabian, { mémoire de physique sur la haute conductivité de l'InN}
- [8]: T.L. Floyd « Electronique : Composants et systèmes d'application », Ed Reynald Goulet inc, (2004).
- [9]: N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, « Physique des solides », Ed EDP Science, France, (2002).
- [10]: a et b (en) K.S.A. Butcher et T.L. Tansley, Superlattices and Microstructures 38, 1 (2005).
- [11] : Henry Mathieu. Physique des semi conducteurs et des composants électroniques, Masson, (1987)
- [12]: B.Sabrina. Etude des états électroniques et posttonique de l'alliage AlInN dans la phase Zinc-Blinde (2002).
- [13] : S. Datta and B. Das, appl. Phys. Lette .56 ,665 (1990)
- [14] :. C. Ng-Hélène Ng, physique des semi-conducteur, 3 Ed.Dunod, (2007).[15]: Théorie des bandes, sur futura-sciences.com, consulté le 22 juillet 2016
- [6] : C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod université (1983).
- [17]. B.N. Brahmi, Thèse Doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013).
- [18]. A. Aouina, Mémoire de Magister en physique, Univ Mentouri Constantine.

- [19]: P.Martin et Charles E. Swenberg, *Electronic Processes in Organic Crystal and Polymers*, 2nd ed, Oxford Science Publications, Oxford University Press, New York, (1999)
- [19] :S. Datta and B. Das, *appel. Phys. Lette* .56 ,665 (1990)
- [20] : Marius Grundman : *Graduat texts in physics . The physique of semi-conductor. An introduction including Nano physicses. Second édition. Springer*
- [21] :C. Kittel I 'introduction à la physique de l'état solide, Dunod (1972)
- [22]: D. Bordel, thèse Doctorat, Univ Lyon, (2007).
- [23]: Ph.Agnès, *Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus (Thèse) : Institut national des sciences appliquées de Lyon, (1999).*
- [24]:J.Zimmermann, these de doctorat d'état << Etude par la méthode Monté Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régime stationnaires et non stationnaire. Application à la simulation de composants submicroniques>>, université de l.île 1, (1980).
- [25]: C.Kittel. *Introduction à la physique de l'état solide, Dunod (1972)*
- [26]: J.Bolinsson, Philippe Caroff, Bernhard Mandl, Kimberly A Dick, « Wurtzite–zinc blende
- [27]: W.T.Anderson << simulation of Semi-conductor Device failure Mechanisms>>, Naval research Laboratory, Washington. D. C, 2. Fraunhofer Institute, Freiburg, Germany (2003)
- [28] : (en) David R. Lide, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press Inc, 2009, 90^e éd., 2804 p., Relié (ISBN 978-1-420-09084-0)
- [29]: (en) David R. Lide, *CRC Han book of Chemistry and Physics*, CRC Press Inc, 2009, 90^e éd., 2804 p., Relié (ISBN 978-1-420-09084-0)
- [30] : (en) Beatriz Cordero, Veronica Gómez, Ana E. Platero-Prats, Marc Revés, Jorge Echeverría, Eduard Cremades, Flavia Barragán et Santiago Alvarez, « Covalent radii revisited », *Dalton Transactions*, 2008, p. 2832 - 2838 (DOI 10.1039/b801115j)
- [31] : Des ondes de spin pour l'électronique, *Dossier Pour la Science n°79*, avril-juin 201
- [32]: G. A Prinz, *J. Magn. Magn. Mater*, 200 (1-3) 57-68(1999)
- [33]: Des ondes de spin pour l'électronique, *Dossier Pour la Science n°79*, avril-juin 2013
- [34]: François Dagognet, *Tableaux et langages de la chimie : Essai sur la*

Représentation, Champ Vallon, 2002, 210 p.

[35] : Emmanuel Arras étude théorique de la structure et de la stabilité des Alliages GeMn dans le cadre de la spintronique Soutenue publiquement le 22avril 2010.

[36] :François Cardarelli, Materials Handbook : A Concise DesktopReference, Springer Verlag, 2008, 2e éd., 1340 p

[37] : Pierre Cayez, « Négociier et survivre : La stratégie de Rhône-Poulenc pendant la Seconde Guerre mondiale » [archive], dans Histoire, économie et société,vol. 11, no 11-13, pp. 479-491

[38] :H. Munekata, H. Ohno, S. Von Molnar, A. Segmuller, L. L. Chang, and L. Esaki, Phys. Rev. Lett., 63, p. 1849, (1989). "Diluted magnetic III-V semi-conductors".

[39] :H. Ohno, H. Munekata, T. Penny, S. Von Molnar, and L. L. Chang, Phys. Rev. Lett., 68, p. 2664, (1992). "Magnetotransport Properties of p-type (In,Mn)As Diluted Magnetic III-Vsemiconductors".

[40]: H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto and Y. Iye, Appl. Phys. Lett., 69, p. 363, (1996). "(Ga,Mn)As : "A new diluted

Chapitre II

II.1.Introduction :

Une description complète d'un système quantique à N électrons requiert le calcul de la fonction d'onde. En principe ceci peut être obtenu à partir de l'équation de Schrödinger, mais en pratique le potentiel subi par chaque électron est imposé par le mouvement, non seulement des plus proches voisins mais également par l'ensemble des autres électrons du système réel. Ceci nécessite la solution d'une équation de Schrödinger avec $\sim 10^{23}$ équations différentielles simultanées. En général, il n'est pas possible de résoudre cette équation et le recours à des approximations s'impose [1].

Les méthodes ab initio qui reposent sur la DFT permettent de modéliser les matériaux de manière fiable et quantitative et de traiter des systèmes de taille importante. Elles autorisent de ce fait la comparaison avec les résultats expérimentaux. Dans ce chapitre, nous exposerons les bases sur lesquels repose la DFT, en discutant les différents niveaux d'approximations nécessaires à la résolution de l'équation de Schrödinger. Dans la suite, les approximations utilisées pour le calcul de l'énergie et du potentiel d'échange-corrélation seront présentées.

II.2. Equation de Schrödinger :

L'étude à l'échelle atomique des propriétés structurales, électroniques et optiques d'un cristal périodique est un des sujets traditionnels de la physique de l'état solide. Plusieurs modèles théoriques ont été proposés dans le but d'interpréter des mesures expérimentales et récemment, de prédire de nouveaux effets ainsi que de concevoir de nouveaux matériaux. D'un point de vue microscopique le problème peut être établi d'une manière simple. Ceci consiste à résoudre l'équation de Schrödinger décrivant un système cristallin périodique.

$$\hat{H}\Psi = E \Psi \dots\dots\dots (II.1)$$

Ou :

- E** : Energie totale du système.
- Ψ** : Fonction d'onde (fonction propre).
- \hat{H}** : Hamiltonien.

Dans le cas simple, l'Hamiltonien se compose de cinq termes : l'énergie cinétique des noyaux et celle des électrons, ainsi que les différentes interactions entre eux.

$$\hat{H} = \hat{T}_N(\mathbf{R}) + \hat{T}_e(\mathbf{r}) + \hat{V}_{NN}(\mathbf{R}) + \hat{V}_{Ne}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \hat{V}_{ee}(\mathbf{r}) \dots \dots \dots (\text{II. 2})$$

Avec :

$$\hat{T}_N(\mathbf{R}) = -\sum_k \frac{1}{2M_k} \nabla_k^2 \quad \text{Energie cinétique de noyaux.}$$

$$\hat{T}_e(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 \quad \text{Energie cinétique des électrons.}$$

$$\hat{V}_{NN}(\mathbf{R}) = \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k Z_l}{R_{kl}} \quad \text{Potentiel d'interaction noyau- noyau.}$$

$$\hat{V}_{Ne}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_i \sum_k \frac{Z_k}{d_{ik}} \quad \text{Potentiel d'interaction noyau-électron.}$$

$$\hat{V}_{ee}(\mathbf{r}) = \sum_j \sum_{i>j} \frac{1}{R_{ij}} \quad \text{Potentiel d'interaction électron - électron.}$$

L'équation (II.1), équation d'Erwin Schrödinger (1926) avec \hat{H} s'est révélée être extrêmement difficile à résoudre, même dans les cas les plus simples. Effectivement lorsque le nombre d'atomes augmente, les difficultés du calcul augmentent de façon exponentielle. Ainsi, lorsque l'on considère un certain nombre d'électrons N, leurs fonctions d'ondes dépendent de leurs N coordonnées tridimensionnelles. Par suite, la fonction globale dépend de 3N variables. Les diverses méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques des matériaux à l'état solide mises au point au cours des dernières décennies reposent sur un certain nombre d'approximations.

II.3.L'approximation de Born-Oppenheimer :

Selon Born-Oppenheimer (Max Born (1882-1970) et Robert Oppenheimer (1904- 1967), le traitement des électrons et des noyaux d'une façon séparé est la seule possibilité qui permet la simplification de ce problème et la résolution de l'équation de Schrödinger [2] Supposent que les noyaux sont très lourds et donc plus lents que les électrons, ainsi les électrons peuvent de se déplacer dans le solide beaucoup plus rapide que les noyaux. Donc, le mouvement de noyaux est négligeable alors leur énergie cinétique est nul et l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux devient constante. Cette approximation est basé sur approximation adiabatique connu sous le nom « approximation adiabatique de BO» [3].Le hamiltonien électronique peut ainsi être défini comme :

$$\vec{H} = \vec{V}_e + \vec{T}_{n-e} + \vec{V}_{e-e} \dots \dots (II.3)$$

Plusieurs méthodes existent pour la résolution de l'équation (II.3) dont les premières sont les méthodes de Hartree-Fock basées sur hypothèse des Électrons libres. Ces méthodes sont beaucoup utilisées en chimie quantique pour traiter les atomes et les molécules, mais elles sont moins précises pour les solides. Il existe une méthode plus moderne et probablement plus puissante qui est la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). Son histoire revient à la première trentaine du 20^{ème} siècle mais elle a été formellement établie en 1964 par les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn. Ces auteurs ont démontré que tous les aspects de la structure Electronique d'un système dans un état fondamental non dégénère sont complètement déterminés par sa densité électronique $\rho(r)$ au lieu de sa fonction d'onde.

II.4. La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT):

Comme son nom l'indique, c'est une théorie qui utilise la densité électronique en tant que fonction fondamentale au lieu de la fonction d'onde comme c'est le cas dans la méthode de Hartree [4] et Hartree-Fock [5]. En fait, l'idée d'utiliser la densité électronique trouve son origine dans les travaux de Thomas et Fermi qui ont tentés d'exprimer l'énergie totale d'un système en fonction de sa densité électronique en représentant son énergie cinétique selon une fonctionnelle de cette grandeur. Cependant, la précision obtenue était inférieure à celle de Hartree-Fock à cause de l'absence du terme d'échange-corrélation.

Dirac a amélioré cette théorie en ajoutant au modèle de Thomas et Fermi une énergie d'échange fonctionnelle de la densité électronique. Mais le terme de corrélation électronique était toujours absent dans cette nouvelle approche.

II.4.1. Théorèmes de Hohenberg et Kohn :

Hohenberg et Kohn ont proposé deux théorèmes qui sont les suivants [6] : Ils ont prouvé dans un premier temps que l'énergie totale du système à l'état fondamental est une fonctionnelle unique de la densité électronique $\rho(r)$, soit :

$$E = E[\rho(r)] \dots \dots (II.4)$$

En conséquence, la densité électronique permet de déterminer de façon unique l'hamiltonien du système et de calculer les différentes propriétés du matériau étudié.

Dans un second temps, Hohenberg-Kohn ont également montré qu'il existe une fonctionnelle $E(\rho)$ exprimant l'énergie minimale en fonction de la densité électronique ρ et que cette dernière n'est d'autre que la densité électronique exacte de l'état fondamental ρ_{fond} . On a donc :

$$E[\rho(r)] = F_{HK}[\rho(r)] + \int V_{e-n}\rho(r)dr \dots (II.5)$$

Où $F_{HK}[\rho(r)]$ est la fonctionnelle universelle de Hohenberg-Kohn, existant pour tout type de système et exprimée par :

$$F_{HK}[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V[\rho(r)] \dots (III.5)$$

$T[\rho(r)]$ est l'énergie cinétique et $V[\rho(r)]$ l'interaction électron-électron.

La connaissance de cette fonctionnelle permet alors de calculer la densité électronique et l'énergie totale du système ainsi que ses propriétés à l'état fondamental. Malheureusement, l'inexistence d'expression analytique de cette fonctionnelle limite considérablement l'exploitation de cette approche, d'où la nécessité de faire appel à d'autres approximations.

II.4.2. Equations de Kohn-Sham :

Kohn et Sham ont pu montrer dans leur approche comment il était possible, formellement, de remplacer un système à plusieurs électrons interagissant par un système fictif d'électrons sans interaction, manifestant une même densité électronique $\rho(r)$, en découplant tous les électrons au niveau de l'échange et de la corrélation [7]. Par conséquent, la fonctionnelle de l'énergie peut être exprimée par l'expression suivante :

$$E[\rho(r)] = T_{ind}[\rho(r)] + V_{ind}[\rho(r)] + E_{xc}[\rho(r)] + \int V_{e-r}(r)\rho(r)dr \dots (II.6)$$

$$V_{ind}[\rho(r)] = \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \dots (II.7)$$

Avec $T_{ind}[\rho(r)]$ l'énergie cinétique du système d'électrons indépendants, $V_{ind}[\rho(r)]$ l'énergie potentielle classique représentant le terme de Hartree et $E_{xc}[\rho(r)]$ la fonctionnelle de l'énergie d'échange et de corrélation, regroupant les effets de corrélations dus à la nature quantique des électrons, soit :

$$E_{xc}[\rho(r)] = T[\rho(r)] - T_{ind}[\rho(r)] + V[\rho(r)] - V_{ind}[\rho(r)] \dots (II. 8)$$

Avec le potentiel de Hartree :

$$V_{Hartree}(r) = \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr' \dots \dots (II. 9)$$

Et le potentiel d'échange et de corrélation :

$$V_{xc} = \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \dots (II. 10)$$

De ce fait, l'équation représentant le système de N équations mono-électroniques de Schrödinger et débouchant sur les N états $\phi_i(r)$ de Kohn-Sham, peut s'écrire sous la forme :

$$\left(\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{effe}(r) \right) \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \dots \dots (II. 11)$$

Le terme ε_i représente les énergies de Kohn-Sham.

En définissant la densité électronique du système, on peut alors aboutir à l'équation

Suivante :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(r)|^2 \dots \dots (III. 12)$$

La densité de l'état fondamental est obtenue à partir de la résolution auto-cohérente des équations de Kohn-Sham sur lesquelles sont basés tous les calculs de type DFT. Il faut noter que seules l'énergie totale, l'énergie de Fermi et la densité électronique sont des quantités physiques. Par ailleurs, les états et les énergies de

Kohn-Sham ne sont d'autres que des moyens de calcul utilisés pour trouver certaine grandeur physique surtout pour les systèmes où les électrons sont peu corrélés.

Jusqu'ici, la DFT s'avère une méthode exacte mais pour qu'elle devienne utilisable dans la pratique, il est nécessaire d'approximer l'énergie d'échange et de corrélation.

II.5. Les approximations de la fonctionnelle d'échange et de corrélation :

La fonctionnelle d'échange-corrélation se doit de tenir compte, en plus du calcul auto-cohérent, de la différence d'énergie cinétique entre le système fictif non interactif et le système réel. Ainsi, le calcul de l'énergie et du potentiel d'échange-corrélation repose sur un certain nombre d'approximations qui sont la LDA et la GGA [8].

II.5.1. L'approximation du gradient généralisé (GGA) :

Pour améliorer certains nombres de problème de la LDA (ou LSDA) pour certaines applications, il faut introduire des termes en gradient dans l'expression de l'énergie d'échange et de corrélation, c.à.d. tenant compte de l'inhomogénéité de la densité électronique. Cette amélioration est connue sous le nom de L'approximation du gradient généralisé (GGA, Generalized Gradient Approximation) [9]. Ainsi la fonctionnelle $E_{xc}[\rho\vec{r}]$ rend compte du caractère non uniforme du gaz d'électrons.

Dans ce cas, la contribution de $E_{xc}[\rho\vec{r}]$ à l'énergie totale du système peut être additionnée de façon cumulée à partir de chaque portion du gaz non uniforme comme s'il était localement non uniforme. Elle s'écrit de la forme :

$$[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[(\rho(\vec{r})). |\nabla(\rho(\vec{r}))|] d^3\vec{r} \dots \dots \dots (II. 13)$$

Ou $\varepsilon[\rho(\vec{r}). |\nabla\rho(\vec{r})|]$ représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme. L'utilisation des fonctionnelles de type GGA permet d'accroître de façon significative la précision des calculs en comparaison avec la description fournie par la LDA en

particulier pour l'énergie de liaison des molécules. Ce qui est à l'origine de l'utilisation massive de la DFT par les chimistes dans les années 90.

II.6. Résolution des équations de Kohn-Sham :

La résolution des équations de Kohn et Sham nécessite le choix d'une base pour les fonctions d'ondes que l'on peut prendre comme une combinaison linéaire d'orbitales appelées orbitales de Kohn-Sham (KS) écrites sous la forme suivante :

$$\varphi_i(\vec{r}) = \sum C_{ij} \phi_j(\vec{r}) \dots \dots \dots (II. 14)$$

Où les $\phi_j(\vec{r})$ sont les fonctions de base et les C_{ij} coefficients de développement. La résolution des équations de Kohn et Sham se résume à la détermination des coefficients C_{ij} pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. La résolution des équations de (KS) pour les points de symétrie dans la première zone de Brillouin permet de simplifier les calculs [10].

Cette résolution se fait d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent illustré par l'organigramme de la Figure II.1. On commence par injecter la densité de charge initiale ρ_{in} pour la première itération. Typiquement on utilise une superposition des densités atomiques puis on calcule la matrice de Kohn et Sham, et en résolvant les équations pour les coefficients d'expansion C_{ij} pour obtenir les orbitales de Kohn-Sham, à cette étape, en calculant la nouvelle densité ρ_{out} . Si les calculs ne concordent pas (critère de convergence), on retourne à la première étape, on mélange les deux densités de charge ρ_{in} et ρ_{out} de la manière suivante.

$$\rho_{in}^{i+1} = (1 - \alpha)\rho_{in}^i + \alpha\rho_{out}^i \dots \dots \dots (II. 15)$$

i : représente le i^{eme} itération,

α : Un paramètre de mixage.

Ainsi la procédure itérative peut être poursuivie jusqu'à la convergence soit réalisée [11].

II.7. Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

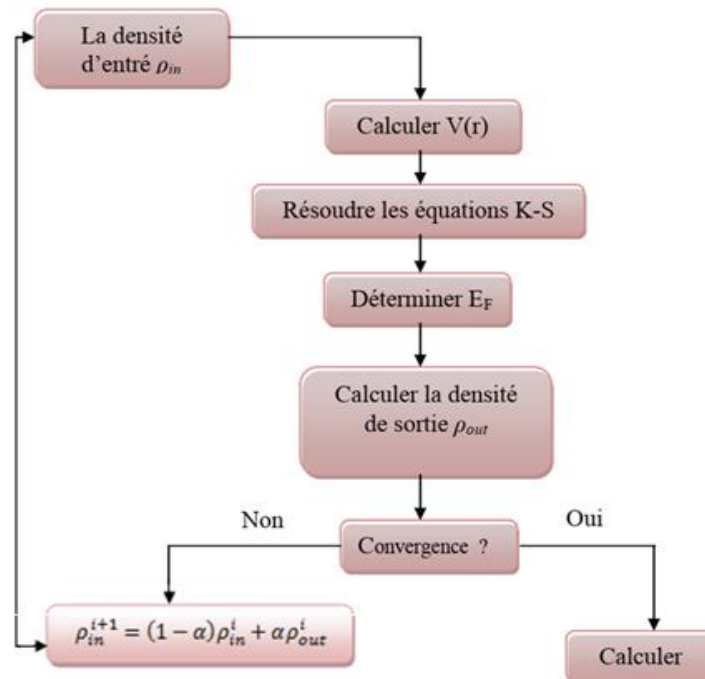


Fig. II.1 : Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [12].

II.8. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW : Linearized Augmented PlaneWave), développée par Andersen [13], est fondamentalement une amélioration de la méthode dite des ondes planes augmentées (APW : Augmented Plane Wave) élaborée par Slater [14 ,15](cette méthode est détaillée encore plus dans le livre de Loucks[16]). Avant de décrire la méthode FP-LAPW, et d'exposer leur principe, nous allons voir les différents aspects de la méthode APW et rappellerons ces bases.

II.8.1. La méthode des ondes planes augmentées (APW) :

La méthode des ondes planes augmentées (APW) est exposée par Slater dans son article [17] Il a supposé qu'au voisinage du noyau atomique le potentiel et les fonctions d'onde son similaire à ceux que dans un atome isolé. Certainement, ils varient fortement, mais ils sont presque sphériques, alors que les électrons qui sont loin du noyau considérés comme libres, d'où leur comportement est représenté par des

ondes planes. La méthode APW est basée sur l'approximation « Muffin-tin » pour décrire le potentiel cristallin qui s'appelle le potentiel « Muffin-Tin » [18].

Selon cette approximation, la cellule unitaire se divise en deux régions, illustrées sur la Figure (II.2).

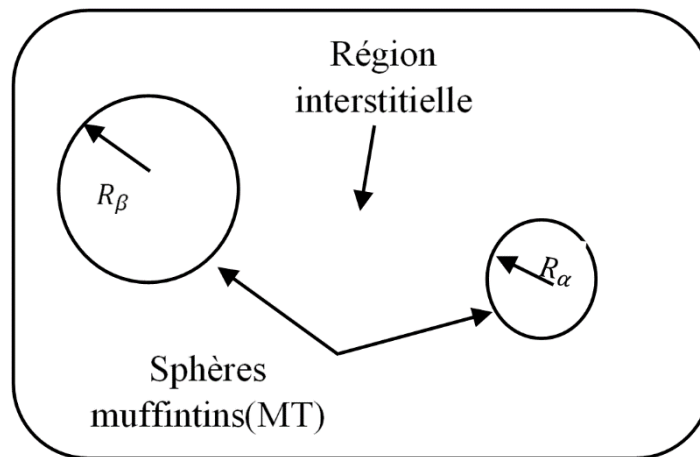


Figure II.2: Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions

Région I : décrit les sphères appelées les sphères « Muffin-tin » [19] qui ne se chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome α de rayon R_α (les sites atomiques) dans lesquels les solutions radiales de l'équation de Schrödinger sont employées.

Région II : décrit la région interstitielle délimitant l'espace résiduel non occupé par les sphères (voir la figure (II.1)), où le potentiel est lisse ou varie très lentement. Les deux régions sont définies par les fonctions d'ondes ϕ_I et ϕ_S qui sont écrites sous la forme suivante :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \phi_I = \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(\vec{K}+\vec{G})\vec{r}} & . r > R_\alpha \\ \phi_S(\vec{r}) = \sum_{lm} A_{lm} U_l^\alpha(r, E_l) Y_{lm}(r) & . r < R_\alpha \end{cases} \dots (II.16)$$

$\phi(\vec{r})$: La fonction d'onde

Ω : Le volume de la cellule unitaire de simulation.

$U_l^\alpha(r, E_l)$:	La fonction radiale.
$Y_{lm}(r)$:	L'harmonique sphérique.
C_G, A_{lm} :	Les coefficients du développement en ondes planes et en harmonique sphérique.
\vec{K}	Le vecteur d'onde dans la première zone irréductible de Brillouin(ZIB).
\vec{G}	Le vecteur de réseau réciproque.
\vec{r}	Les positions à l'intérieur des sphères α et β .
R_α, R_β	Les sphères Muffin tin α et β .

La fonction $U_l^\alpha(r)$ est une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale qui s'écrit sous la forme :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(R) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \dots \dots \dots (II.17)$$

Pour assurer la continuité de la fonction $\varnothing(r)$ à la surface de la sphère MT, les coefficients A_{lm} , doivent être développés en fonction des coefficients C_G des ondes planes existantes dans les régions interstitielles. Ainsi, après quelques calculs algébriques, nous trouvons que :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{1/2} U_l(R_\alpha)} \sum_G C_G j_l(|K + G|R_\alpha) Y_{lm}^*(K + G) \dots \dots \dots (II.18)$$

Où j_l sont les fonctions sphériques de Bessel, 4π provient de la surface des sphères Muffin-Tin [20].

A partir l'équation (II .18), les A_{lm} coefficients sont déterminé à partir de ceux des ondes planes et $C_G E_l$ (les paramètres d'énergie). Les fonctions individuelles, étiquetées par G deviennent ainsi compatibles avec les fonctions radiales dans les sphères, et on obtient alors des ondes planes augmentées (APWs).

Les fonctions APWs sont des solutions de l'équation de Schrödinger dans les sphères, mais seulement pour l'énergie E_l . En conséquence, l'énergie E_l doit être égale à celle de la bande d'indice G . Ceci signifie que les bandes d'énergie (pour un point k) ne peuvent pas être obtenus par une simple diagonalisation, et qu'il est nécessaire de traiter le déterminant séculaire comme une fonction de l'énergie.

La méthode APW ainsi construite représente quelques difficultés de calcul, dont celles liées au problème de l'asymptote, car les coefficients donnés par l'équation (II.18) contiennent le terme $U_l(R_\alpha)$ qui apparaît au dénominateur de l'équation. Il est donc possible de trouver des valeurs de l'énergie pour lesquels la valeur $U_l(R_\alpha)$ s'annule à la limite de la sphère. C'est ce qu'on appelle le problème de l'asymptote. Les calculs deviennent plus compliqués quand les bandes apparaissent près de l'asymptote. Donc, afin de surmonter ce problème, plusieurs modifications à la méthode APW ont été apportées, notamment celles proposées par Koelling [21] et par Andersen [22].

II.8.2 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW)

La méthode LAPW constitue l'une des bases les plus précises pour le calcul des solides cristallins, et comme nous avons déjà mentionné dans les paragraphes précédents que cette dernière utilise une description du potentiel de type Muffin-Tin et correspond à une amélioration de la méthode APW développée par Andersen [23,24], Koelling et Arbmán [25, 26] basé sur l'idée de Marcus.

Dans la méthode LAPW les fonctions de base dans MT sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $U_l(r)y_{lm}$ et de leurs dérivées $\dot{U}_l(r)y_{lm}$ par rapport à l'énergie. Les Fonctions U_l comme dans la méthode APW et la fonction $U_l(r)y_{lm}$ doivent satisfaire la condition suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = 0 \dots \dots \dots (II.19)$$

Ces fonctions radiales $U_l(r)$ et $\dot{U}_l(r)$ assurent, à la surface de la sphère MT, la continuité avec les ondes planes de l'extérieur. Les fonctions d'onde ainsi augmentées deviennent les fonctions de base (LAPW) de la méthode FP-LAPW :

$$\phi = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i[(\vec{k}+\vec{G})]\vec{r}} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r, E_0) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_0)] Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \dots (II.20)$$

En résumant quelques avantages de la méthode LAPW par rapport à la méthode APW, on note :

- Dans la méthode LAPW, les énergies des bandes de aux points k sont obtenues avec une seule diagonalisation. Alors que dans la méthode APW il est nécessaire de calculer l'énergie pour chaque bande.
- Le temps de calcul est réduit car les énergies des bandes à un point donné (k) sont obtenues avec une seule diagonalisation, ce qui n'est pas le cas de la méthode APW.
- La convergence est devenue plus rapide dans LAPW en comparaison avec la méthode APW
- .- Le problème de l'asymptote dans LAPW est éliminé par l'introduction de la dérivée de la fonction par rapport à l'énergie qui garantit le non découplage des ondes planes avec les fonctions radiales, en comparaison avec la méthode APW.

II.9. Le code WIEN2k

Le code WIEN2k est un programme de calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) basé sur la méthode FPLAPW. Il a été développé par P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz [27](Vienna University of Technology, Austria).

Le code WIEN2k est formé de plusieurs programmes indépendants (**figure(II.3)**) qui sont liés par C. Shell Script :

NN: C'est un programme qui donne les distances entre plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère MT.

LSTART: Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bandes, comme des états du coeur avec ou sans orbitales locales.

SYMMETRY: Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.

KGEN: Il génère une maille k dans la zone de Brillouin.

DSTART: Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART. Alors un cycle auto-cohérent est

initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0: Génère le potentiel à partir de la densité.

LAPW1: Calcule les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2: Calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres.

LCORE: Calcule les états du coeur et les densités.

MIXER: Mélange les densités d'entrée et de sortie.

II.10. Diagramme de calcul du code Wien2k :

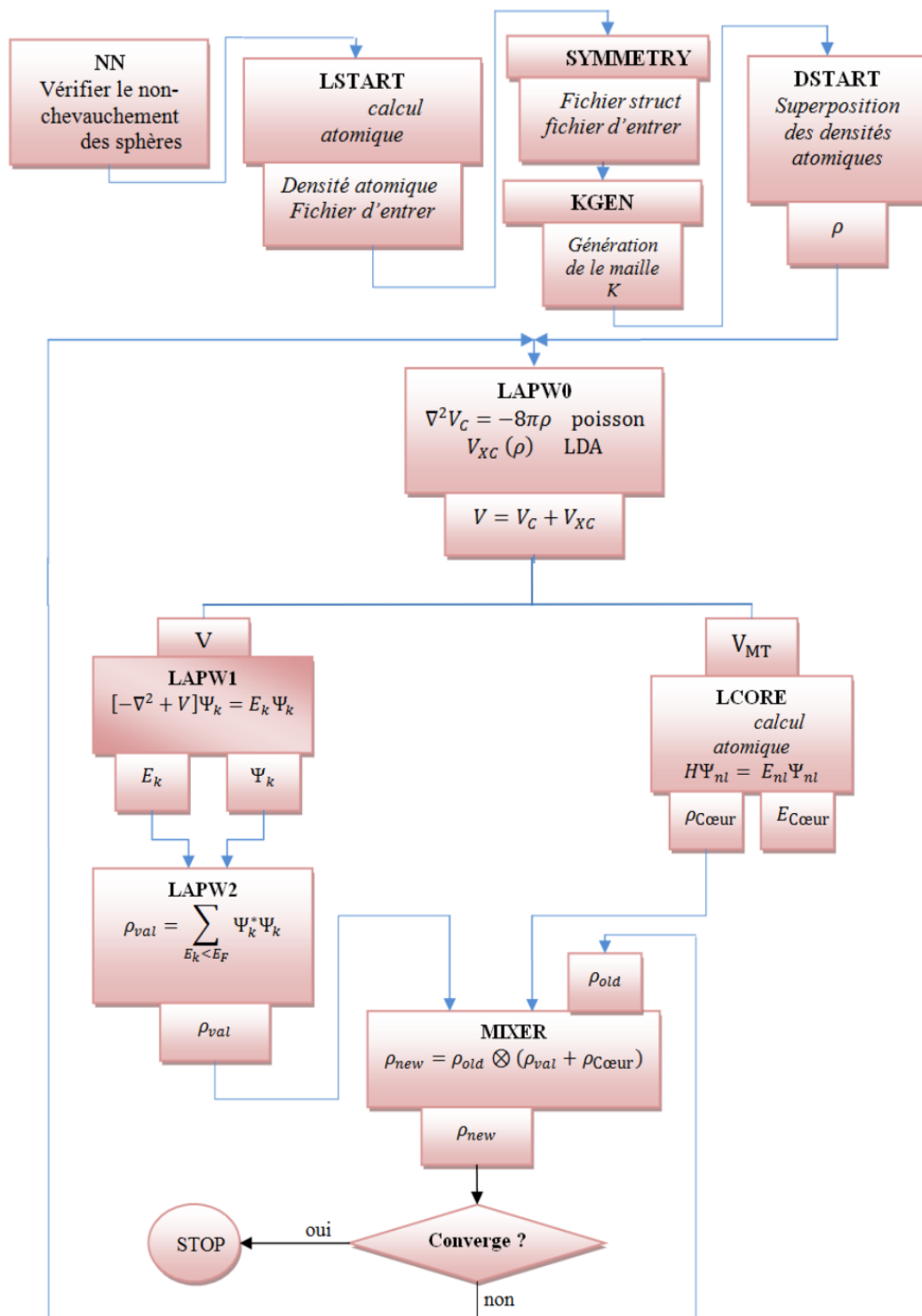


Fig. II.3: la structure du programme Wien2k [32]

Référence :

- [1] F. Poitou, Détermination de l'énergie au joint de grains par calculs ab initio et application à un modèle Monte Carlo de croissance cristalline, DEA Science des Matériaux, Lille, (2000).
- [2]:W.Kohn, Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 1253-1266.
- [3]: R. G. Parr, W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford university Press, Oxford, 1989.
- [4] D.R. Hartree. The wave mechanics of an atom with non-coulombic central field : parts i, ii, iii.Proc. Cambridge Phil. Soc., 24 :89, 111, 426, 1928.
- [5] V. Fock, Z. Phys. 61, 126(1930) ; 62, 795 (1930).
- [6] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136(1964) 864.
- [7] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. 137(6) (1965).
- [8] A.ROUABHIA, Thèse de Magister (Étude ab initio des propriétés structurales et Magnétiques des antipérovskites Fe_3MC ($M= Zn,Al,Ga,et Sn$)). Université des Sciences et de la Technologie d'Oran- Mohamed Boudiaf, (2010).
- [9] J.A.White and D.M.Bird. Implementation of gradient-corrected exchange-correlations potentials in Car-Parrinello total-energy calculations .*Pys .Rev. B.* 50(70):4957, Aug1994.
- [10]:Étude de deux méthodes de premier principe appliquées aux Heuslers.
- [11.12.32] Djoudi Lakhdar Thèse DOCTORAT (Étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage Semi-conducteur $BAIGaN$:Etude ab-initio) UNIVERSITE DJILALI LIABES DE SIDI BEL-ABBES.
- [13]:K. Endo, K. Yamamoto, and K. Deguchi, J. Phys. Chem. Solids 54, 15 (1993).
- [14]:A. Y. Liu, R. M. Wentzcovitch, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 39, 1760 (1989).
- [15]:R. Wentzcovitch, K.J. Chang and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 34, 107 1 (1 986).
- [16]:R. Wentzcovitch, M. L. Cohen, and Pui K. Lam, Phys. Rev. B 36,6058 (1987).
- [17] J.C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).]
- [18]:P. A. Sutton, electronic Structure of Materials, Clarendon Press. Oxford (1992).
- [19]:J.S Slater Wave function in a periodic potential, phy.Rev.51:846-851. (1937).
- [20]:Adrain P. Sutton, electronic Structure of Materials, Clarendon Press. Oxford (1992).]
- [21]:D.D. Koelling and G.O. Arbman, J. Phys. F 5, 2041 (1975).

- [22]:O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [23]:H. C. Hwang, and J. Henkel, Phys. Rev. B 17, 4100 (1978) .
- [24]: O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [25]:D. D. Koelling et G. O. Arbman, J.Phys. F (Metal Phys.) 5: 2041, 1975.
- [26] A. Canning, W. Mannstadt , A.J. Freeman, Computer Physics Communications130, 233–243 (2000).
- [27] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2001) 5815

Chapitre III

III-1.Introduction

Les semi-conducteurs binaires comme GaP représentent actuellement une Classe importante de matériaux dans le domaine technologique dans cette étude, nous présentons les résultats de calcul de propriétés structurale et les propriétés électronique ; magnétique et les propriétés des bande des alliages binaires AIP et ternaires $Ga_{1-x}V_xP$ dans la structure de zinc blende. Nous avons effectué ce calcul avec le code wien2k basé sur la théorie DFT-FPLAPW dans l'approximation de gradient généralisée proposée par Wu et Cohen (WC-GGA) aux concentrations Respectivement ($x=0,25$. $x=0,125$).

III-2 Propriétés structurales

Nous essayons de calculé le paramètre de maille (a) et le module de Compressibilité (B) et son premier dérivé (B'). Nous rappelons que le GaP cristallise et est stable dans la structure Zinc-blende. Son paramètre de maille expérimentale est $a_{exp} = 5.451 \text{ \AA}$ [1]

La procédure commune utilisée pour déterminer les propriétés structurales au voisinage de l'équilibre consiste à évaluer l'énergie totale du système pour différentes valeurs du paramètre de réseau. Les résultats obtenus sont ensuite ajustés à une équation d'état semi empirique. Dans le présent travail nous avons utilisé l'équation de Murnaghan [2].

Les paramètres des réseaux d'équilibre sont calculés en ajustant l'énergie totale en fonction du volume en utilisant l'équation de Monaghan [2] donnée par :

$$V = V_0 \left(1 + \frac{BP}{B}\right) \quad (\text{III-1})$$

La constante du réseau d'équilibre est donnée par le minimum de la Courbe $E(a)$ total et le module de compressibilité B est déterminé par :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III-2})$$

La dérivée du module de B' est déterminé par :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right) - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (\text{III-3})$$

Où P représente la pression, V le volume, B le module de Compressibilité (Bulkmodulus) et B' la première dérivée par rapport au volume du module en question

a-Paramètre cristallin :

Les paramètres cristallins, aussi appelés paramètres de maille, sont des grandeurs utilisées pour décrire la maille d'un cristal, On distingue trois longueurs (a , b , c) et trois angles (α , β , γ) qui déterminent entièrement le parallélépipède qu'est la maille, élémentaire ou multiple.

Les paramètres a , b et c appelons aussi paramètres structurales sont mesurés en Å ou en nm, et α , β et γ appelons les paramètres angulaires sont mesurés en °.

b-Module de compressibilité :

La compressibilité est une caractéristique d'un corps, définissant sa variation relative de volume sous l'effet d'une pression appliquée. C'est une valeur très grande pour les gaz, faible pour les liquides et très faible pour les solides usuels. Elle se définit comme:

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{dV}{dP}$$

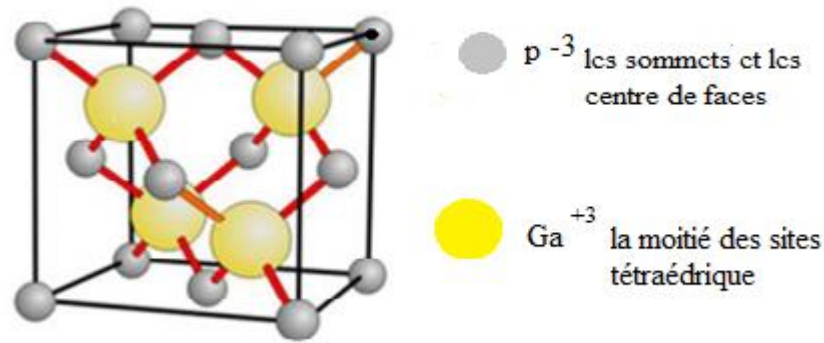
Où V est le volume du corps et P la pression appliquée (en Pa).

La compressibilité χ s'exprime donc en Pa^{-1} . [3]

III-1.1 Description des structures :

III-1-1-1 Structure binaire :

Dans cette structure les anions P^{-3} occupent les sommets et les centres de six faces c.à-d. Occupent un cube à faces centrées, les cations Ga^{+3} occupent la moitié des sites tétraédriques soit quatre sites. Donc la maille comporte 4 cations Ga^{+3} et 4 anions P^{-3} calculés : $8 \cdot 1/8 + 6 \cdot 1/2$.



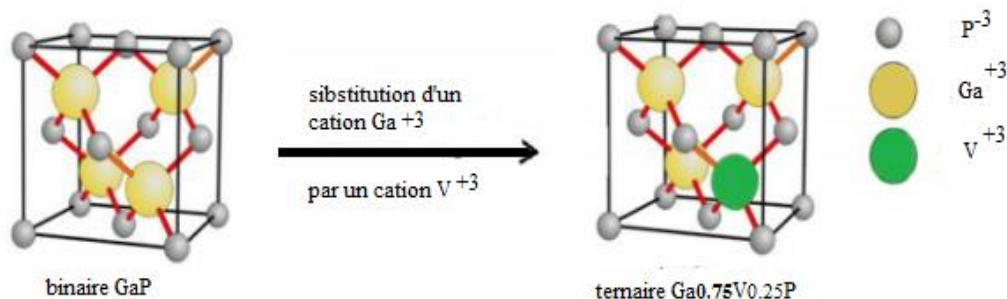
La figure III-1 : Structure cristalline de la Maille Gap.

III-1-1-2 Structure ternaire:

a- Structure ternaire Ga_3VP_4 :

Nous étudions le semi-conducteur phosphure d'aluminium GaP dopé au vanadium (V) et en se basant sur la structure zinc blende autant que phase de stabilité. Dans cette maille cubique l'atome Ga est situé à la position des sommets (0, 0, 0) et l'atome P se localise à la moitié des sites tétraédriques (0.25, 0.25, 0.25) avec le groupe d'espace $F43m$. On construit la super maille Ga_3VP_4 de 8 atomes par substitution d'un cation Le gallium (Ga) par le vanadium (V) et le Chrome à la position (0, 0,0). On obtient la super maille de $Ga_{0.75}V_{0.25}P$ ($1 \times 1 \times 1$) maille élémentaire de 8 atomes avec la concentration $x = 0.25$, avec le groupe d'espace $F43m$ (voir **figure III-2**).

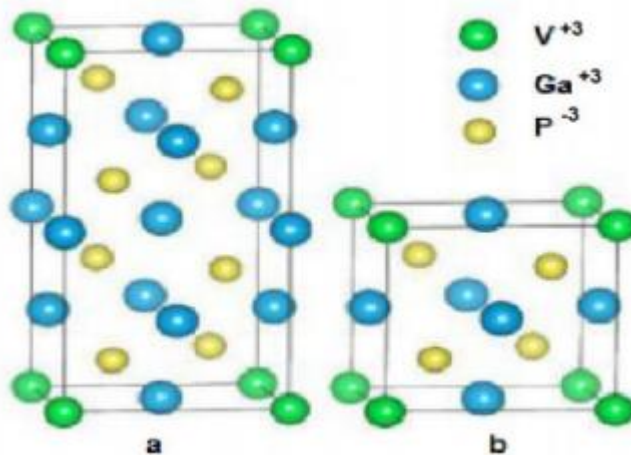
La forme ternaire est préparée par substitution d'un cation gallium par un cation vanadium donc le un quart des sites est occupé par le vanadium alors que les trois quart des sites tétraédriques sont toujours occupés par le gallium.



La figure III-2 : Préparation de la Structure ternaire $Ga_{0.75}V_{0.25}P$.

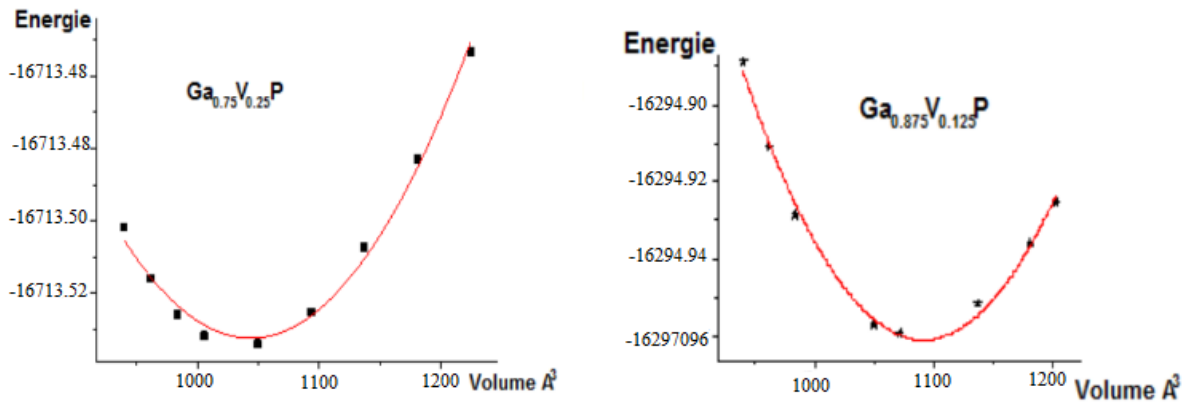
b-Structure ternaire Ga₇VP₈:

Nous étudions le semi-conducteur phosphure d'aluminium GaP dopé au vanadium (V) et en se basant sur la structure zinc blende autant que phase de stabilité. Dans cette maille cubique l'atome Ga est situé à la position des sommets (0, 0, 0) et l'atome P se localise à la moitié des sites tétraédriques (0.25, 0.25, 0.25) avec le groupe d'espace F43m. On construit la super maillette super-maille est préparée on fait une répétitions de la maille binaire dans l'une des trois directions X, Y ou Z, cette super-maille comporte huit anions phosphure et huit cations galium, en remplaçons les cations de galium situés dans les sommets de cette super-maille par l'ion vanadium le nombre des cations galium sera réduis en sept cations, est la structure devienne Ga₇VP₈ qui correspond exactement à la structure Ga_{0.875}V_{0.125}P. Voir la figure III.3.



La figure III-3 : Préparation de la Structure ternaire Ga_{0.875}V_{0.125}P

On portants l'énergie en fonction de volume de la maille, et avec l'application de l'équation de Murnaghan, on tire nos paramètres structuraux des deux différentes compositions.



La figure III-4 : La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour $Ga_{0.75}V_{0.25}P$ et $Ga_{0.875}V_{0.125}P$ dans l'approximation GGA-WC.

Nous reportons aux **tableaux III.1** un récapitulatif des différentes valeurs du paramètre de réseau, du module de compressibilité ainsi que de sa première dérivé par rapport à la pression.

Le tableau comporte une comparaison entre les résultats expérimentaux et théoriques provenant de travaux disponibles en bibliographie, ces valeurs expérimentales et théoriques correspondantes sont reportées en vue de juger et d'évaluer la qualité des résultats obtenus.

Tableau III-1. Calcul de la constante de réseau (a), module de volume (B) et de sa dérivé de pression (B') pour GaP et $Ga_{1-x}V_xP$ au concentration ($x= 0.125, 0.25$)

<i>Composé</i>	<i>Concentration. (x)</i>	<i>a (Å)</i>	<i>B (GPa)</i>	<i>B'</i>	<i>Méthod</i>
Notre travail					
GaP	0.00	5.446	85.96	4.55	GGA-WC
$Ga_{1-x}V_xP$	0.25	5.429	88.04	4.22	
	0.125	5.434	87.80	4.09	
Autres calculations					
GaP	0.00	5.448[4]	85.50 [4]		GGA-WC
		5.451[5]*	86.0 [6]*		Expérimental

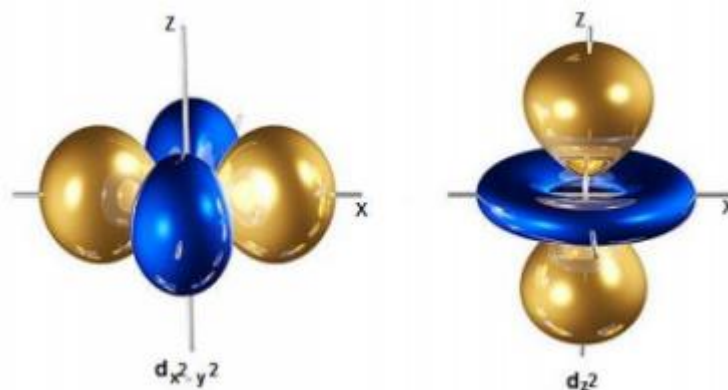
[5], [6], Données expérimentales..

Nos résultats ont donc une cohérence interne. D'autre part, l'erreur de calcul ne dépasse pas les 1% ($\Delta a/a_{exp} = (5,451 - 5,446)/5,451 = 0,01$) par rapport aux résultats expérimentaux. On remarque que si la concentration du métal adopté augmente les valeurs de paramètre de maille deviennent de plus en plus petites ceci veut dire que le rayon ionique de vanadium est considéré comme élevé que celui de galium.

Et les valeurs de module de compressibilité des composés ternaires sont plus grandes que celui de la structure binaire ceci explique que l'intérêt d'alliage est plus favorisé dans la structure binaire.

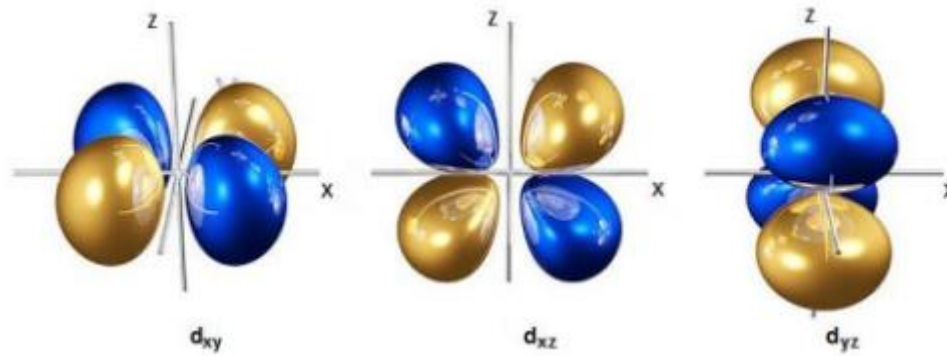
III-2 Propriétés électroniques :

Dans l'atome isolé, les niveaux d'énergie des cinq orbitales 3d sont dégénérés (même énergie). Sous l'effet d'un champ électrique sphérique, les orbitales sont déstabilisées d'une quantité ΔE . Maintenant, si le cation (atome central) est placé au centre d'un environnement tétraédrique, les 4 ligands vont créer un champ électrostatique dont l'influence sur les 5 orbitales d du cation dépendra de l'orientation de celles-ci. Les cinq orbitales d ne sont donc plus équivalentes vis-à-vis des 4 ligands : il y a levée de dégénérescence. Les orbitales $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2} sont stabilisées elles pointent entre les ligands un électron occupant une de ces orbitales subit une répulsion moindre par les ligands donc l'énergie de ces orbitales est abaissée, Elles sont appelées t_{2g}.



La figure III-5 : Les orbitales $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2}

Les orbitales d_{xy} , d_{yz} , d_{zx} sont déstabilisées elles sont dirigées directement vers les ligands, un électron occupant une de ces orbitales subit une répulsion plus forte des ligands donc l'énergie de ces orbitales est augmentée, Elles sont appelées e_g.



La figure III-6 : Les orbitales d_{xy} , d_{yz} , d_{xz}

Sous l'effet du champ cristallin tétraédrique formé par l'encerclement des quatre anions phosphoriques l'orbital 3d de vanadium initialement dégénéré se décompose en deux niveaux complètement différents en énergie selon figure suivante.

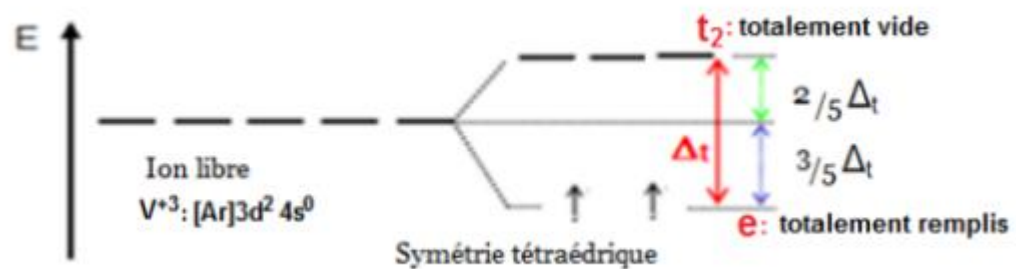
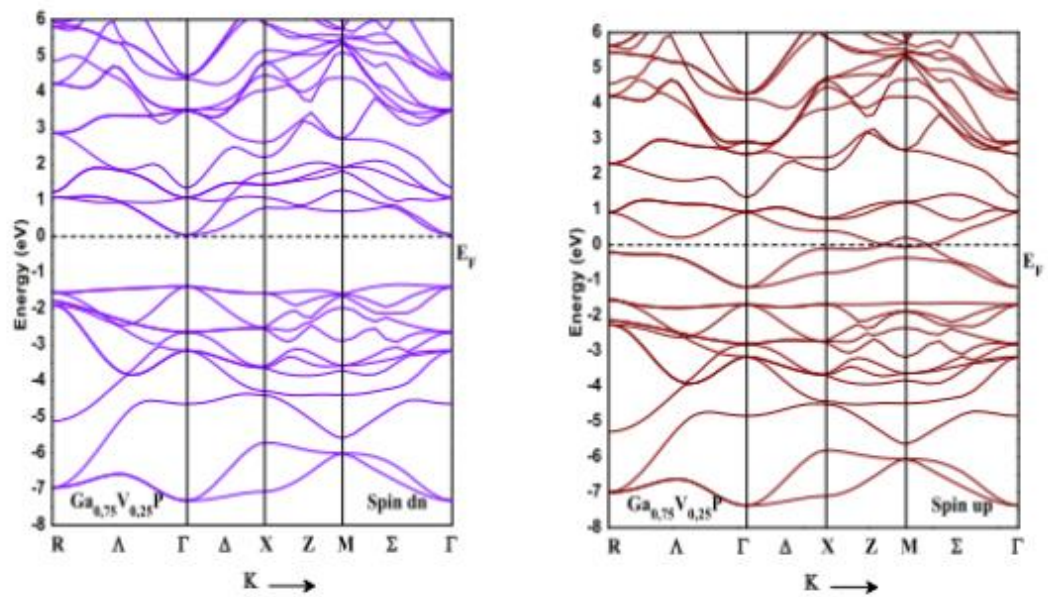


Figure III-7 : Eclatement des orbitales 3d de V^{+3} dans la symétrie tétraédrique

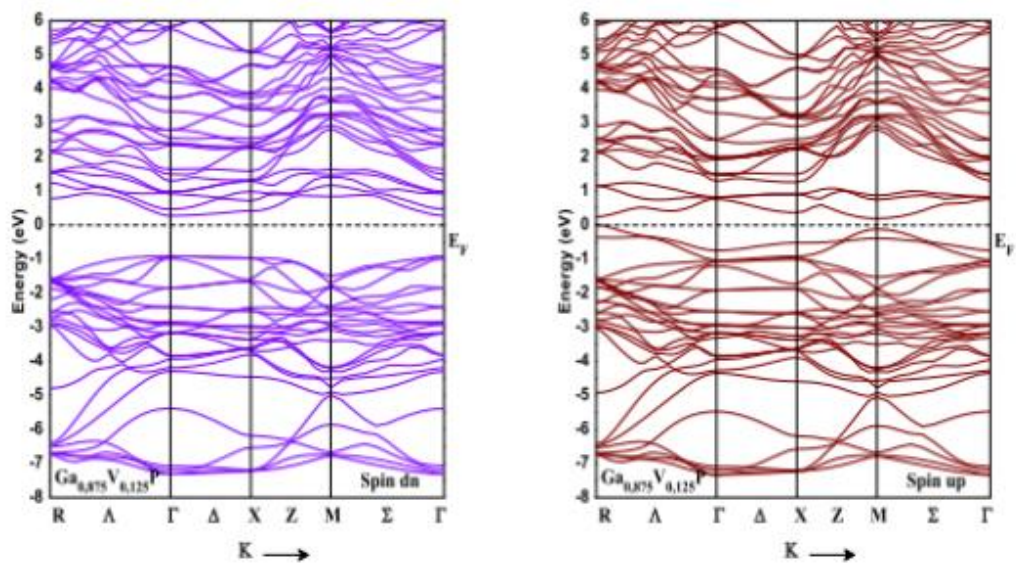
Les structures de bandes de nos composés ont été calculées avec les paramètres de maille théoriques. Les figures III-8 et III-9 représentent les structures de bandes électroniques selon les directions de haute symétrie de la zone de Brillouin associée à la structure zinc blende.

Les structures sont obtenues par la résolution des équations de Kohn-Sham (avec le formalisme du GGA-WC) au moyen de la méthode FP-LAPW pour GaP, $Ga_{0.75}V_{0.25}P$ et $Ga_{0.875}V_{0.125}P$ Respectivement.

Une première comparaison entre les structures de bandes montre des transitions différentes de la bande interdite. En effet le GaP est à gap indirect au point X par contre le $Ga_{0.75}V_{0.25}P$ et $Ga_{0.875}V_{0.125}P$ sont à gap direct.



La figure III-8 : Structure de bande de $\text{Ga}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{P}$ calculée par la méthode FP-LAPW avec l'approximation GGA-WC.



La figure III-9 : Structure de bande de $\text{Ga}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{P}$ calculée par la méthode FP-LAPW avec l'approximation GGA-WC.

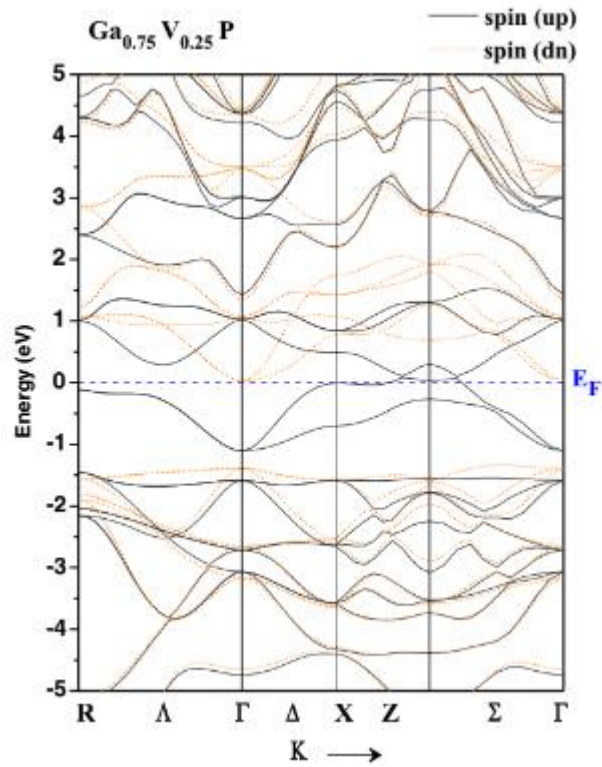


Figure III-10 Structures de bandes polarisées en spin pour un spin majoré (vers le haut) et spin minoritaire (dn) pour $\text{Ga}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{P}$. Le niveau de Fermi est mis à zéro (ligne pointillée) (figure de couleur en ligne)

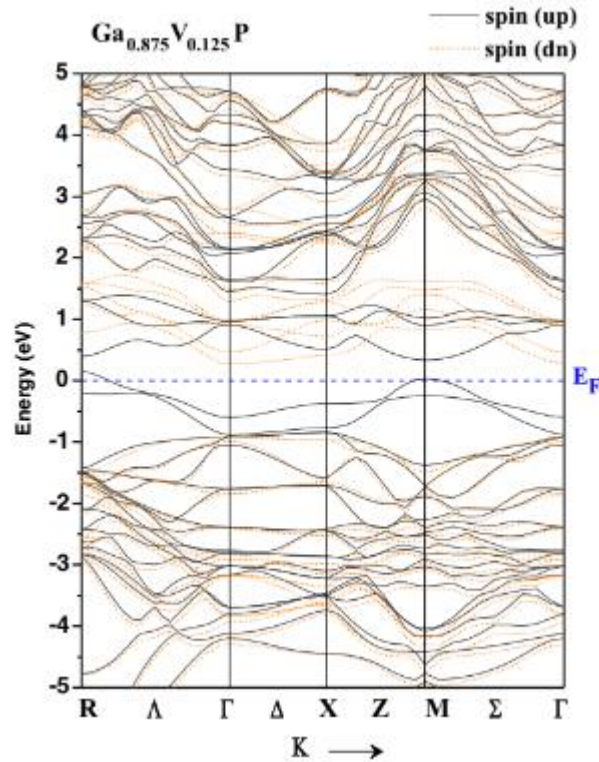


Figure III.11 Structures de bandes polarisées en spin pour un spin majoré (vers le haut) et spin minoritaire (dn) pour $\text{Ga}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{P}$. Le niveau de Fermi est mis à zéro (ligne pointillée) (figure de couleur en ligne)

Les densités de charges totales et partielles PDOS de ces produits, sont basées sur l'hybridation entre les états 3d (V) et les états 3p (P) pour les spins majoritaires.

L'étude par l'approximation (GGA-WC) des Composés $\text{Ga}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{P}$ et $\text{Ga}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{P}$ a montré clairement la création d'une forte hybridation entre les orbitales p des atomes de phosphore (P) et l'orbitale 3d de l'atome de métal de transition (V) dans la région anti-liante des spins majoritaires, qui domine le niveau de Fermi E_F .

Dans $\text{Ga}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{P}$ et $\text{Ga}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{P}$ l'atome V est substitué sur le site cationique de Ga^{+3} , sous l'effet du champ cristallin tétraédrique formé par l'anion P^{3-} les orbitales 3d (V) subissent une levée de dégénérescence des niveaux électroniques, et se répartissent en deux groupes séparés par l'énergie du champ cristallin; un triplet des états de haute énergie t_{2g} (d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}) et un doublet des états de basse énergie e_g (d_{z^2} et $d_{x^2-y^2}$) symétriques [7].

III-2-1 Densité d'états électroniques :

En physique du solide, la densité d'états électroniques, en anglais Densité of States ou DOS, quantifie le nombre d'états électroniques possédant une énergie donnée dans le matériau considéré. Elle est généralement notée par l'une des lettres g , ρ , D , n ou N . Plus précisément, on définit la densité d'états $N(E)$ par le fait que $N(E) dE$ est le nombre d'états électroniques d'énergie comprise entre E et $E + dE$ par unité de volume du solide ou, plus fréquemment, par maille élémentaire du cristal étudié. La densité d'états est égale à l'intégrale de la fonction spectrale sur la première zone de Brillouin :

$$D(E) = \int_{PZB} \frac{d^3k}{(2\pi^2)} A(k, E)$$

Le PDOS de figure (III-10) montre que les états t_{2g} se situent au-dessus des états e_g , ce qui indique que l'atome (V) est situé dans un environnement tétraédrique, où l'énergie des états e_g est inférieure à l'énergie des états t_{2g} à cause de la réduction d'interaction de Coulomb [8].

Les PDOS des $Ga_{0.75}V_{0.25}P$ et $Ga_{0.875}V_{0.125}P$ montrent qu'il existe une forte hybridation entre les états 3d (V) et 3p (P) qui forme la bande de valence. Des semi-conducteurs hôtes.

Cela crée les états liants (**bonding states**) (t^b) dans les bandes de valence et les états anti-liants (**anti-bonding states**) (t^a) dans la bande interdite (**bande gap**).

D'autre part, les états e_g s'étendent à la région interstitielle, d'où on remarque qu'une faible hybridation résulte entre ces états et la bande de valence, cela crée les états non-liants (**non-bonding states**) (e) dans la bande interdite [9].

Les DOS totales montrent que la partie supérieure de la bande de valence des spins majoritaires et la partie inférieure de la bande de conduction des spins minoritaires est dominée par les états 3d de métal de transition (V).

Aussi les figures les PDOS montrent que les spins majoritaires sont métalliques, car il existe une forte hybridation entre les orbitales (P) et l'orbitale 3d- t_{2g} (V) dans les états des anti-liants qui domine le gap. Cette hybridation domine

la partie supérieure des états de la bande de valence, elle est située entre (-0.91eV et 0.35 eV), pour $\text{Ga}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{P}$.

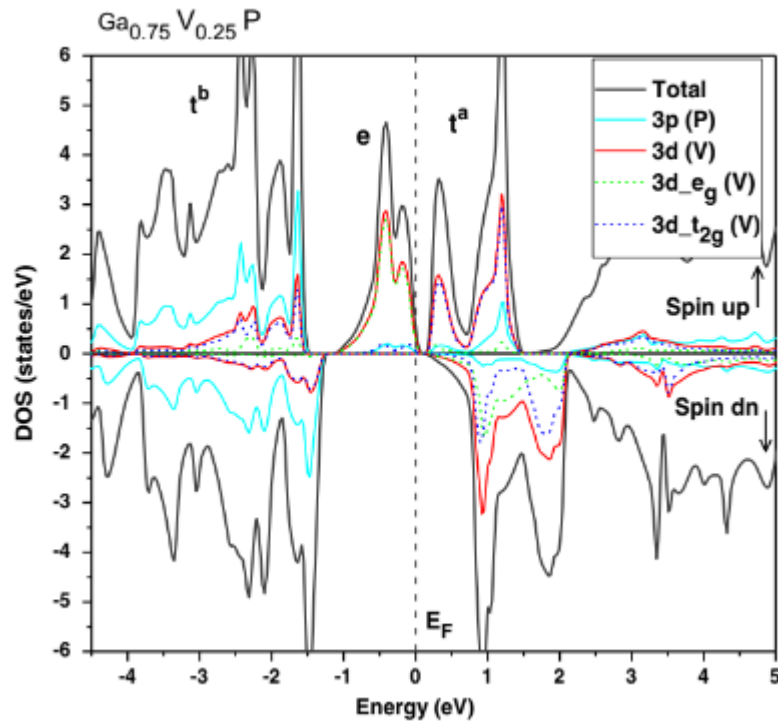


Figure III-12 DOS total et partiel polarisés en spin de (3p) de P et (3d,3d – eg, 3d – t2g) de V dans la supercellule pour $\text{Ga}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{P}$. Le niveau de Fermi est mis à zéro (ligne pointillée) (figure de couleur en ligne)

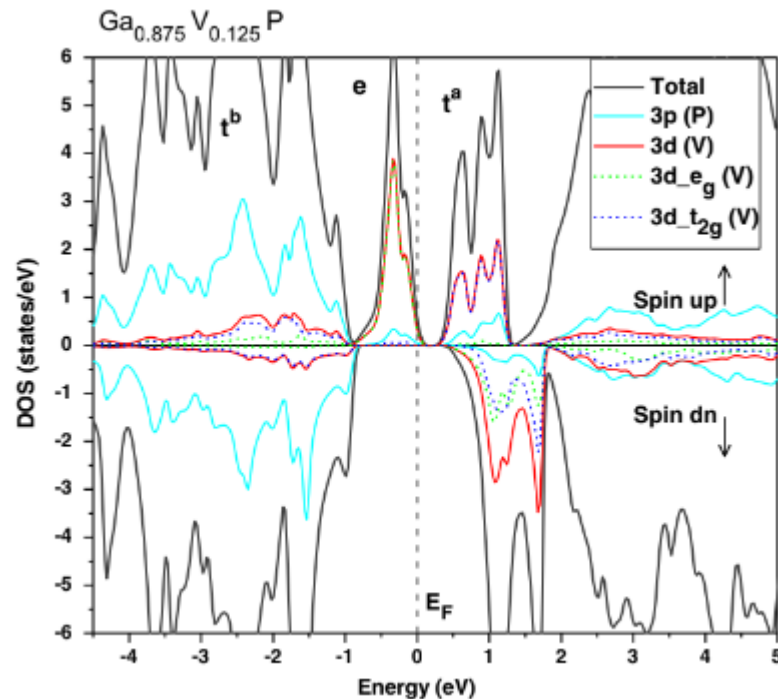


Figure III-13 DOS total et partiel polarisés en spin de (3p) de P et (3d, 3d – eg, 3d – t_{2g}) de V dans la supercellule pour Ga_{0.875}V_{0.125}P. Le niveau de Fermi est mis à zéro (ligne pointillée) (figure de couleur en ligne)

III-2-2 demi-métallique ferromagnétique HMF :

Le concept de demi-ferromagnets métalliques a été introduit par deGroot et al, sur la base des calculs de structure de bande dans les phases semi-Heusler NiMnSb et PtMnSb. En raison du désaccouplement ferromagnétique, l'une des sous-bandes de spin (généralement la sous-bande spin majorée ou spin-up) est métallique, alors que le niveau de Fermi tombe dans un intervalle de l'autre sous-bande (spin-down).

Les conditions évidentes pour l'apparition de cette nouvelle classe de matériaux sont l'existence de bandes étroites et les lacunes énergétiques dans le spectre d'énergie, et de fortes interactions ferromagnétiques.

Les demi-métaux sont le cas extrême de ferromagnets puissants (ou ferromagnétiques saturés Hubbard), où non seulement les électrons 3d sont entièrement polarisés, mais aussi d'autres bandes spin-sp (sp) ne traversent pas le niveau de Fermi

Tableau III-2 : Écart de bande ferromagnétique semi-métallique calculé E_g , espace semi- métallique G_{hm} de spin minoritaire et semi-métallique ferromagnétique (HMF) ou

Comportement ferromagnétique métallique (MF) pour $Ga_{1-x}TM_xP$ (TM = V, Cr et Mn) à des concentrations ($x = 0,125$ et $0,25$)

Composé	Concentration (x)	E_g (eV)	G_{hm} (eV)
$Ga_{0,75}V_{0,25}P$	0.25	1.417	0.027
$Ga_{0,875}V_{0,125}P$	0.125	1.192	0.273
Gap	0	2	//

En revanche, on peut décrire un nouveau paramètre d'un gap demi-métallique G_{hm} dans les états des spins minoritaires.

Il est déterminé comme étant le minimum entre l'énergie la plus basse des spins majoritaires et (spins minoritaires) des bandes de conduction (BC) par rapport au niveau de Fermi, et les valeurs absolues de l'énergie la plus élevée des spins majoritaires et (spins minoritaires) des bandes de valence (BV) [1].

Le tableau **III-2** représente les calculs des énergies des gaps semi-métalliques ferromagnétiques E_g (eV) et les gaps semi-métalliques G_{hm} (eV) des spins minoritaires des composés $Ga_{0,75}V_{0,25}P$ et $Ga_{0,875}V_{0,125}P$.

III-3 Propriétés magnétiques :

Le calcul des moments magnétiques du composé $Ga_{0,75}V_{0,25}P$ et

$Ga_{0,875}V_{0,125}P$ sont de $2\mu_B$ (magnéton Bohr), la contribution principale du moment magnétique total revient au moment magnétique de V, et à cause de l'hybridation p-d, des petites contributions des moments magnétiques sont induites sur les autres sites (Ga, P) et interstitiels.

Tableau III-3 : Moment magnétique total et local calculé (en magnétons de Bohr μ_B) dans les sphères muffin – étain et dans les sites interstitiels pour $Ga_{1-x}TM_xP$ (TM = V, Cr et Mn) à des concentrations ($x = 0,0625$ et $0,25$)

Composé	Concentration(x)	Total(μ_B)	(V) (μ_B)	Ga (μ_B)	(P) (μ_B)	Intersite(μ_B)
$Ga_{1-x}V_xP$	0.25	2	1.628	0.078	-0.094	0.390

$Ga_{1-x}V_xP$ 0.125 2 1.639 0.046 -0.096 0.372

Le calcul des moments magnétique totaux et locaux du $Ga_{1-x}V_xP$ montre le bon accord avec les résultats théorique.

Aussi ne remarque que le moment magnétique local au tour de l'atome de phosphore est négatif qui indique que l'interaction est antiferromagnétique entre les moments des spins de V et les moments des spins des atomes Pd'autre part l'interaction ferromagnétique est observée entre les moments des spins des atomes V et les moments des spins des atomes Ga.

Références

- [1]:Heyd, .F, Peralta, J. E., Scuseria, G. E., Martin, R. L.: J. Chem.Phys. 123, 174101 (2005).
- [2]:F.D Murnaghan, Proc.Natl. Acad. Sci. USA30; 5390 (1944).
- [3] : Thermodynamique des matériaux (TM Volume 5) - De l'élaboration des matériaux à la genèse des microstructures, Gérard Lesoult, Presses Polytechniques Universitaires Romandes (PPUR) - Collection : Traité des Matériaux, 2010, (ISBN 978-2-88-074-690-2), paragraphes 3.6.8 et 5.8.5
- [4] : Tran, F., Laskowski, R., Blaha, P., Schwarz, K.: Phys. Rev. B 75, 115131 (2007)
- [5]:Heyd, J., Peralta, J.E., Scuseria, G.E., Martin, R.L.: J. Chem. Phys. 123, 174101 (2005)
- [6]: Wang, S.Q., Ye, H.Q.: Phys. Rev. B 66, 235111 (2002)
- [7]: Szczytko, J., Twardowski, A., Swiatek, K., Palczewska, M., Tanaka, M., Hayash, T., Ando, K.: Phys. Rev. B 60, 8304(1999).
- [8]: Sasaki, Y., Liu, X., Furdyna, J.K., Palczewska, M., Szczytko, J., Twardowski, A.: J. Appl. Phys. 91, 7484(2002).
- [9]: Sato, K., Katayama-Yoshida, H.: Jpn. J. Appl. Phys. 40, L4

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans ce travail, et à l'aide de la méthode des ondes planes augmentées et linéarités FP-LAPW basée sur la théorie DFT, introduite dans le code WIEN2K, les simulations de type ab-initio pouvaient venir compléter, voire même se substituer aux données expérimentales. Les calculs théorique sont en mesure d'apporter un appui à l'expérience en confirmant des hypothèses ou en apportant une interprétation fondamentale à un phénomène concret. nous avons étudié les propriétés structurales, électronique et magnétiques des semi-conducteur III-V nous nous intéressant au phosphure de Galium GaP et sont ternaire $Ga_{1-x}V_xP$, la concentration de l'impureté en métal de transition est fixée à 0.25 .

Dans la première partie de ce mémoire nous avons réalisé un calcul sur la structure binaire pour déterminer diverses propriété de semi-conducteur GaP .Les paramètres de maille, le module de compressibilité ainsi que sa dérivée par rapport à la pression qui ont montré une bonne concordance avec les données expérimentales.

Par l'utilisation de l'approximation $Ga_xV_{1-x}P$ nous avons calculer les paramètres de l'état fondamental tels que le paramètre de réseau , le module de compressibilité , la première dérivée de module de compressibilité des deux matériaux binaire GaP et ternaire $Ga_xV_{1-x}P$ confronté a d'autres travaux, nos résultats paraissent très significatifs par rapport aux récents calculs théoriques avec la même méthode GGA-WC.

Les résultats des propriétés électroniques, nous ont permis de constater en détails le caractère demi-métallique ferromagnétique du composé $Ga_xV_{1-x}P$. Les structures électroniques ont montré que les spins majoritaires sont métalliques à cause de l'existence d'une forte hybridation entre les états p de l'atome (P) et les états 3d de l'atome de vanadium (V) et qui dominant le niveau de fermi. Tandis que les spins minoritaires sont semi-conducteurs qui sont caractérisés par un gap demi-métallique. Quant aux propriétés magnétiques, le moment magnétique total est un nombre entier égal $2 \mu_B$ qui confirme le caractère demi-métallique des matériaux $Ga_xV_{1-x}P$ étudiés.

Nous avons montré que le matériau ternaire présente un caractère demi-métallique car il est conducteur dans la région des spins majoritaires et il est semi-conducteur dans la région des spins minoritaires.

Conclusion générale

Notre travail montre aussi de nouvelles propriétés magnétiques qui caractérisent le $\text{Ga}_{1-x}\text{V}_x\text{P}$. La totalité de l'effet magnétique est apparue à partir de l'atome de métal de transition. Alors le semi-conducteur dilué à base de Gallium est un matériau magnétique avec spin polarisé à 100%.

En fin nous avons prédit que le $\text{Ga}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{P}$ et $\text{Ga}_{0.875}\text{V}_{0.125}\text{P}$ à la concentration 0.25 et 0.125 de vanadium dopé est des matériaux demi-métalliques ferromagnétiques avec une polarisation en spin magnétique égale à 100%, et ils semblent d'être des candidats potentiels pour les applications de l'électronique de spin.

Résumé: Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire concerne l'utilisation de la théorie de la fonctionnelle de la densité pour déterminer les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des nouveaux matériaux $Ga_{1-x}V_xP$ dans la concentration 0.25 et 0.125 de vanadium. Il est constitué essentiellement de trois parties distinctes:

La première partie : une description du matériau semi-conducteur III-V à base de vanadium, et le spintronique et leur DMS.

La deuxième partie : Présentation de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, ainsi que le principe de la méthode « FP-LAPW » implémenté sur le code Wien2k.

La troisième partie : comporte toutes les interprétations des propriétés structurales, électroniques et magnétiques de la structure binaire et des composés ternaires de $Ga_{1-x}V_xP$ à la concentration 0.25 et 0.125 de vanadium, nous constatons que nos matériaux sont demi-métalliques ferromagnétiques et qu'ils induisent un moment magnétique total égales à 2.

Mots clés : DMS, DFT, spintronique, Gap, semi-métallique.

Abstract: In This Works we use de density functional of theory to study the structural, Electronic and magnetic properties of new materials $Ga_{1-x}V_xP$ at concentration 0.25, 0.125 of vanadium impurity, its formed essentially from three parts:

First part: A description of semiconductors materials of III-V class basis on vanadium and general notions of spintronic field and DMSs materials.

Second part: Presentation of density functional of theory and of the first principal Method FP-LAPW as implemented in Wien2K code.

Third part: All interpretations and discussions of the structural, electronic and Magnetic properties of the binary and the ternaries materials of $Ga_{1-x}V_xP$ at $x=0.25$ and 0.125 of vanadium impurity, We found that our material are half-metallic Ferromagnetic and exhibit a magnetization of 2 Keys words: DMS, DFT, spintronic, Gap, half-metallic.

ملخص : في هذا العمل نستخدم ديكثافة وظيفية من الناحية النظرية لدراسة الخصائص الهيكلية و الالكترونية و مغناطيسية

0.125 من الفناديوم شكلت اساسا من ثلاث , عند تركيز 0.25 $Ga_{1-x}V_xP$ للمواد الجديدة

الجزء الاول : وصف لأشباه الموصلات من أساس الفئة III-V على الفناديوم و المفاهيم العامة من المجال الالكترونيات الدورانية و اشباه الموصلات المغناطيسية المخفف

الجزء الثاني: عرض الكثافة الوظيفية للنظريتي أو لطريقتي الرئيسية FP-LAPW كما تمت تنفيذها في شفرة Wien2K

الجزء الثالث: جميعا لتفسيرات و المناقشات حول الخصائص الهيكلية و الالكترونية و المغناطيسية للمواد الثنائية و الاحادية من $Ga_{1-x}V_xP$ في $x=0.25$ و 0.125 من الفناديوم وجدنا ان موادنا هي نصف معدنية مغناطيسية معرض مغنطة $2U_B$

الكلمات المفتاحية : أشباه الموصلات المغناطيسية المخفف، الالكترونيات الدورانية، نظرية الوظيفية الكثافة الفجوة نصف معدني

