

Coordonnées de talbi Khedija

Non : Talbi

Prénom : khedidja

Date et lieu de naissance : 25 Avril 1977 Saida

Adresse : 600 Logts Laropal Bloc G5 numéro 15 RELIZANE 048000

Numéro de téléphone :

Email : cherchab@yahoo.f

Diplôme à préparer : **DOCTORAT EN PHYSIQUE**

Spécialité : **Sciences des Matériaux**

Intitulé :

**ETUDE OPTO-ELECTRONIQUE DES SUPERRESEAUX A
COURTES PERIODES**

كلمات المفتاح: IIIB-Nitrures الشبكات الممتازة، السبائك المشكلة الخواص البنائية، الخواص الالكترونية و الخواص الضوئية الخواص الميكانيكية.

ملخص:

الاهتمام المتزايد في هذه السنوات الأخيرة بالمواد IIIB-Nitrures قد شجعنا على مباشرة دراستنا لهذا الموضوع و محاولة الإجابة على السؤال الآتي : هل يمكن للمواد IIIB-Nitrures أن تكتسي نفس أهمية المواد IIIA-Nitrures المجاورة لها وذلك بالنسبة لصناعة مركبات جديدة ذات نابعيه ؟ و هذا ما أدى بنا إلى القيام بهذا العمل حيث قمنا بدراسة الخواص البنائية، الالكترونية و الضوئية للمواد IIIB-Nitrures و لقد ابتدأنا بدراسة الثنائيات (YN ; ScN) ثم الشبكات الممتازة و السبائك المشكلة بواسطة هذه الثنائيات. ولقد استعملنا طريقة FP-LMTO و المتمثلة في البرنامج ImtART . و لقد توصلنا الى النتائج التالية :

- بالنسبة للثنائيات (YN ; ScN) :
- 1. توصلنا إلى أن هذه الثنائيات المتمثلة في (YN ; ScN) لهما سلوك شبه ناقل مع إنتقال أساسي غير مباشر بين Γ -X ، وهذا الأخير وجدنا أنه يتأثر باختيار نصف القطر (muffin tin) من جهة، و يتأثر أيضا بمدى درجة التهيج بين المدار d ل Y(Sc) والمدار p ل N من جهة أخرى.
- 2. لقد أثبتنا التغيير في الحالة البنائية من B1 إلى الحالة B2 تحت ضغط كبير و هذا ما يؤكد مقاومة هاتين المادتين مع العلم أنهما يمتلكان نقطة ذوبان عالية .
- 3. المواد YN و ScN يكتسبان رابطة تكافئية قطبية هذا يعني أنهما يمتلكان تصرف مزدوج شاردي و تكافئي.
- 4. لقد قمنا بفحص الخواص الضوئية مثل الثابت الكهربائي السكوني و ثابت الانكسار و معامل الامتصاص.
- بالنسبة للشبكة الفانقة $(ScN)_n/(YN)_n$
- 1. قمنا ببناء شبكة ممتازة $(ScN)_n/(YN)_n$ مرتكزين على الثنائيات YN و ScN بحيث مجموع الطبقات $u+v=2,4,6,8$ هو عدد زوجي، ونضع فيما يلي $u=v=n$.
- 2. الانتقال الأساسي لهذه الشبكات الممتازة عبارة عن انتقال مباشر و هذا رغم أن المواد المشكلة له تتميز بانتقال غير مباشر و لقد اعتبرنا أن سبب هذه الظاهرة يمكن أن يكون ما يسمى ب zone-folding .
- 3. لقد درسنا كثافة الحالات (DOS)، حيث لاحظنا أن تأثير الطبقات يكون متوازنا من أجل n صغير ثم يصبح مختلفا مع زيادة n أي مع سمك المنطقة النشطة لشبكة الذي يؤثر اعتباريا على (DOS).
- 4. قمنا أيضا بحساب و تبين الخصائص الضوئية لهذه الشبكات الممتازة.
- بالنسبة للسبائك $(Sc_xY_{1-x}N)$
- 1. لقد قمنا ببناء خلية مكعبة من 8 ذرات (4 ذرات Y و 4 ذرات N) و في كل مرة ندخل ذرات غريبة من ذرات Sc.
- 2. لقد وجدنا أن التغيير في نسبة التركيز يتبعه تزايد ثابت الشبكة مصحوب بتضاؤل في معيار الانضغاط.
- 3. الانتقال الأساسي هو عبارة عن انتقال مباشر عند Γ و هي نفس الملاحظة التي في الشبكات الممتازة. و قيمة هذا الانتقال المباشر في تزايد مع التغيير في نسبة تركيز ذرات Sc .
- 4. من أجل إثبات أن ظاهرة zone-folding لها دخل في حدوث الانتقال الأساسي من غير المباشر إلى المباشر، فقد قمنا بإعادة حساب الثنائيات ScN و YN مرة أخرى مع اخذ خلية مضاعفة مثل مركبات الممزوجة الثلاثية و هذا ما سمح بحدوث ظاهرة zone-folding في الثنائيات ScN و YN الذي بدوره أدى إلى إحداث الانتقال المباشر.
- 5. لقد قمنا بحساب معامل الانعراج للسبائك حيث تم استخدام طريقة Zunger و مقارنته مع التقريب التربيعي لكثير الحدود.
- 6. تم تحديد معاملات المرونة كما تم حساب كميات أخرى مرتبطة بالخواص الميكانيكية. حيث تم استخلاص ان هذه المركبات مستقرة و متكافئة الاتجاهات و كذلك تملك هذه المركبات تصرف شاردي و تكافئي بدرجات متفاوتة.

Mots Clé : IIIB-Nitrures, les superréseaux, les alliages ternaires, les propriétés structurales, les propriétés électroniques, les propriétés optiques, les propriétés mécaniques.

Résumé :

L'intérêt croissant durant ces dernières années pour les IIIB-Nitrures, nous a encouragés à effectuer notre travail sur ces matériaux, et d'essayer de contribuer à la réponse de la question suivante : Est-ce que les matériaux IIIB-Nitrures peuvent être aussi intéressants que leurs cousins les matériaux IIIA-Nitrures, pour la conception des nouveaux composants efficaces ? Par conséquent, nous avons étudié dans ce travail, les propriétés structurales, électroniques et optiques des matériaux à base de IIIB-Nitrures, en débutant par les binaires (YN et ScN), en suite, les superréseaux et les alliages ternaires à base de ces deux binaires. Nous avons utilisé la méthode FP-LMTO telle qu'elle est implémentée dans le code lmtART. Nous avons abouti aux conclusions suivantes :

- **pour les binaires (YN, ScN)**

1-Les deux matériaux ont un comportement semi-conducteur avec un gap indirect entre Γ -X qui est influencé par le choix de rayon muffin tin, d'une part et par le degré d'hybridation entre l'état d de l'atome Y(Sc) et de l'état p de l'atome de Niture d'autre part.

2-Nous avons confirmé la transition de la phase B1 vers la phase B2, avec une pression de transition très élevée qui montrent que ces matériaux sont très résistifs, en plus du fait qu'ils ont un point de fusion très élevées.

3-Les deux matériaux YN et ScN possèdent une liaison covalente polaire c.à.d. en trouvent les deux caractères ionique et covalent.

4-Nous avons examiné les propriétés optiques telles que la constante diélectrique statique, l'indice de réfraction et le coefficient d'absorption.

- **pour les superréseaux (ScN)_n/(YN)_n**

1-Nous avons construit les superréseaux sur la base des deux matériaux YN(B1) et ScN(B1) de sorte à avoir (ScN)_u/(YN)_v avec $u+v$ =nombre pair =2,4,6,8, on pose par la suite $u=v=n$.

2-Le gap de ces superréseaux est direct malgré qu'il soit formé à partir des matériaux parents de gaps fondamentaux indirects. Nous avons supposé que le phénomène de zone-folding qui est la cause.

3-Après examen de la contribution des couches (layers) du superréseau à la densité d'état (DOS), nous avons trouvé que la contribution des couches était équitable pour les superréseaux avec $n=1, 2$, tandis que l'augmentation de l'épaisseur de la zone active du superréseau (donc de n) affectait significativement le DOS.

4-Nous avons aussi calculé et présenté les propriétés optiques de ces superréseaux.

- **pour les alliages (Sc_xY_{1-x}N)**

1-Nous avons considéré une cellule cubique de huit atomes (4 atomes de Y et 4 atomes de N) et chaque fois en incorpore des atomes étrangère de type Sc.

2-Nous avons une croissance de paramètre de réseau accompagnée par une décroissance de module de compressibilité en fonction de la variation de la concentration.

3-Le gap fondamental est direct (fait observé précédemment dans les superréseaux) et sa valeur croît avec le pourcentage en atomes de scandium.

4-Pour confirmer que le phénomène de zone-folding est pour quelque chose dans ce gap direct qu'on observe dans les ternaires et qu'on a observé dans les superréseaux, nous avons recalculé les binaires ScN et YN mais en adoptant la même cellule multiple que les ternaires, ce qui donne les courbes de Sc₀Y₁₀₀N et Sc₁₀₀Y₀N de la figure V-5. L'utilisation de la cellule multiple permet de provoquer le zone folding dans la structure de bandes des binaires qui a alors engendré un gap direct.

5-Nous avons calculé le paramètre de courbure de l'alliage en utilisant méthode développée par Zunger et nous avons effectué une comparaison avec l'ajustage quadratique.

6-Les constants élastiques ont été déterminés en plus d'autres quantités qui sont liées aux propriétés mécaniques. Nous avons trouvé que ces composés sont stables et isotropes et qu'ils ont un comportement covalent ou ionique à des degrés différents.

Key Words: IIIB-Nitrides, superlattice, alloy, structural properties, electronic properties, optical properties, mechanical properties.

Abstract:

The great interest during the few last years about IIIB-Nitrides, we encouraged to affect our work on these materials, and trying to response to the next question: can the IIIB-Nitrides interested as IIIA-Nitrides for the conception of the efficacies novels components? consequencely, we have study in our work, the structural, electronic and optical properties of the IIIB-Nitrides materials; firstly the bulks (YN and ScN), secondary the superlattice and finally the alloy based on the two binary. We have used FP-LMTO method implemented in the LmtARTcode. We have obtained the following conclusions:

- **For the binary (YN and ScN):**

- 1- The two materials are a comporment semi-conductor with indirect gap between Γ -X where it is influenced by the choice of Rmt and otherwise by hybridization degrees between d state of Y(Sc) and p state of atom of Nitride.
- 2- We have confirmed that the transition phase between B_1 and B_2 at very high pressure, where these materials are very resistant.
- 3- The two materials YN and ScN have a polar covalent binding (i;e we have two characters covalent and ionic together with different degrees).
- 4- We have examined the optical properties like the statistic dielectric constant, refraction index and absorption coefficient.

- **For the Superlattice (ScN)_u/(YN)_v**

- 1- we have constructed the superlattices based on the two materials YN(B_1) and ScN(B_1) to product (ScN)_u/(YN)_v with $u+v=$ even number =2,4,6,8, we suppose $u=v=n$.
- 2- The gap of these superlattice are direct, in spite of it formed parent where it has an indirect gap, we suppose that the zone folding phenomena is responsible.
- 3- After the examination of the contribution of layers of superlattice on the density of state (DOS), we have confirmed that, the contribution of the layers are equitable for the superlattice $n=1,2$, while the augmentation of layers of active zone of superlattice affect significantly on the DOS.
- 4- We have also calculated and presented the optical properties of superlattice.

- **For the Alloys (Sc_xY_{1-x}N)**

- 1- We have considered a cubic cell of eight atoms (4atoms of Y and 4 atoms of N) and we incorporate a strong atom of Scandium.
- 2- We have an increasing of lattice constant accompanied with decreasing of bulk modulus according to Sc%.
- 3- The fundamental gap is direct (observed in the superlattice previously) and it value augmented with Sc%.
- 4- to demonstrate the zone folding phenomena and it responsibility to the direct gap nature, observed in the superlattice and alloy, we have recalculated the binary YN and ScN but now we have to choice the same multiple as the Alloy, we obtained Sc₀Y₁₀₀N and Sc₁₀₀Y₀N shown in the figure V-5. The used of multiple cell allow to produce the zone folding in the bands structures of binary with gap direct nature.
- 5- We have calculated the bowing parameters of the Alloys according to Zunger method and we have compared it to the quadratic fit.
- 6- The elastic constants are determinate and other quantities are deduced from the mechanical properties, we have proofed that these materials are stables, isotropic and possess a comporment covalent and ionic with different degree.