

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

Pour l'Obtention du Diplôme de Master en physique

Option : **physique des matériaux**

THÈME :

L'impact de la variation de la contrainte uni-axiale sur la
piézoélectricité du ZnO et GaN

Etudiante : « **BELHAMITI Batoul** »

Encadrant : « **Dr. MESKINE Saïd** »

Membres du jury de soutenance :

Présidente : « **M^{lle}. MEGHOUFEL.Z** »

Examineur : « **Mr. ABBASSA.H** »



Laboratoire d'Elaboration et Caractérisation Physico Mécanique et Métallurgique des Matériaux
ECP3M

Année Universitaire 2018-2019

Dédicas

Je dédie ce modeste travail à mes chers parents

Aux personnes dont j'ai bien aimé la présence dans ce jour :

A tous mes enseignants

A mon frère amine.

Mes sœurs yesmine, ilhem et israa.

A tous la famille BELHAMITI et AMELLAL.

Spécialement a ma tante HAMA et ma voisine MOSTEFA Fouzia.

*A mes meilleurs amies KHATTAB CHAMS EDDOUHA SARA, NORA
et ZEROUAL ABIR NOUR ELHOUDA.*

A tous ceux qui me reconnaitront.

Remerciement

Tout d'abord, je remercie ALLAH qui m'a donné la force et la patience pour effectuer ce modeste travail.

Je tiens tout d'abord à exprimer ma reconnaissance à Monsieur BOUKORTT Abdelkader directeur du laboratoire d'élaboration et caractérisation physico-mécanique et métallurgique des matériaux (ECP3M) à la faculté des sciences et technologies, Université Mostaganem, pour m'avoir accueillie au sein de son laboratoire.

Mes sincères remerciements à mon encadreur Mr MESKINE SAID Sans lui ce travail n'existerait tout simplement pas, merci de m'avoir guidé tout au long de ce travail, de patienté et tes précieux remarque, je vous dis vraiment merci !

*Je voudrais remercier tous mes enseignants de la Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique, sans oublier notre chef département Mr **ABBES Charef** et tous les employés du département qui nous aidés, conseillés et guidés afin de finaliser ce travail dans de bonnes conditions.*

Mes sincères remerciements sont adressés aux membres du jury pour d'avoir accepté d'expertiser mon travail.

Enfin, je remercie ma famille, et tout particulièrement mes parents, ma mère et mon cher père, mon frère, mes sœurs et sans oublier mes meilleurs amis CHEMS EDDOUHA et ZEROUAL ABIR NOUR ELHOUDA qui m'ont toujours soutenu pendant ma vie et mes études.

*A tous, et à ceux que j'ai oublié de citer, je vous envoie un grand **MERCI** !*

Liste des figures

Figure N°	Titre de la figure	Page
Figure I-1	Cristal piézoélectrique : a) soumis à une contrainte de tension ou de compression, b) sous l'effet d'une polarisation électrique positive ou négative	5
Figure I-2	Classification des cristaux selon leurs symétries	6
Figure I-3	Exemple matériaux piézoélectrique	8
Figure I-4	Phases cristallines des matériaux III-V, a) Wurtzite, b) Zinc-blende et c) sel gemme.	12
Figure I-5	Structure cristallographique du ZnO (Würtzite).	13
Figure I-6	La structure de bande pour différentes structures cristallographique du ZnO	13
Figure I-7	Nombre d'articles sur la base de recherche Science Direct	15
Figure II-1	Représentation de la maille élémentaire pour ZnO et GaN.	22
Figure II-2	Courbe d'optimisation du volume du ZnO	24
Figure II-3	Courbe d'optimisation du volume du GaN	24
Figure II-4	Courbe d'optimisation du rapport c/a pour ZnO	25
Figure II-5	Courbe d'optimisation du rapport c/a pour GaN	26
Figure II-6	Courbe d'optimisation du paramètre a du ZnO pour une compression de -1%.	27
Figure II-7	Zone de Brillouin pour le groupe d'espace P6₃mc .	28
Figure II-8	Structure de bandes et densité d'états du ZnO	29
Figure II-9	Structure de bandes et densité d'états du GaN	29
Figure II-10	courbe du gap ZnO et GaN	30
Figure II-11	Densité d'états partielle de ZnO	31
Figure II-12	Densité d'états partielle du GaN.	32
Figure II-13	densité de charge pour les deux composent ZnO et GaN.	33
Figure II-14	courbe de l'indice du réfraction n de ZnO et GaN cadre	34

Figure II-15	courbe coefficient d'absorption ($\lambda=575\text{nm}$) du ZnO et GaN.	35
Figure II-16	Courbe de polarisation P du ZnO et GaN.	36
Figure II-17	coure de piézoélectrique du ZnO et GaN	37

Liste des tableaux

Tableau N°	Titre du tableau	Page
Tableau I-1	Différentes propriétés de ZnO et GaN	11
Tableau I-2	Constantes piézoélectriques de GaN et ZnO	14
Tableau II-1	Les données d'entrée pour le ZnO et GaN	22
Tableau II-2	Paramètres obtenus après optimisation pour le ZnO et GaN	26
Tableau II-3	Les valeurs des énergies des bandes direct (gap) pour différent contrainte	30

Sommaire

Introduction générale	1
Chapitre I : la piézoélectricité et les propriétés du ZnO et GaN	4
I.1 piézoélectricité	5
I.2 champs d'applications.....	6
a) L'effet directe.....	6
b) L'effet inverse	8
I.3 Matériaux piézoélectriques	8
I.3.1 Céramiques	9
I.3.2 polymères	9
I.3.3 Monocristaux semi-conducteurs	10
I.4 Matériaux piézoélectrique ZnO et GaN	11
I.4.1 Cristallographie du ZnO et GaN	11
I.4.2 structures électroniques de bande	13
I.4.3 piézoélectrique dans ZnO et GaN	14
I.4.4 Applications du ZnO et GaN	15
I.5 Code de calcul utilisé	16
I.5.1 Introduction	16
I.5.2 Description du code Wien2k	17
Chapitre I : la piézoélectricité et les propriétés du ZnO et GaN	20
II.1 Introduction	21
II.2 Détails de calcul.....	21
II.3 Optimisation des paramètres structurales	22
II.3.1 Optimisation du volume :	23
II.3.2 Optimisation du rapport c/a :	25
II.4 Optimisation du paramètre a avec contrainte (pression uni-axiale) :	27
II.5 Propriétés électroniques.....	27

II.5.1 Densité d'états et structure de bandes.....	28
II.5.2 Densité de charge.....	32
II.6 Propriétés optiques :	33
II.6.1 Indice de réfraction n :.....	33
II.6.2 Coefficient d'absorption α :.....	35
II.7 Piézoélectricité.....	36
II.7.1 Polarisation :	36
II.7.2 Constante piézoélectrique e_{zz}	37
Conclusion générale	39
Références	41

Introduction générale

Introduction générale

Ces dernières années, les applications mettant en œuvre les matériaux piézoélectriques se sont considérablement développées. Ils sont particulièrement intéressants, en raison de leur tension élevée et de leur configuration compacte s'intégrant facilement dans la conception de petits appareils autoalimentés. Bien que la piézoélectricité connaisse depuis de nombreuses années une attirance exponentielle avec les progrès technologiques actuels, elle apparaît sur certains matériaux à la propriété naturelle de produire une charge électrique en leur surface lorsqu'ils sont soumis à une contrainte mécanique.

Ce principe a été découvert par les frères Pierre et Jacques Curie en 1880 suite à l'observation de certains cristaux de quartz : C'est l'effet piézoélectrique direct. L'année suivante, le physicien français Gabriel Lippman découvre l'existence de l'effet inverse. En appliquant une charge électrique à l'un des cristaux, on obtient sa déformation.

Parmi les matériaux piézoélectriques il existe une famille de matériaux semi-conducteurs à une meilleure propriété piézoélectrique : Les matériaux nitrures d'élément III (GaN, AlN, InN et leurs alliages) et l'oxyde du zinc en particulier. Ces derniers, cristallisant dans la phase wurtzite avec une structure hexagonale, sont caractérisés par une polarisation interne très intense qui résulte de la combinaison d'une polarisation spontanée et d'une polarisation piézoélectrique. La polarisation spontanée existe dans la structure à l'équilibre et se manifeste aux interfaces du matériau avec le vide ou avec un matériau de nature différente.

Dans cette étude, nous utilisons le calcul du premier principe de la DFT implantés dans le code de simulation Wien2k pour étudier les différentes propriétés et la piézoélectricité en particulier des deux matériaux ; l'oxyde de Zinc (ZnO) et le nitrure de Galium (GaN).

Ce mémoire, en plus d'une introduction et d'une conclusion générale est organisé de la manière suivante :

Le premier chapitre est consacré à la description du phénomène de la piézoélectricité et ses domaines d'application. Une deuxième partie de ce chapitre est consacrée aux matériaux que nous allons les étudier (ZnO et GaN).

Afin de mieux aider le lecteur à la compréhension de notre travail, le deuxième chapitre est débuté par une brève description du code du calcul Wien2k ainsi que les étapes principales pour

faire un calcul des propriétés. Dans la dernière partie de ce chapitre et afin de mieux comprendre le phénomène de la piézoélectricité, nous présentons et discutons nos résultats de calcul des propriétés structurales, électroniques, optiques et enfin piézoélectriques du ZnO et GaN, en faisant le point sur la polarisation spontanée et la constante piézoélectrique de ces deux matériaux.

Enfin, nous présentons une conclusion générale de ce travail à la fin du mémoire.

Chapitre I

La piézoélectricité et les propriétés du ZnO et GaN

I.1 piézoélectricité

Le terme piézoélectrique nous vient du grec « piézéin » signifiant presser ou appuyer. C'est un phénomène physique présent dans certains matériaux ayant une structure cristalline bien spécifique.

Il s'agit d'une polarisation électrique induite par une déformation mécanique du dipôle élémentaire de la maille cristalline, c'est l'effet piézoélectrique direct (figure I-1, a). Inversement, l'application d'un champ électrique induit une déformation mécanique du matériau, c'est l'effet inverse (figure I-1, b).

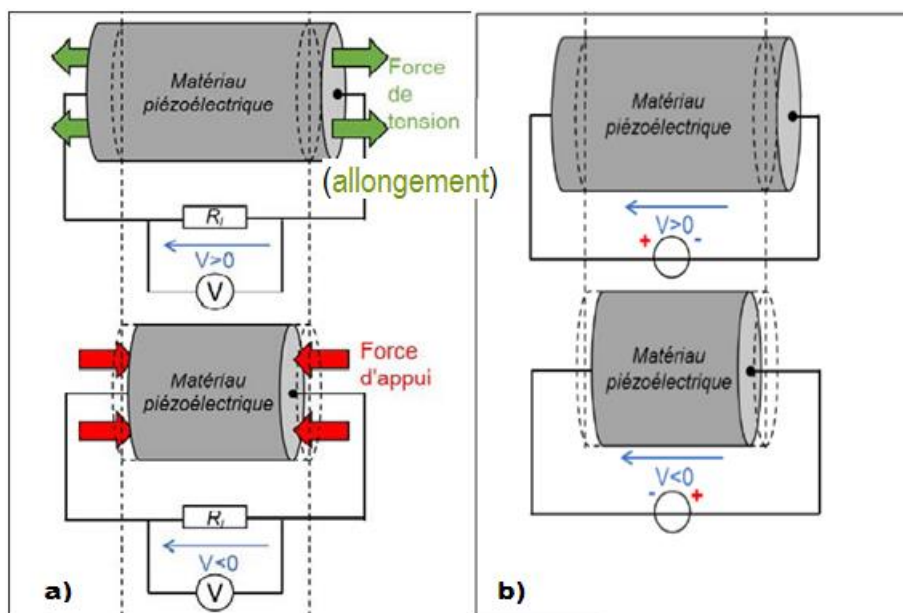


Figure I-1 Effet piézoélectrique : a) soumis à une contrainte de tension ou de compression, b) sous l'effet d'une polarisation électrique positive ou négative.

Dans la matière cristalline, l'effet piézoélectrique n'est présent que sous certaines conditions : la maille du cristal doit être constituée d'au moins deux éléments liés par des liaisons ioniques, et ne pas présenter d'une symétrie d'inversion. Parmi 230 groupes d'espace regroupés en 32 classes cristallines, 21 sont non centro-symétrique (dépourvues d'un centre d'inversion) parmi c'est 21 on a 1 est non piézoélectrique car tous ses coefficients piézoélectriques sont nuls. Il n'y a donc que 20 classes piézoélectriques (figure I-2).

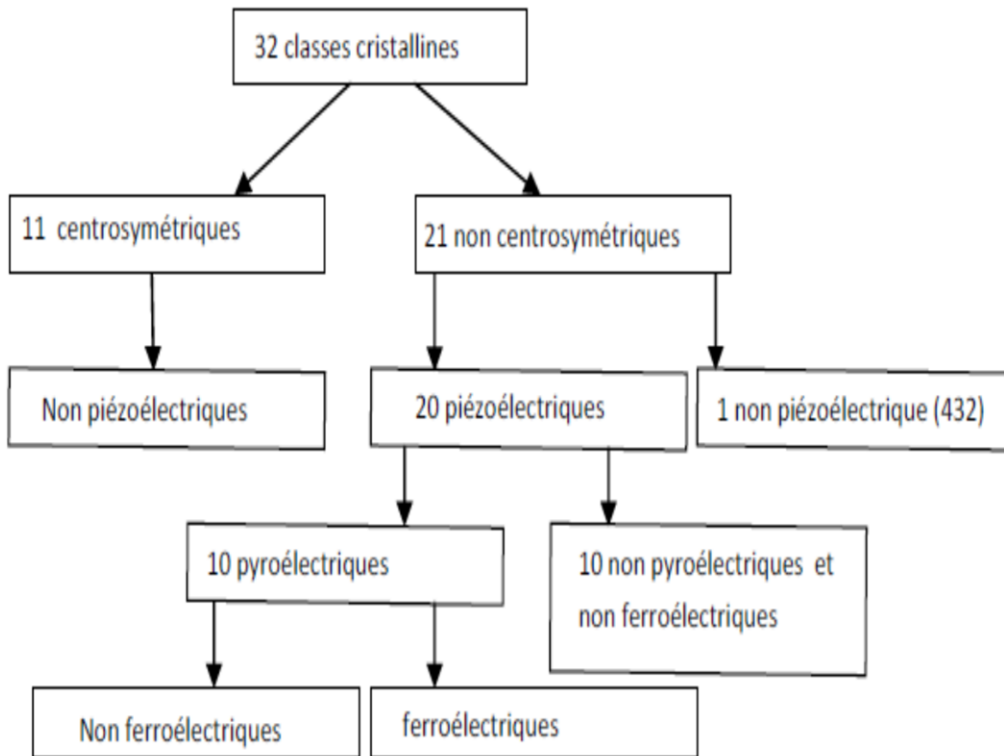


Figure I-2 : Classification des cristaux selon leurs symétries.

Parmi ces 20 classes piézoélectriques, on a 10 d'entre elle sont non pyro-électriques et non ferroélectriques, et 10 autres elles présentent un axe polaire unique et correspondent à des cristaux polaires, sont dits pyro-électrique. Une de leurs caractéristiques essentielles est que la polarisation spontanée varie avec la température.

Parmi ces 10 classes pyro-électrique, offrent la possibilité d'une inversion de polarisation par l'application d'un champ électrique ; ce sont les ferroélectriques (figure I-2). [1]

I.2 champs d'applications

Les matériaux piézoélectriques, trouvent de plus en plus de champ d'application qui augmente au fil du temps, et ce dans différents domaines :

a) L'effet directe

➤ Capteurs

La première application industrielle et la plus présente de nos jours des piézoélectriques est pour des capteurs, ils sont appelés transducteurs piézoélectriques. Grâce à la capacité des

piézoélectriques de créer une tension dès qu'une force leur est appliquée, ils sont utilisés pour une grande variété de capteurs comme le microphone, la télécommande, accéléromètre.

➤ Générateurs d'impulsion haute tension

L'allume-gaz et le briquet « électronique » sont des exemples de la manière dont les piézoélectriques permettent de produire de fortes tensions. L'effet piézoélectrique direct permet de produire de très fortes tensions, supérieures à la tension de claquage de l'air 30 kV/cm pour un écartement de quelques millimètres. Lorsque cette tension est atteinte, une étincelle de décharge est produite et mise à profit pour allumer le gaz du briquet ou de la gazinière.

Production d'énergie

❖ À petite échelle :

✚ Le briquet piézoélectrique : le briquet piézoélectrique est un exemple de création d'un arc. En appuyant sur le bouton, l'élément piézoélectrique reçoit une pression.

L'élément piézoélectrique transforme l'énergie mécanique en énergie électrique.

✚ La production de l'énergie en marchant : il existe aussi des chaussures pour produire de l'énergie en marchant. Un élément piézoélectrique est introduit dans les semelles d'une paire de chaussures. L'armée américaine a déjà utilisé ce système pour recharger tous les appareils électriques tels que les walkies-talkies, radios, GPS, etc. Afin de rendre les soldats électriquement indépendants.

❖ À grande échelle :

Même si cette source d'énergie n'est pas encore massivement exploitée à grande échelle, il existe des endroits où l'on commence à utiliser.

✚ Parking piézoélectrique : dans la ville de Gloucester, en Angleterre, un parking de grande surface commerciale a été équipé de matériaux piézoélectriques. Cette installation permet de récupérer de l'énergie à chaque passage de véhicule et, ainsi, d'alimenter les caisses de paiement du supermarché.

✚ Métro piézoélectrique à Tokyo : de même, dans le métro de Tokyo, le sol des stations sont équipés par des plaques piézoélectriques qui produisent de l'énergie au passage des centaines de passagers descendant des wagons.

b) L'effet inverse

➤ Transformateurs

Un transformateur piézoélectrique est un multiplicateur de tension alternative, une tension d'excitation permet de créer une contrainte alternative dans une barre d'un matériau fortement piézoélectrique. Cette contrainte permet la mise en vibration de la barre à une fréquence choisie pour correspondre à une fréquence de résonance (perçage et soudage par ultrasons, nettoyage ultrasonore, projecteur sonar).

➤ Les générateurs de vibrations

Une autre application importante dans l'industrie est celle de l'effet piézoélectrique inverse, grâce à la capacité de vibrer des matériaux piézoélectriques lorsqu'un courant leur est appliqué.

Des transducteurs piézoélectriques sont utilisés aussi pour produire du son, ils sont utilisés dans des écouteurs normaux ou flexibles, des buzzers, même dans des systèmes qui ne peuvent être écoutés que quand on les mord.

- ✚ Générateurs d'ultrasonores : Utilisées dans des appareils chirurgicaux.
- ✚ Horloges : Dans les montres, les chronomètres, un cristal de quartz vibre toujours à la même fréquence et cette vibration est mesurée et permet d'indiquer le temps écoulé.

I.3 Matériaux piézoélectriques

Les matériaux piézoélectriques peuvent être de natures différentes : monocristaux semi-conducteurs, céramiques ferroélectriques ou même polymères. Certains d'entre eux peuvent être trouvés dans la nature, tels que le quartz, la topaze, la berlinite ou même le sucre de table (figure I-3). Les autres ont été développés et synthétisés par les scientifiques.

Le quartz	La topaze	La tourmalite	La berlinite	Le sucrose
				

Figure I-3 : Exemple de matériaux piézoélectriques

I.3.1 Céramiques

Les céramiques sont des matériaux massifs inorganiques et non métalliques. Elles sont constituées d'atomes métalliques ou métalloïdes liés par des liaisons covalentes et ioniques à des atomes d'oxygène, d'azote ou encore de carbone. Elles peuvent être cristallines, semi-cristallines ou même amorphes (verre). Les céramiques poly-cristallines sont formées par la solidification du matériau à haute température ou par frittage, qui consiste à agglutiner une poudre du matériau à haute pression et haute température sans passer par une phase liquide. Les céramiques amorphes sont quant à elles formées par la trempe (refroidissement rapide) d'un matériau sous forme liquide.

Seules les céramiques cristallines présentent des propriétés piézoélectriques. Elles appartiennent à la famille des matériaux ferroélectriques, et sont généralement des mélanges binaires ou tertiaires poly-cristallins, de structure cristalline pérovskite déformée. Leurs différents grains possèdent une polarisation propre qu'il est possible d'aligner sur un même axe en soumettant le matériau à un champ électrique, induisant alors une polarisation macroscopique du solide. Les céramiques cristallines sont les matériaux piézoélectriques les plus utilisés dans l'industrie du fait de leurs grands coefficients piézoélectriques et de leur facilité de fabrication. Les céramiques piézoélectriques poly-cristallines les plus connues sont celles à base de titanate de baryum (BaTiO_3) et les céramiques PZT (Titano-Zirconate de Plomb). Il existe également des céramiques piézoélectriques monocristallines, telles que le quartz ou les cristaux de niobate de lithium (LiNbO_3) ou de tantalate de lithium (LiTaO_3).

I.3.2 polymères

Les polymères sont des macromolécules formées par l'enchaînement covalent d'un très grand nombre d'unités de répétition constitués par un ou plusieurs monomères (aussi appelés motifs). Il y a une cinquantaine d'années, il a été découvert que certains de ces polymères peuvent présenter de façon inhérente des propriétés piézoélectriques. Ils sont classés en trois catégories :

a) Les polymères piézoélectriques massifs

Ces polymères peuvent être amorphes ou semi-cristallins. Un polymère semi-cristallin se caractérise par la présence de cristallites (des chaînes organisées dans une structure précise) intégrées dans le réseau amorphe. Ils ne présentent des propriétés piézoélectriques que s'ils répondent à deux conditions. D'une part, leur structure doit intégrer des dipôles moléculaires

et d'autre part, ces dipôles doivent pouvoir être orientés et conserver cette orientation. Ce processus de réorientation est appelé « poling » ; il consiste à placer le matériau sous un fort champ électrique à relativement haute température. La température permet aux chaînes ou aux cristallites de se réorganiser sous l'influence du champ électrique. Les polymères piézoélectriques massifs les plus connus sont le PVDF, le parylène-C, et les polyamides.

b) Les polymères cellulaires

Ces polymères sont des électrets, c'est-à-dire des matériaux isolants dans lesquels des charges ont été implantées. Ils ne présentent pas de propriétés piézoélectriques inhérentes, mais ont une structure alvéolaire particulière : leur réseau intègre des poches de gaz, typiquement en forme de lentille de quelques μm d'épaisseur. Il est possible de fixer des charges électriques aux interfaces de ces poches de gaz avec le polymère, en soumettant le matériau à un fort champ électrique. L'ionisation du gaz projette des charges de signes opposés sur la surface du polymère. Ces charges résiduelles confèrent un comportement piézoélectrique au matériau. Le polymère cellulaire le plus connu est le polypropylène, soumis à des traitements thermiques particuliers.

c) Les polymères composites

Ces polymères ne présentent pas de propriétés piézoélectriques inhérentes, mais intègrent d'autres matériaux piézoélectriques inorganiques. Ces matériaux composites présentent l'avantage d'avoir des propriétés propres aux différents matériaux qui le constituent. Ils intègrent généralement des microparticules ou nanoparticules piézoélectriques ou encore des fibres de matériaux piézoélectriques latéralement alignés (« (1-3) composite ») dans le réseau polymère souple.

I.3.3 Monocristaux semi-conducteurs

Un semi-conducteur est un matériau qui a les caractéristiques d'un isolant, sa bande de conduction étant séparée de sa bande de valence par une bande interdite, mais pour lequel la probabilité qu'un électron puisse contribuer à un courant, bien que faible, est suffisante pour que sa conductivité soit intermédiaire entre celle des métaux et celle des isolants. Ils peuvent être séparés en deux groupes : les semi-conducteurs à gap direct, comme la plupart des composés issus des colonnes III et V du tableau périodique, et les matériaux à gap indirect, comme le silicium (appartenant à la colonne IV).

La plupart des semi-conducteurs piézoélectriques appartiennent au groupe II-VI ou au groupe III-V. Les oxydes d'éléments issus des colonnes II, comme le ZnO, et les nitrures d'éléments issus de la colonne III, tel que le GaN, cristallisent principalement en deux phases différentes : zinc-blende (cubique) et wurtzite (hexagonale). Cette dernière phase se caractérise par l'absence de symétrie d'inversion ce qui lui confère ses propriétés piézoélectriques.

I.4 Matériaux piézoélectrique ZnO et GaN

Le ZnO et le GaN sont des semi-conducteurs de large et direct gap de 3,37 eV et 3,4 eV respectivement, ils sont transparents dans le visible et dans le proche infrarouge [2].

Ces dernières années l'oxyde de zinc et nitrure de gallium sont devenus un sujet de recherches intéressantes en raison de ses propriétés fondamentales attractives (optiques, électriques, piézoélectriques...).

Tableau I-1 : Différentes propriétés de ZnO et GaN.

Propriétés	Paramètres	
	ZnO	GaN
Structure cristalline	Wurtzite	Wurtzite
Group d'espace	P6 ₃ mc	P6 ₃ mc
Paramètres de maille	a= 3,250 Å c= 5,207 Å	a = 3,188 Å c= 5,185 Å
Densité volumique à 300 K	5,675 g/cm ³	6,15 g/cm ³
Gap optique à 300 K	3,37eV	3,43eV

I.4.1 Cristallographie du ZnO et GaN

Le groupe de famille du ZnO et GaN dans les tableaux de Mendeleïev respectivement II-VI et III-V, peuvent se cristalliser en 3 phases cristallines différentes : wurtzite, zinc-blende et sel gemme (Figure I-4).

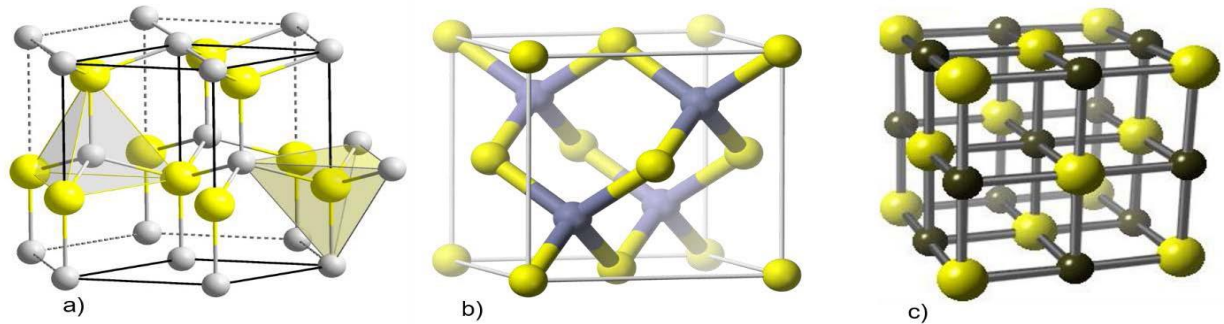


Figure I-4 : Phases cristallines des matériaux III-V, a) Wurtzite, b) Zinc-blende et c) sel gemme.

Les phases zinc-blende et sel gemme sont cubiques tandis que la phase wurtzite est Hexagonale. La structure sel gemme s'obtient uniquement dans des conditions extrêmes de pression et de température, non compatible avec l'épitaxie [3]. La phase stable thermodynamiquement est la phase wurtzite et c'est également celle qui présente des propriétés piézoélectriques.

Dans les composés du ZnO et GaN la structure la plus stable thermodynamiquement est la structure hexagonale wurtzite [4]. La cellule unitaire de cette phase est détaillée dans la (figure I-5). Elle contient 4 atomes par maille dans la position ($O^{2-} : (0, 0, 0); (2/3, 1/3, 1/2)$ Et $Zn^{2+} : (0, 0, 3/8); (2/3, 1/3, 7/8)$) (on a les même cellule unitaire pour le GaN).

Ses paramètres de mailles a et c sont respectivement 3,250 Å et 5,207 Å. La phase cristalline wurtzite appartient au groupe spatial $P6_3mc$; elle est composée de deux mailles cristallines hexagonales compactes interpénétrées, formées respectivement par des atomes de Zn et des atomes de O. Ces deux sous-mailles sont idéalement espacées de $u=3/8*c$ dans la direction [0001]. Chaque atome de O est lié à 4 atomes de Zn et vice-versa, par des liaisons de longueur u .

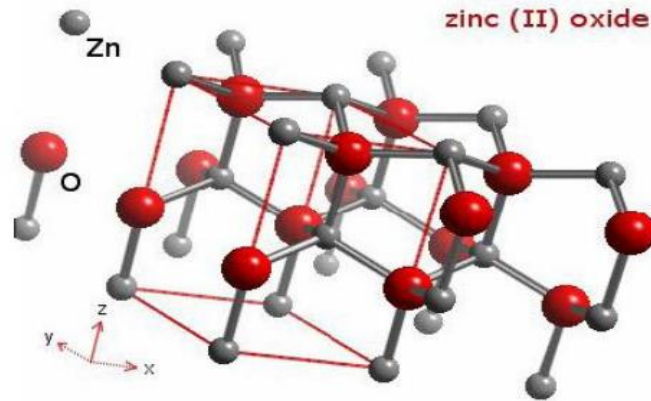


Figure I-5 Structure cristallographique du ZnO (Wurtzite) [5].

I.4.2 structures électroniques de bande

On rappelle que les configurations électroniques des atomes oxygène, zinc, nitride et gallium sont :

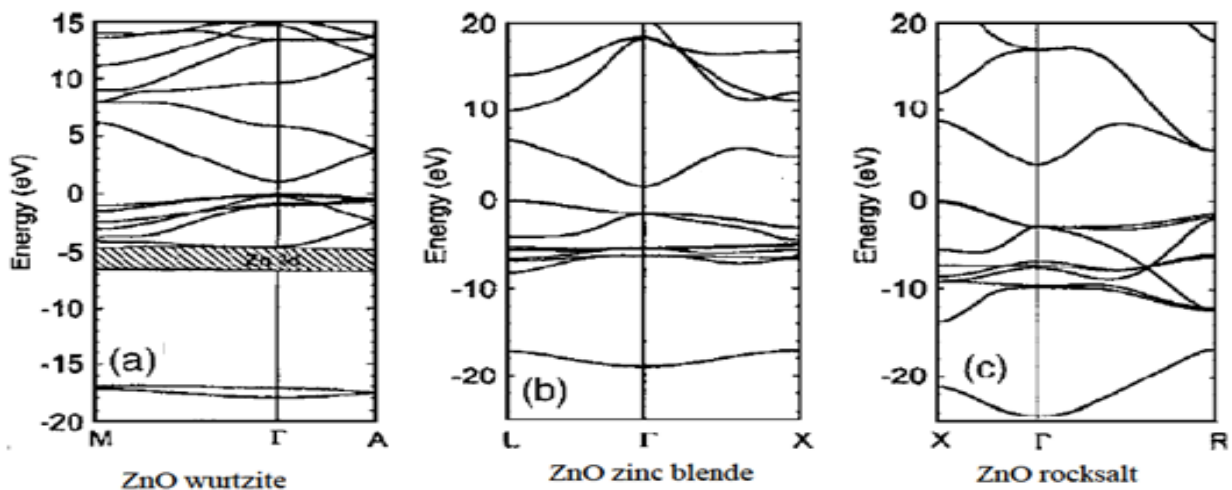
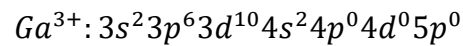
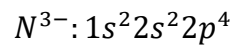
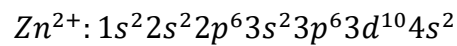
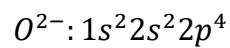


Figure I-6 : La structure de bande pour différentes structures cristallographique du ZnO [4].

Les états 2p de l'oxygène forment la bande de valence et les états 4s du zinc constituent la zone de conduction du semi-conducteur du ZnO.

Il existe en réalité six bandes Γ résultantes des états 2p de l'oxygène, et les plus bas des bandes de conduction ont une forte contribution des états 4s du Zinc.

La structure électronique de bandes montre que le ZnO est un semi-conducteur à gap direct, le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés au point Γ . La largeur de la bande interdite est de l'ordre de 3,3 eV [6].

I.4.3 piézoélectricité dans ZnO et GaN

Dans les semi-conducteurs comme GaN et ZnO les effets piézoélectriques sont très prononcés. ZnO est le composé II-VI de type wurtzite où cet effet est le plus marqué. Ainsi il est utilisé dans la réalisation du couplage électromécanique. Les interactions piézoélectriques au sein de GaN et ZnO avec les phonons vont également avoir des effets sur l'élargissement des transitions optiques. Afin d'estimer ces effets, la connaissance des éléments composant le tenseur piézoélectrique s'avère utile. Pour un cristal de type wurtzite, on a alors :

$$\begin{pmatrix} p_{xx} \\ p_{yy} \\ p_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{33} & e_{33} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

Avec

P_{xx} et P_{zz} : Les polarisations piézoélectriques selon la direction perpendiculaire à l'axe c.

P_{zz} : La polarisation selon l'axe c.

e : est un tenseur à trois indices, qui peut s'écrire sous forme d'un tenseur à deux indices $e_{ij} = e_{ikl}$ lorsque $i=k$ et $l=1,2,3$

Les valeurs des différentes composantes du tenseur piézoélectrique e_{ij} dans le cas de GaN et ZnO de type wurtzite sont données dans le tableau I-2.

Tableau I-2 : Constantes piézoélectriques de GaN et ZnO

	e_{31}	e_{33}	e_{15}
ZnO ($C \cdot m^{-1}$)	-0.15	1.22	-0.45
GaN ($C \cdot m^{-1}$)	-0.33	0.65	-0.30

I.4.4 Applications du ZnO et GaN

a) Les capteurs de gaz

Les préoccupations actuelles de protection de l'environnement se focalisent sur des nouvelles recommandations environnementales et de sécurité et la qualité de l'air dans l'industrie. Avec le développement de l'industrie, les capteurs de gaz font l'objet de travaux de recherche depuis les années 2000 comme le montre-la figure I-8.

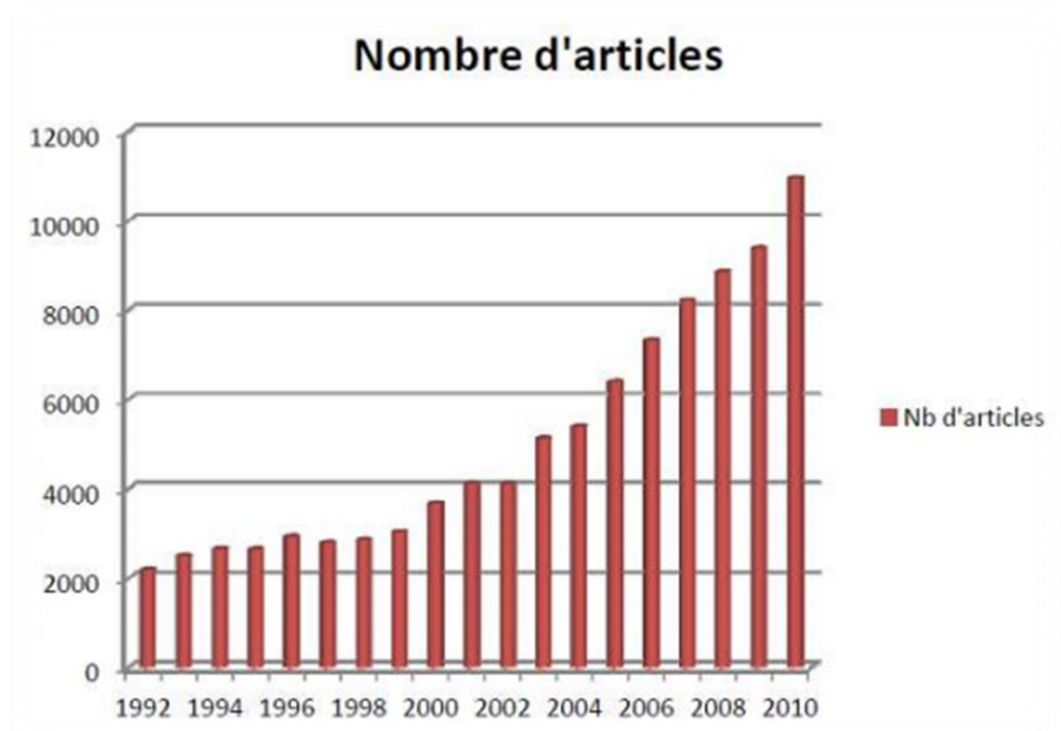


Figure I-7 : Nombre d'articles sur la base de recherche Science Direct.

Les capteurs à semi-conducteur sont constitués d'une couche sensible au gaz à détecter. Le paramètre mesuré est généralement la résistance électrique du capteur, qui dépend de la composition de l'atmosphère qui l'entoure [7]. En fonction du mode de préparation, l'oxyde de zinc peut faire apparaître différentes nanostructures, et ainsi offrir une morphologie adaptée au gaz à détecter en surface. Ceci fait de l'oxyde de zinc un bon candidat pour des applications de détection.

b) Cellules solaires

Les cellules solaires sont des systèmes constitués de matériaux semi-conducteurs qui possèdent la faculté de transformer l'énergie solaire en énergie électrique. Cette transformation est due à l'effet photovoltaïque du matériau utilisé qui permet de capter

l'énergie des photons reçus pour libérer des porteurs de charge de la bande de valence à la bande de conduction. Le rendement des cellules photovoltaïques est amélioré par l'intégration des couches minces de ZnO comme semi-conducteur de type n dans celles-ci afin d'agrandir la surface effective de l'interaction avec la lumière. Par ailleurs, en dopant ces couches avec des nanoparticules de colorants, on pourrait également élargir leurs spectres d'absorption de la lumière, ce qui augmenterait aussi le gain de ces cellules [8]

c) Diodes électroluminescentes

Les diodes électroluminescentes (LED) sont réalisées avec, entre autres, des couches de TCO. A l'inverse de la cellule solaire, le principe de LED consiste à convertir l'énergie électrique en énergie lumineuse. Comme le nitrure de gallium GaN et, grâce à sa large bande interdite (3,37 eV), l'oxyde de zinc trouve également des applications dans la réalisation de diodes électroluminescentes émettant en particulier dans le bleu. Ces deux matériaux ont des propriétés similaires, mais ZnO a certains avantages par rapport au GaN. On peut citer, par exemple, sa grande énergie de liaison de l'exciton (60 meV contre 21 meV pour GaN), lui conférant potentiellement de bonnes capacités d'émission lumineuse à température ambiante [7, 9]. Cependant, il est difficile d'utiliser l'oxyde de zinc pour la réalisation de couches stables de type p nécessaires à la réalisation des LED [7].

I.5 Code de calcul utilisé

I.5.1 Introduction

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une des méthodes quantiques les plus couramment employées dans les domaines de la physique du solide pour la détermination des grandeurs physiques et quantiques d'un système et particulièrement les systèmes contenant un grand nombre de particules, telles que sa structure électronique, son énergie d'ionisation etc.

Pour un système donné à plusieurs corps, elle permet de résoudre l'équation de Schrödinger, 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.

I.5.2 Description du code Wien2k

Le code de simulation Wien2k élaborés par Blaha P et al [10], est basé sur la méthode des ondes planes augmentées linéarisée à potentiel intégral (FP-LAPW) et la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Il existe plusieurs versions du code appelées selon l'année de leur partions Wien93, Wien95 et Wien97, il est constitué de plusieurs programmes indépendants qui exécutent des calculs de structure électronique dans les corps solides. Plusieurs propriétés des matériaux peuvent être calculés avec ce code parmi lesquelles :

Les bandes d'énergie et la densité des états,

La densité de charge, la densité de spin,

L'énergie totale, les optimisations de structure,

Les propriétés optiques,

a) Procédure de calcul

➤ Initialisation du calcul

La première étape de calcul est l'initialisation qui consiste à exécuter une série de petits programmes auxiliaires qui vont produire des entrées pour les programmes principaux.

Cette étape consiste à construire la configuration spatiale (géométrique), les opérations de symétrie, les densités de départ etc..., on commence dans un sous-répertoire correspondant à notre cas et on définit la structure dans case.struct. On peut effectuer l'initialisation par la commande de ligne `init_lapw`, qui exécute la suite de sous-programmes suivants :

NN

Le NN est un sous-programme qui énumère les distances entre plus proches voisins et qui donc aide à déterminer la valeur du rayon de la sphère atomique, le fichier de sortie de ce sous-programme est appelé case.outputnn.

SGROUP

Le SGROUP détermine le groupe d'espace (space group) de la structure qui est définie dans le fichier case.struct, et rend en sortie le fichier case.struct-sgroup.

SYMMETRY

Le SYMMETRY est un programme qui énumère les opérations de symétrie du groupe spatial de notre structure à partir des informations contenues dans le fichier case.struct , et détermine le groupe ponctuel des différents emplacements atomiques.

LSTART

Le LSTART produit des densités électroniques des atomes libres et détermine comment les différentes orbitales seront traitées dans les calculs de structure de bande.

De plus ce sous-programme demande l'énergie de coupure (cut-off) qui sépare les états du cœur de ceux de valence.

KGEN

Le KGEN génère une maille de points k dans la partie irréductible de la première zone de Brillouin (Z.B.). On spécifie le nombre des points k dans toute la 1ère Z.B.

DSTART

Le DSTART produit une densité initiale pour le cycle SCF (cycle auto-cohérent ou self-consistent) par une superposition de densités atomiques produites dans le sous- programme.

LSTART

L'initialisation du calcul ayant ainsi créé toutes les entrées pour le cycle SCF, le processus est alors lancé et itéré jusqu'à la convergence de la solution.

➤ **Optimisation de l'énergie pour les paramètres cristallographiques**

Une fois que l'initialisation est terminée, la structure doit être optimisé afin d'obtenir un paramètre de maille qui minimise l'énergie, par la commande x optimize. On choisit le paramètre à optimiser dans notre cas c'est le volume et le rapport c/a , puis les valeurs en pourcentage pour la compression et la dilatation

➤ **Calcul auto-cohérent (SCF)**

Cette étape est constituée des sous programmes sous forme cyclique, qui peut être invoqué par la commande de ligne run_lapw, est constitué de cinq sous-programmes.

LAPW0 (POTENTIELS)

LAPW0 est un sous-programme qui calcule le potentiel comme la somme du potentiel de Coulomb V_C et du potentiel d'échange et corrélation V_{xc} , il utilise la densité d'électrons totale comme input. LAPW0 divise l'espace en une sphère MT (muffin-tin) et une région interstitielle, et calcule le potentiel d'échange et corrélation numériquement [11].

LAPW1 (BANDES)

LAPW1 (BANDES) est un sous-programme qui trouve l'Hamiltonien, la matrice de chevauchement, les valeurs propres et les vecteurs propres (ces sorties sont enregistrées dans le fichier case.vector), cette dernière consomme la plus grande partie du temps de calcul.

LAPW2 (RHO)

LAPW2 (RHO) utilise le fichier case.vector, il calcule l'énergie de Fermi, les densités de valence à partir des vecteurs propres.

LCORE

LCORE Calcule les états du cœur et les densités [12].

MIXER

MIXER est un sous-programme dans lequel il effectue le mélange entre la densité d'entrée et de sortie, et vérifie le critère de convergence, le fichier case.scf est produit après la convergence du cycle SCF et contient l'énergie totale calculée (à la fin du fichier).

Chapitre II

Résultats et discussions

II.1 Introduction

La détermination des propriétés structurales dans la physique des matériaux joue un rôle important, car elle permet de recueillir des informations sur la structure microscopique des matériaux et aura donc un impact relativement important sur la prédiction des autres propriétés, le but de notre travail est d'étudier des propriétés structurales, électroniques, optiques et piézoélectriques du ZnO et GaN sous l'effet de la variation de la contrainte mécanique uni-axiale.

II.2 Détails de calcul

Dans ce travail nous avons effectué les calculs à l'aide du code Wien2k, ce dernier implémente dans le cadre de la DFT la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) où nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA, qui donne des résultats meilleurs dans le cas des semi-conducteurs à large bande interdite.

Avec un paramètre de coupure $R_{MT} K_{MAX} = 8$ qui détermine la taille de la base dans la région interstitielle où k_{MAX} est la valeur de coupure pour les ondes plane et R_{MT} est le plus petit rayon muffin tin, dans notre calcul les valeurs de R_{MT} que nous avons utilisées pour le ZnO et le GaN sont basées sur deux critères :

- Assurer l'intégration de la majorité des électrons de cœur dans la sphère Muffin tin.
- Eviter le chevauchement des sphères Muffin tin.

Le procédé d'itérations est répété jusqu'à ce que le calcul de l'énergie totale converge à moins de 10^{-6} Ry, une différence de charge était moins que $0,01e$ entre les étapes comme critère de convergence et la force de convergence est de 0.5 mRy

Nous avons choisi l'énergie de $-6Ry$ comme une énergie de séparation entre les états de cœur et de valences. Le nombre de points k considéré dans la zone de Brillouin dans nos matériaux est de 1000 points.

Les paramètres de R_{MT} donnés en unités atomiques ($u.a$) et les positions des atomes, ainsi que les structures cristallines pour les deux types utilisés dans nos calculs sont illustrés dans le Tableau II-1 et les Figures II-1 respectivement.

Chapitre II : Résultats et discussions

Tableau II-1 : Les données d'entrée pour le ZnO et GaN

	Paramètres de maille (bohr)	Atomes	positions			R_{MT} (u.a)	$R_{MT} * k_{MAX}$	k_{MAX}
			x	y	z			
Structures	ZnO	Zn	0,3333	0,6666	0,5000	2,05	8	1000
		O	0,3333	0,6666	0,3809	1,60		
	GaN	Ga	0.3333	0.6666	0.0000	1,95		
		N	0.3333	0.6666	0.3769	1,60		

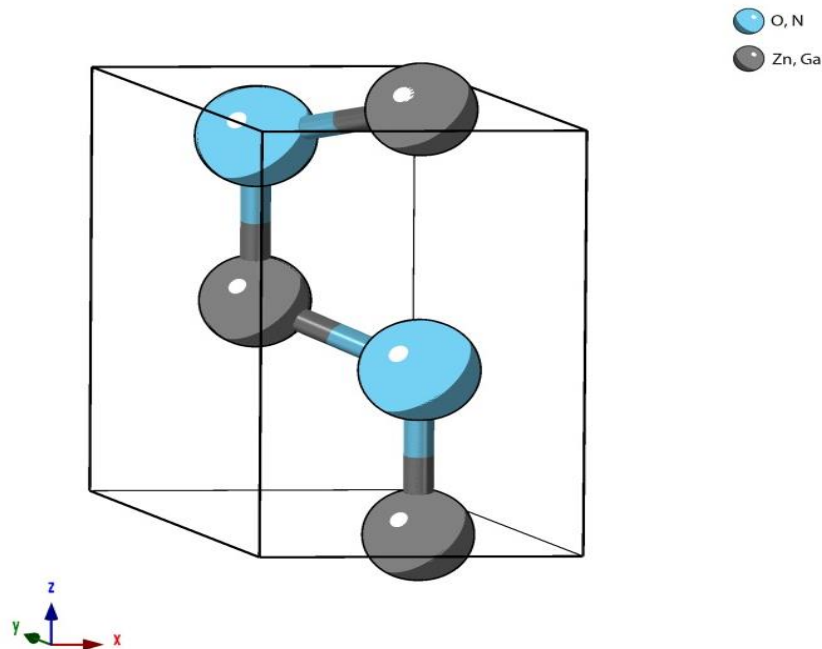


Figure II.1 représentation de la maille élémentaire pour ZnO et GaN
(Structure hexagonal).

II.3 Optimisation des paramètres structurales

La détermination des propriétés d'équilibre constitue la première étape et la plus importante pour développer les calculs qui suivent, car les autres propriétés dépendent des paramètres

Chapitre II : Résultats et discussions

cristallins optimisés. À savoir les paramètres du réseau à l'équilibre a et c et le paramètre interne des atomes d'oxygène u .

Vu que la structure des deux composés est hexagonale les paramètres du réseau ne sont pas déterminés directement.

II.3.1 Optimisation du volume :

Cette importante étape consiste à déterminer le volume à l'équilibre V_0 qui correspond au minimum de la courbe de variation de l'énergie totale en fonction du volume, ajustée par l'équation d'état de Murnaghan [13] donnée par:

$$E(V) = E_0 + \left(\frac{B_0 V}{B'}\right) \left[\frac{1}{B'-1} \left(\frac{V_0}{V}\right)^{B'} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B'-1} \quad (2.1)$$

Avec

E L'énergie totale de l'état fondamental d'une structure cristalline donnée.

B_0 Le module de compression qui mesure la rigidité du cristal

B' La dérivée de module de compression par rapport à la pression.

V_0 est le volume d'équilibre à l'état fondamental.

$$\text{Avec} \quad V(P) = V_0 \left[1 + \frac{PB'}{B_0} \right]^{-\frac{1}{B'}} \quad (2.2)$$

Le module de rigidité est déterminé par :

$$B_0 = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (2.3)$$

Les figures II-2 et II-3, représentent les variations de l'énergie totale en fonction du volume pour ZnO et GaN. Le volume de maille à l'équilibre correspond au minimum de la courbe de variation de l'énergie totale.

Chapitre II : Résultats et discussions

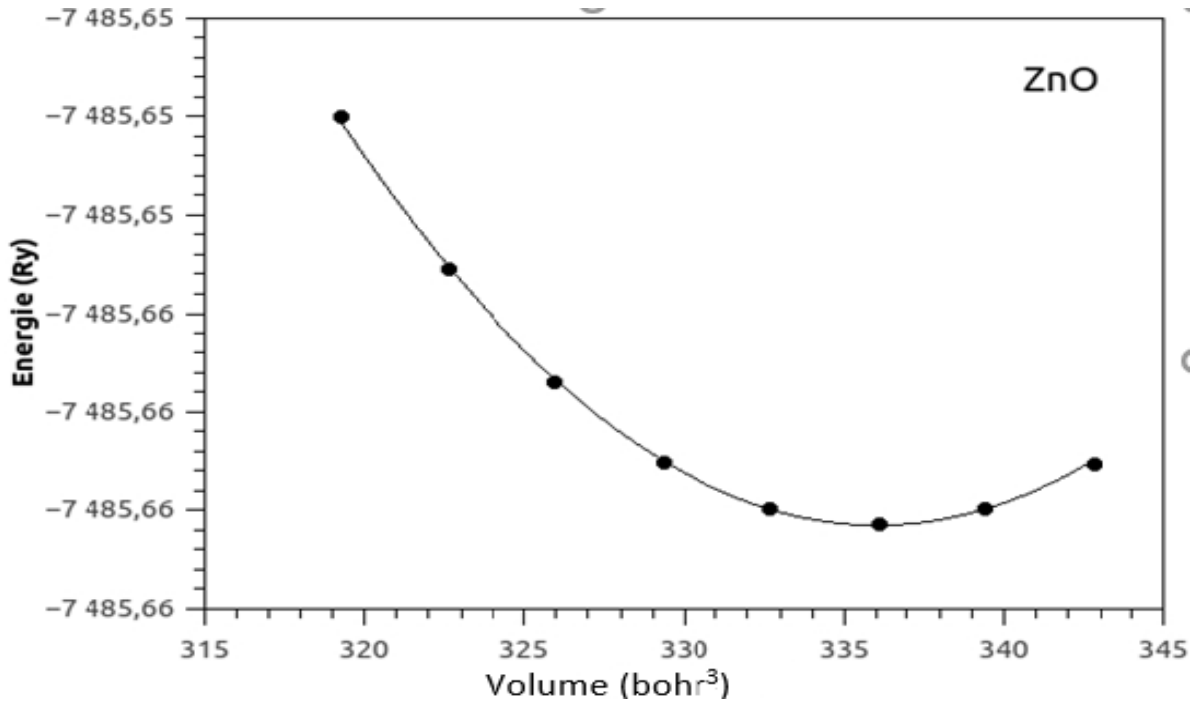


Figure II-2 : Courbe d'optimisation du volume du ZnO

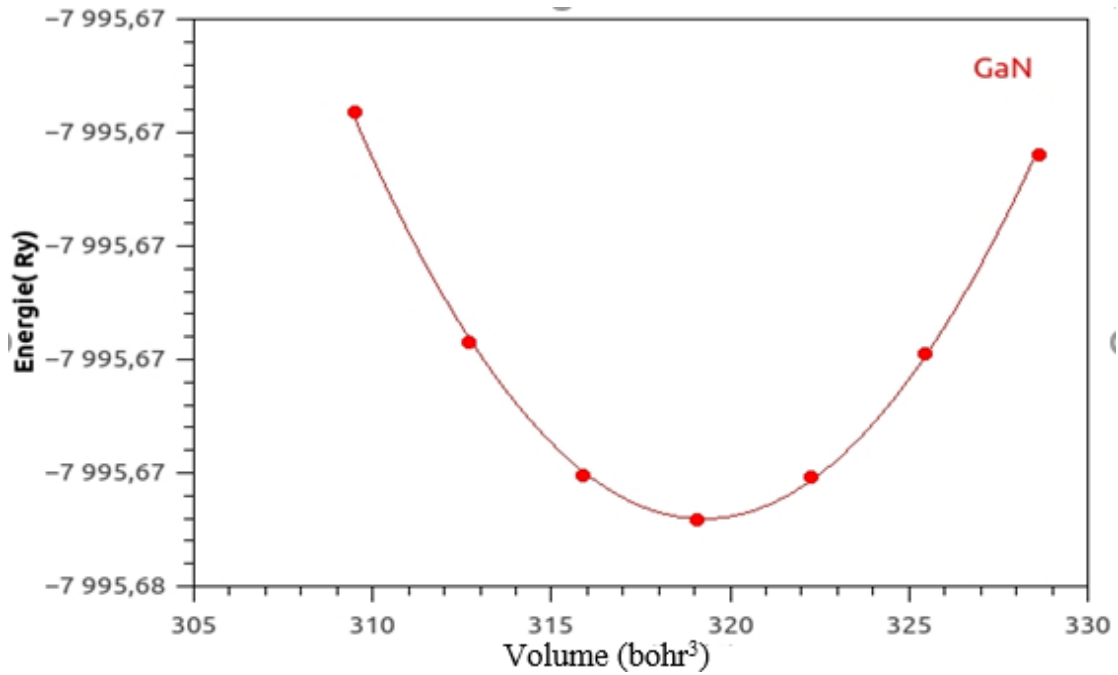


Figure II-3 : Courbe d'optimisation du volume du GaN

Chapitre II : Résultats et discussions

II.3.2 Optimisation du rapport c/a :

Afin de déterminer les paramètres du réseau a et c , nous devons passer par l'optimisation du rapport c/a , en calculant l'énergie totale du système pour différentes valeurs de c/a , les paramètres d'équilibre sont obtenus en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction du c/a .

L'expression de volume hexagonal donnée par (2.4) nous permet de déterminer les nouveaux paramètres a et c .

$$V_0 = a_1^3 \frac{c}{a} \sin 120 \quad (2.4)$$

Cette étape est reproduite deux fois afin de s'approcher au mieux des valeurs expérimentales.

Les figures II-4 et II-5 représentent les variations de l'énergie totale en fonction du rapport c/a Pour ZnO et GaN.

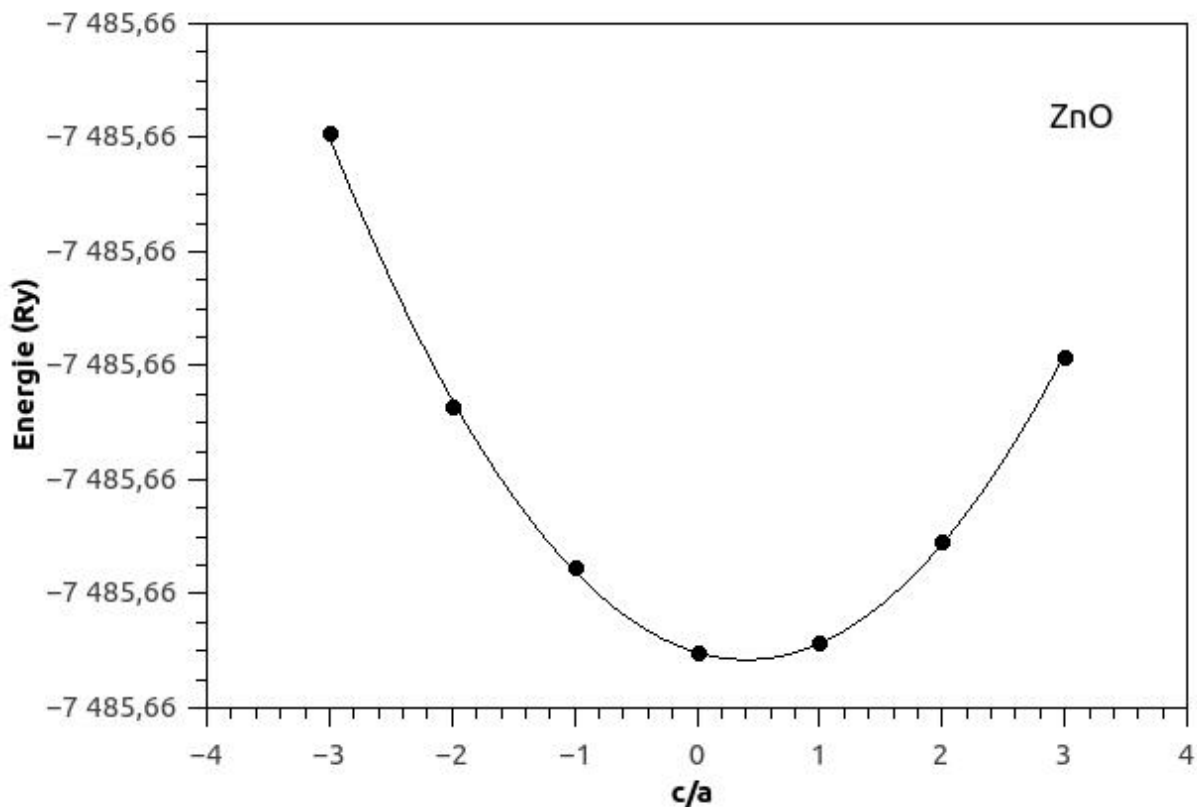


Figure II-4 : Courbe d'optimisation du rapport c/a pour ZnO

Chapitre II : Résultats et discussions

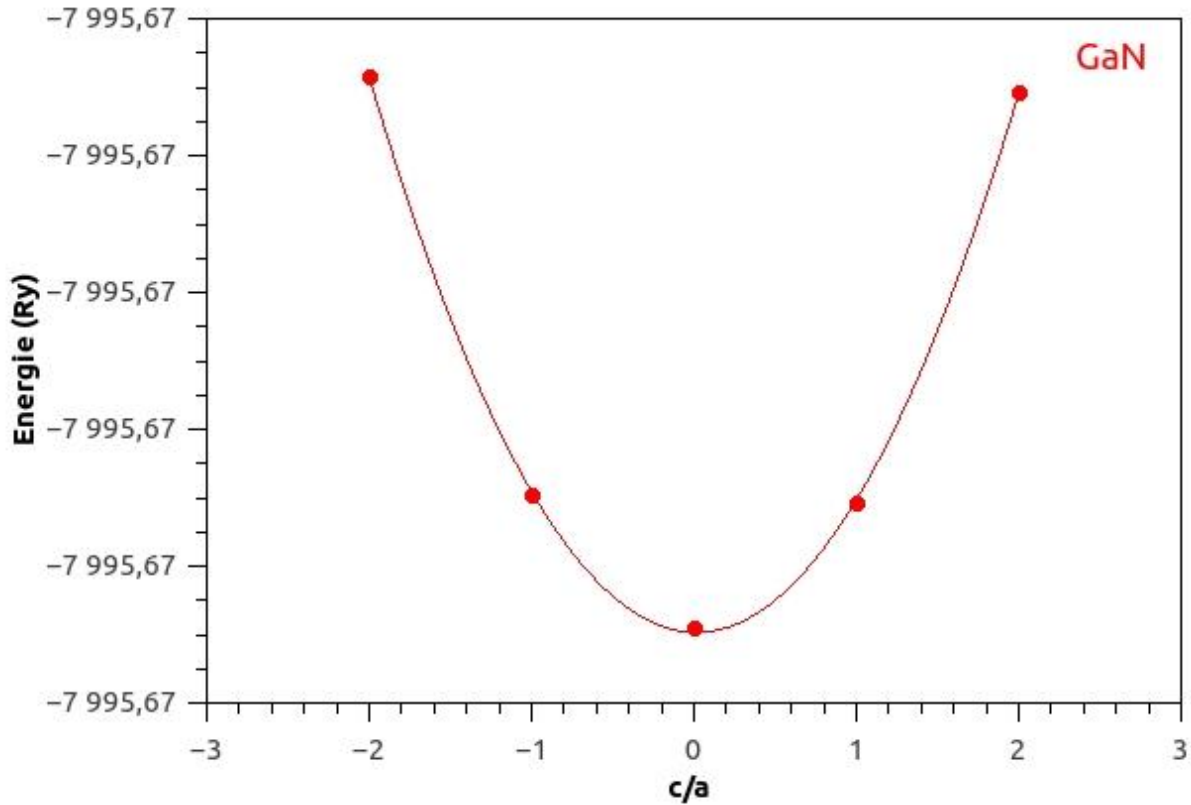


Figure II-5 : Courbe d'optimisation du rapport c/a pour GaN.

Dans le Tableau II-2, nous avons reporté nos valeurs calculées des paramètres de maille à l'équilibre a et c , le paramètre interne u , le module de compression B_0 , le B' , le volume à l'équilibre V_0 et le rapport c/a .

Nous comparons nos valeurs optimisées aux résultats expérimentaux, on remarque que nos paramètres d'équilibre calculés sont en bon accord avec ceux trouvés expérimentalement.

Tableau II-2 : Paramètres obtenus après optimisation pour le ZnO et GaN

	ZnO		GaN	
	Nos calculs	Exp	Nos calculs	Exp
$a=b$ (Bohr)	6,1231	6,1416	6,1536	6,0244
C (Bohr)	9,8318	9,8379	10,0206	9,7982
u	0,3798	--	0,3769	--
B_0 (GPa)	132,6174	--	173,8696	--
B'	4,3633	--	4,3646	--
V_0 (Bohr ³)	335,9714	--	319,0465	--
E_0 (Ry)	-7485,6581	--	-7995,6747	--
c/a	1,6119	1,6022	1,6286	1,626411

II.4 Optimisation du paramètre a avec contrainte (pression uni-axiale) :

Cette partie elle consiste à détermine les différents paramètres a avec le paramètre c fixe pour une contrainte uni-axiale, en prend le fichier struct et à chaque fois on augmente la contrainte uni-axile (-0,5%, -1%, -1,5%, -2%, -2,5%) et en calcule les paramètres a pour chaque c différent.

Lorsque le calcul des différentes contraintes est fini, on trace pour chaque contrainte la courbe qui présente la variation de l'énergie totale en fonction du paramètre a et on prendre le minimum de la courbe de la variation de l'énergie totale, qui correspond au paramètre de maille.

La figure II-6, représente les variations de l'énergie totale en fonction du paramètre a pour ZnO

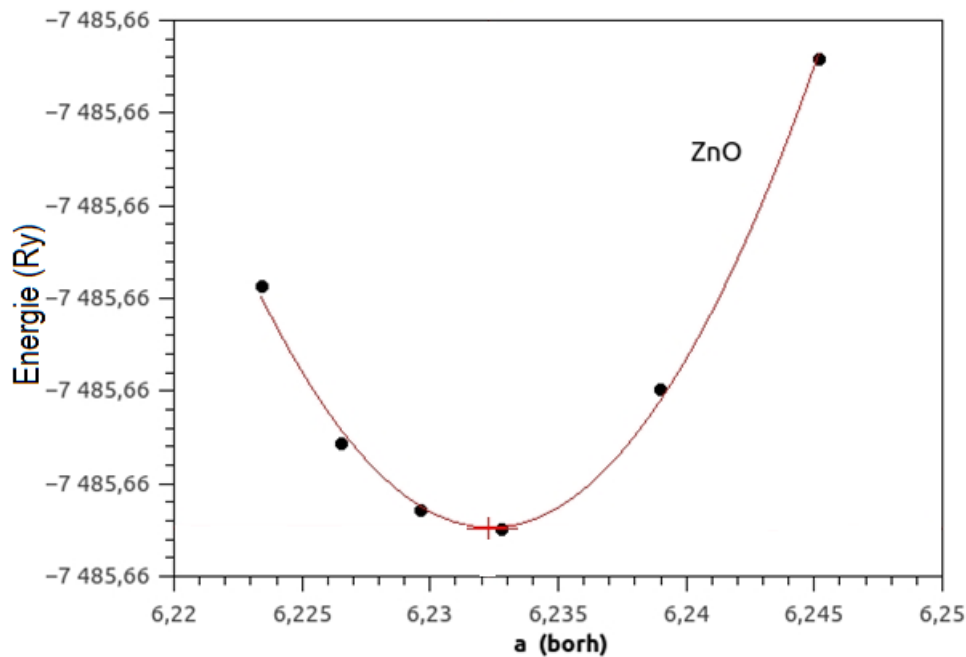


Figure II-6 : Courbe d'optimisation du paramètre a du ZnO pour une compression de 1% selon l'axe z

II.5 Propriétés électroniques

Pour avoir une bonne compréhension du comportement électronique et par la suite le comportement optique et piézoélectrique, nous avons analysé la structure électronique du ZnO et GaN à travers le calcul de la structure de bandes électroniques et la densité d'états totale et partielle.

Chapitre II : Résultats et discussions

Le calcul des propriétés électroniques est effectué en utilisant les paramètres de calcul optimisés (a , c et u).

II.5.1 Densité d'états et structure de bandes

La structure de bandes est essentielle pour l'étude des propriétés électroniques des solides. Une des informations importantes fournie par la structure de bandes est la largeur de la bande interdite (gap), valeur de l'énergie séparant le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence, ce qui permet la classification de tous les cristaux en matériaux, semi-conducteurs et isolants (dans le cadre de la théorie des bandes). Bien que nos calculs du gap soient effectués à $T = 0\text{K}$.

Nous avons calculé la structure de bandes du ZnO et GaN le long des lignes de haute symétrie dans la première zone de Brillouin comme il est représenté sur la Figure 6, en utilisant l'approximation GGA.

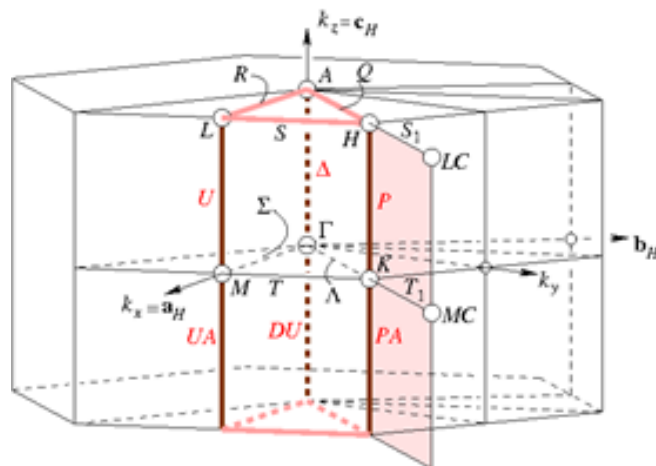


Figure II-7 Zone de Brillouin pour le groupe d'espace **P6₃mc**.

La structure de bandes ainsi que la densité d'états totale de ZnO et GaN sont représentées sur les deux Figures II-8 et II-9, dans la gamme d'énergie de -10 eV au $+10\text{ eV}$ pour le ZnO et GaN.

Chapitre II : Résultats et discussions

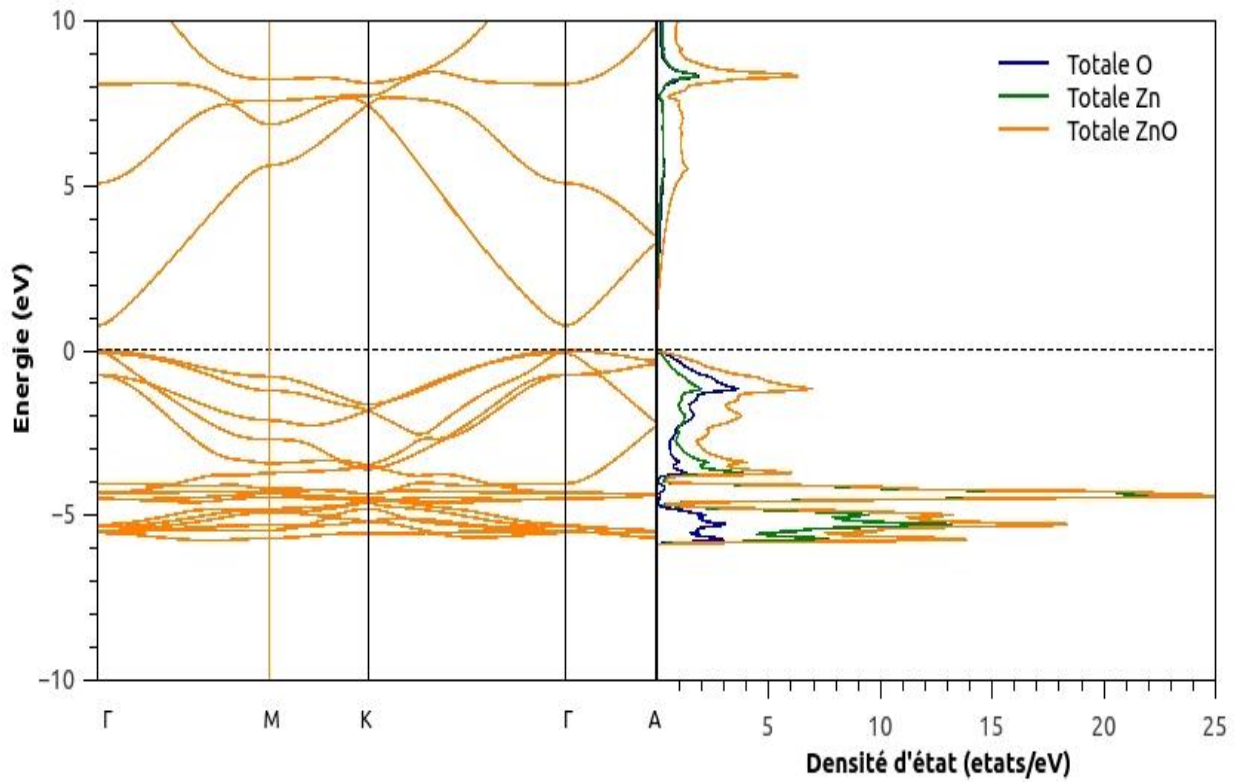


Figure II-8 : Structure de bandes et densité d'états du ZnO

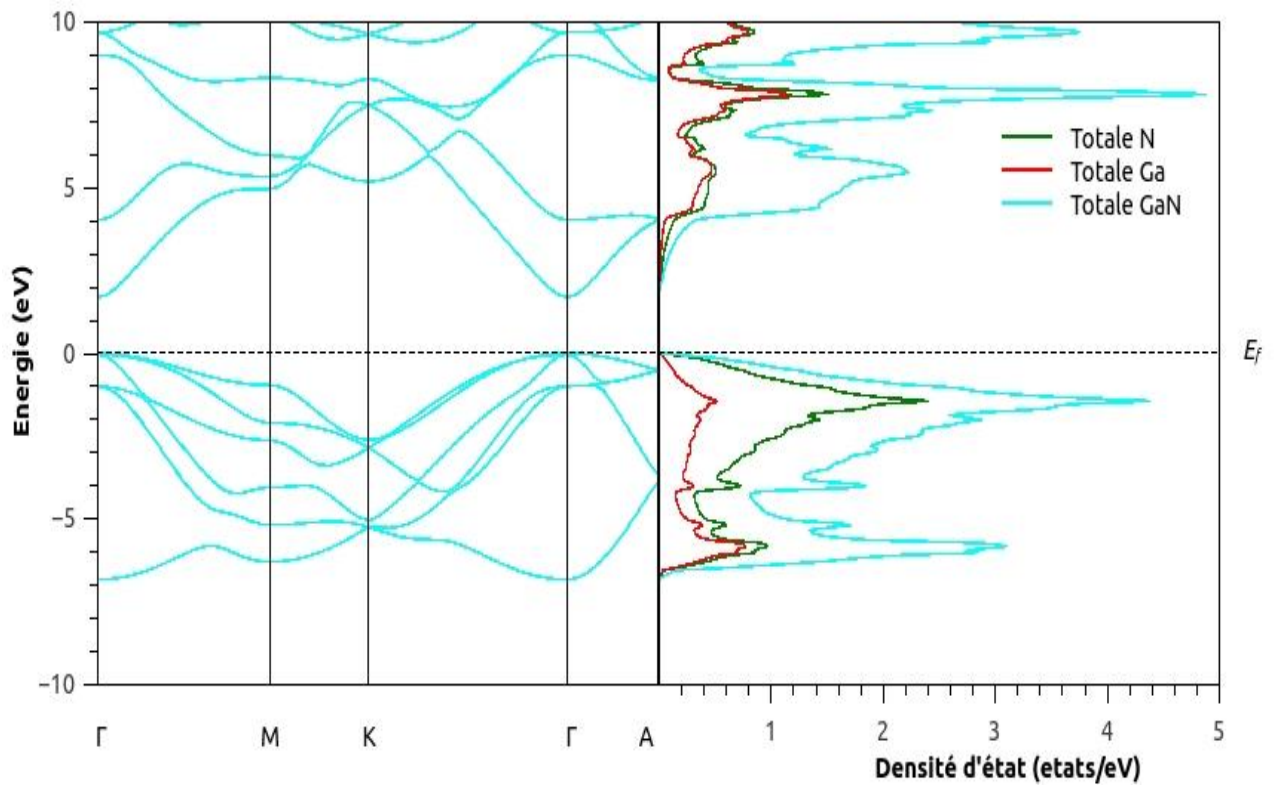


Figure II-9 : Structure de bandes et densité d'états du GaN

Chapitre II : Résultats et discussions

D'après ces figures, nous remarquons que les composés ZnO et GaN possèdent un gap direct, la bande interdite présente un caractère direct ($\Gamma \rightarrow \Gamma$) dans les deux cas.

Les valeurs du gap pour différentes contraintes sont présentées sur le Tableau II-3. La figure II-10 représente les valeurs du gap en fonction de la contrainte mécanique.

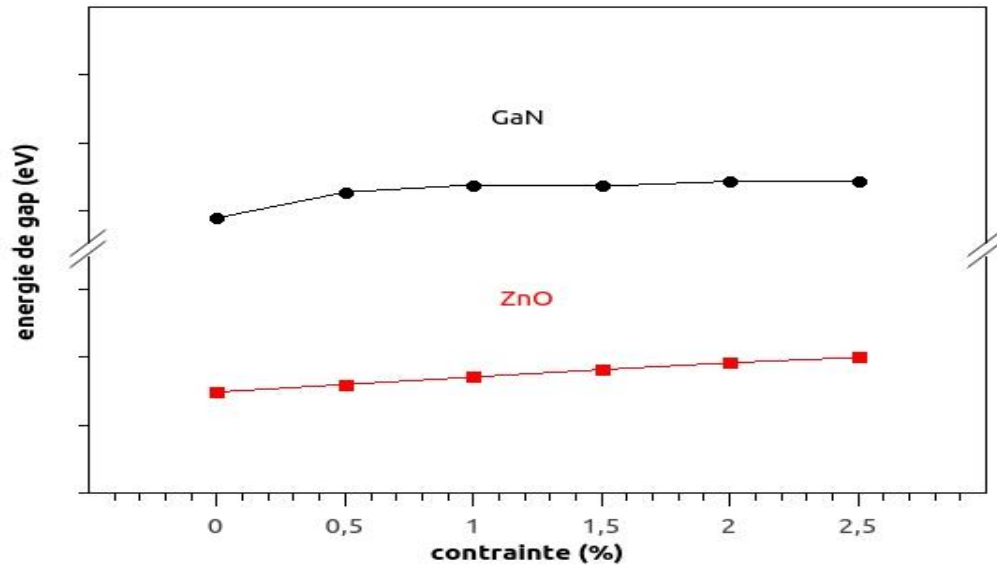


Figure II-10 : courbe du gap ZnO et GaN

On remarque que l'énergie du gap augmente linéairement pour le ZnO mais pour le GaN on remarque une augmentation rapide jusqu'à 0,5% mais il va se stabiliser jusqu'à 2,5%.

Les valeurs des énergies des bandes direct (gap) pour les différentes contraintes sont listées dans le tableau II-3.

Eg(eV)		
Contrainte (%)	ZnO	GaN
0	0,749	1,689
0,5	0,760	1,727
1	0,771	1,738
1,5	0,780	1,736
2	0,791	1,743
2,5	0,800	1,744

Chapitre II : Résultats et discussions

D'autre part, la densité d'états partielle du ZnO et GaN par l'approximation GGA sont présentées dans les Figures II-11 et II-12, le niveau de Fermi est pris comme origine des énergies.

L'analyse de la densité partielle du ZnO montre que la bande de valence au-dessous du niveau de Fermi (-10eV à 0 eV) est essentiellement constituée par les états $2p$ de l'atome O, les états $3d$ d'atome Zn, avec une faible contribution des états s pour les atomes Zn et O et les états p de l'atome Zn.

Les états $2p$ de l'atome O sont beaucoup plus claires par rapport aux autres états dans la bande de conduction située entre 0 eV et +10eV.

Dans le cas de GaN les états $2p$ du N sont majoritaires dans la bande de valence et la bande de conduction par rapport aux états s du Ga, ce pendant que les états s du N et les états p et d du Ga sont minoritaires.

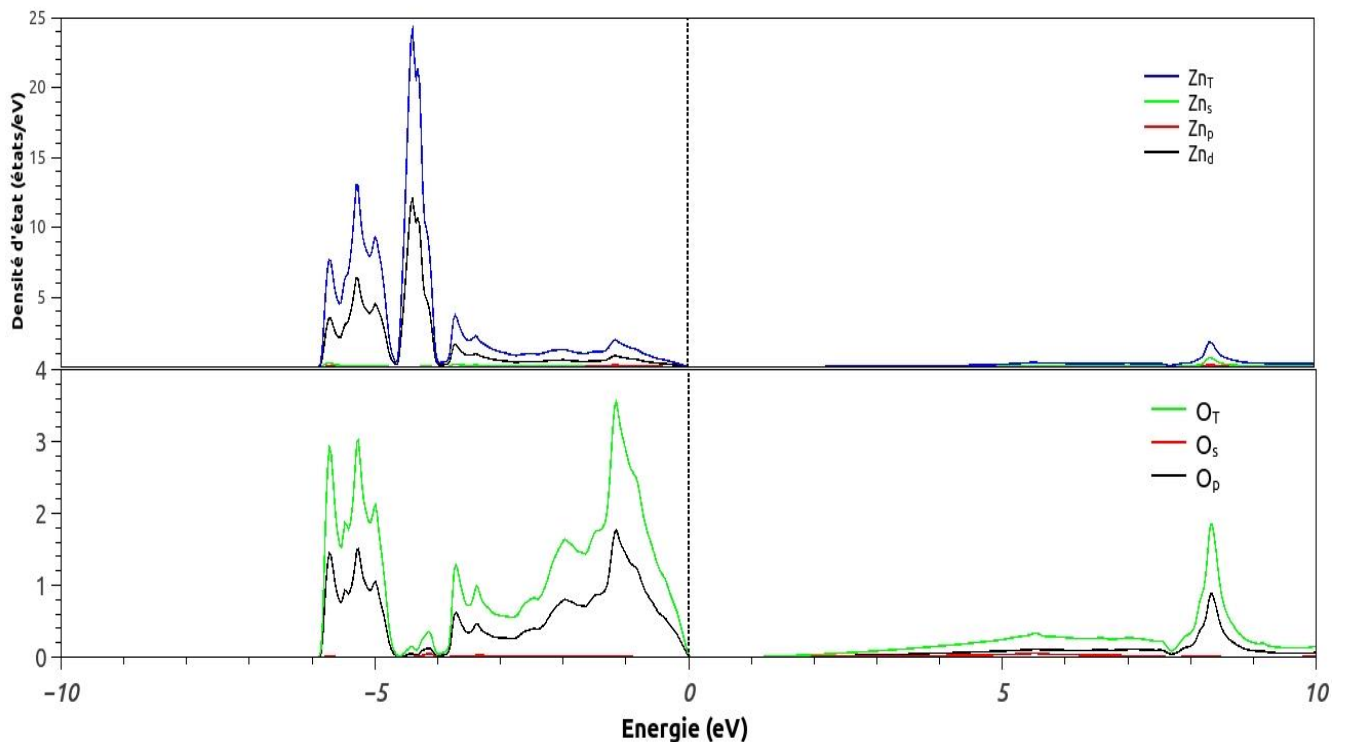


Figure II-11 : Densité d'états partielle de ZnO

Chapitre II : Résultats et discussions

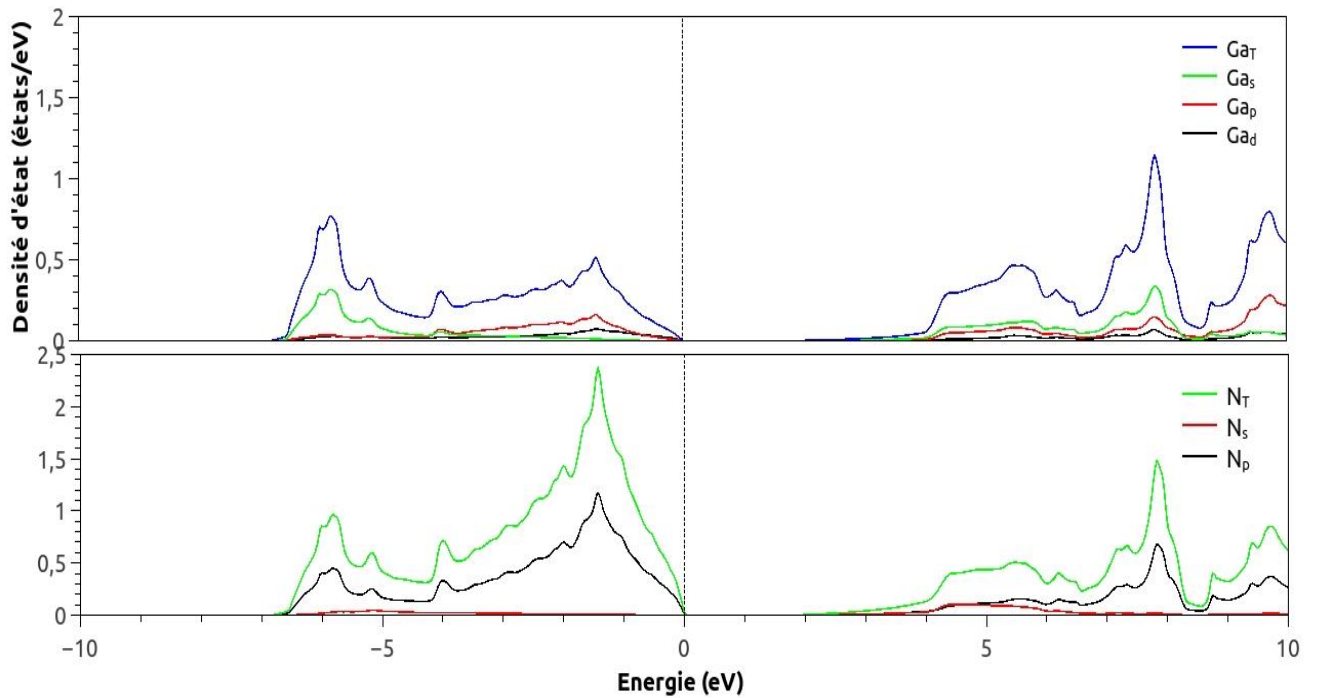


Figure II-12 : Densité d'états partielle du GaN.

II.5.2 Densité de charge

A travers cette densité de charge on peut dire que la liaison dominante dans ces composés est la liaison ionique. D'après la figure II-13, On remarque bien pour les deux cas que les contours sont propres à chaque atome.

Aussi on remarque que pour les deux composés peut de changement dans la densité de charge après l'application d'une contrainte de $-2.5\%c$ (figure de droite) mais on constate une légère diminution de la longueur de liaison entre les ions.

Chapitre II : Résultats et discussions

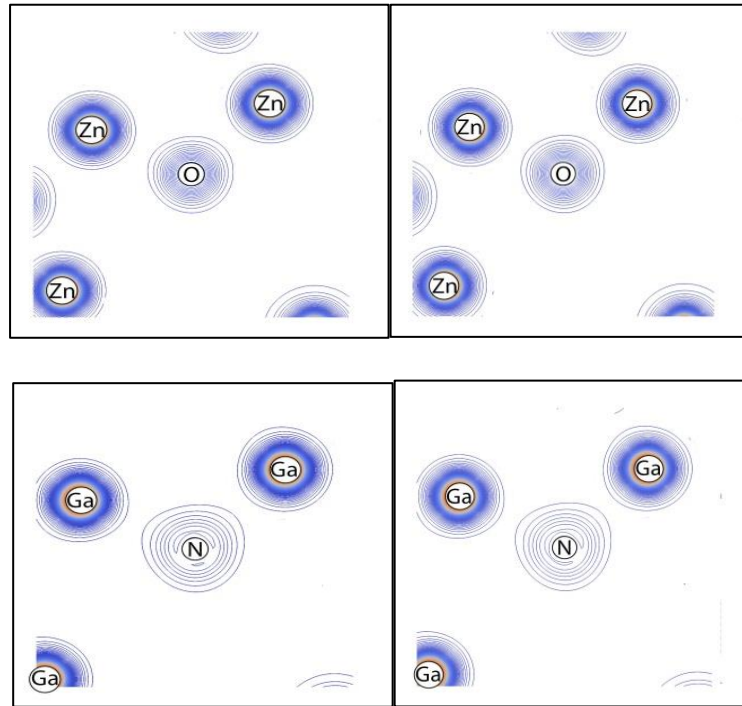


Figure II-13 Densité de charge pour les deux composé ZnO et GaN

(Contrainte -2,5% à gauche, sans contrainte à droit).

II.6 Propriétés optiques :

Dans cette partie nous somme contenter seulement de la variation du coefficient d'absorption et l'indice de réfraction par apport à la variation de la contrainte, pour une longueur d'onde dans le domaine du visible $\lambda=575$ nm.

II.6.1 Indice de réfraction n :

Nos courbes calculées de l'indice de réfraction n à $\lambda=575$ nm en fonction des contraintes sont présentées sur la Figure II-14 pour ZnO et GaN.

Chapitre II : Résultats et discussions

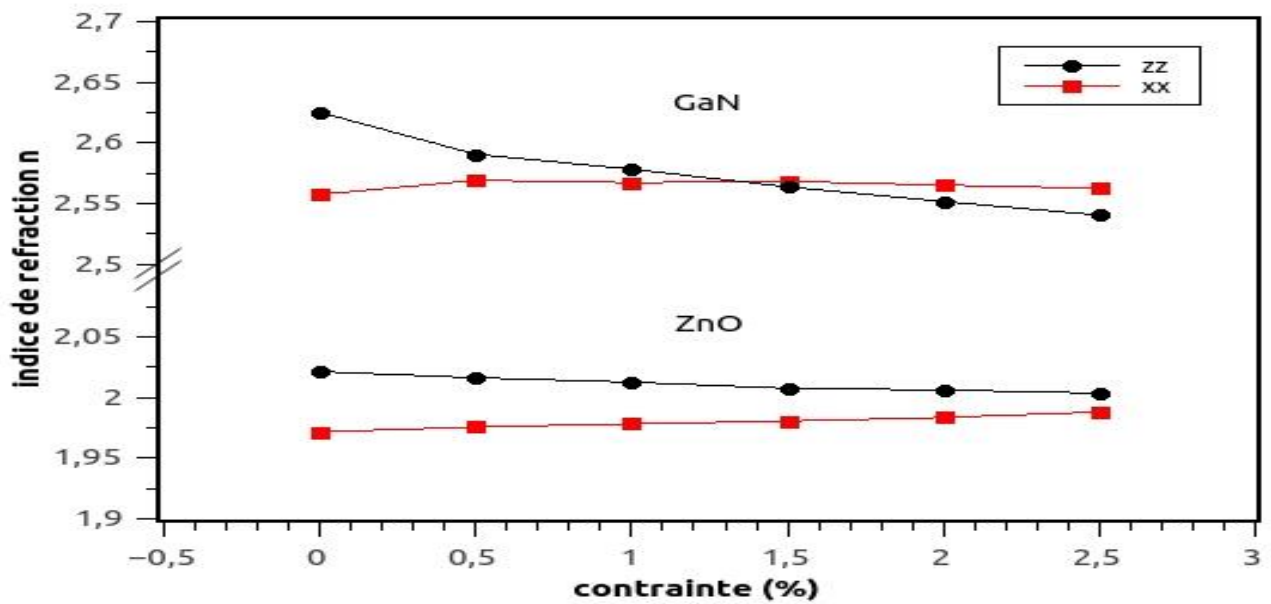


Figure II-14 : courbe de l'indice du réfraction n de ZnO et GaN

On remarque clairement que les deux composés présentent un caractère anisotrope de l'indice de réfraction puisqu'il varie avec le changement de direction. L'indice de réfraction augmente pour xx et diminue pour zz .

D'après cette courbe nous constatons que dans cette gamme de longueur d'onde le GaN présente un indice de réfraction beaucoup plus important que le ZnO, et ça pour les différentes contraintes appliquer.

Chapitre II : Résultats et discussions

II.6.2 Coefficient d'absorption α :

La figure II-15 représenté le coefficient d'absorption α ($\lambda=575\text{nm}$) en fonction des contraintes.

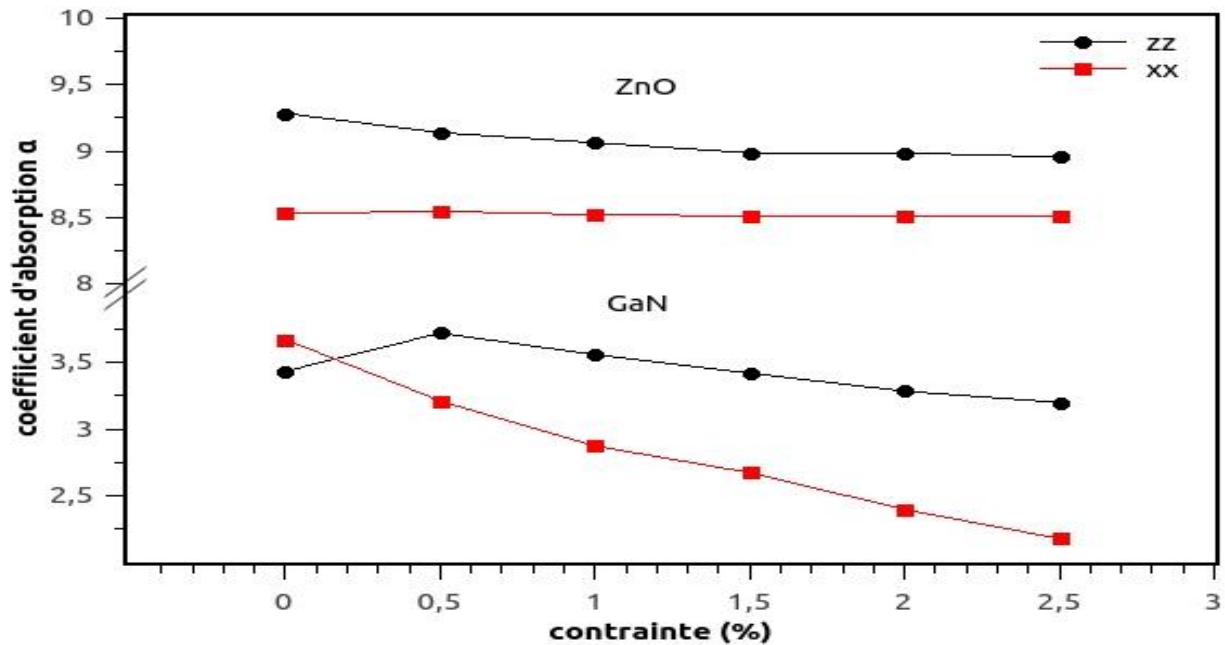


Figure II-15 : courbe du coefficient d'absorption ($\lambda=575\text{nm}$) du ZnO et GaN

En remarque que le coefficient d'absorption pour le ZnO diminue clairement dans la direction zz alors que la variation est presque nulle dans la direction xx.

Par rapport au GaN on constate que l'absorption selon la direction zz augmente jusqu'au 0.5% de contrainte, ensuit diminue progressivement. L'absorption suivant xx diminué sur tous l'échelle de la contrainte. L'anisotropie des propriétés optiques est présentée dans les deux composés.

II.7 Piézoélectricité

II.7.1 Polarisation :

La figure II-16 représente la polarisation en fonction de la contrainte mécanique

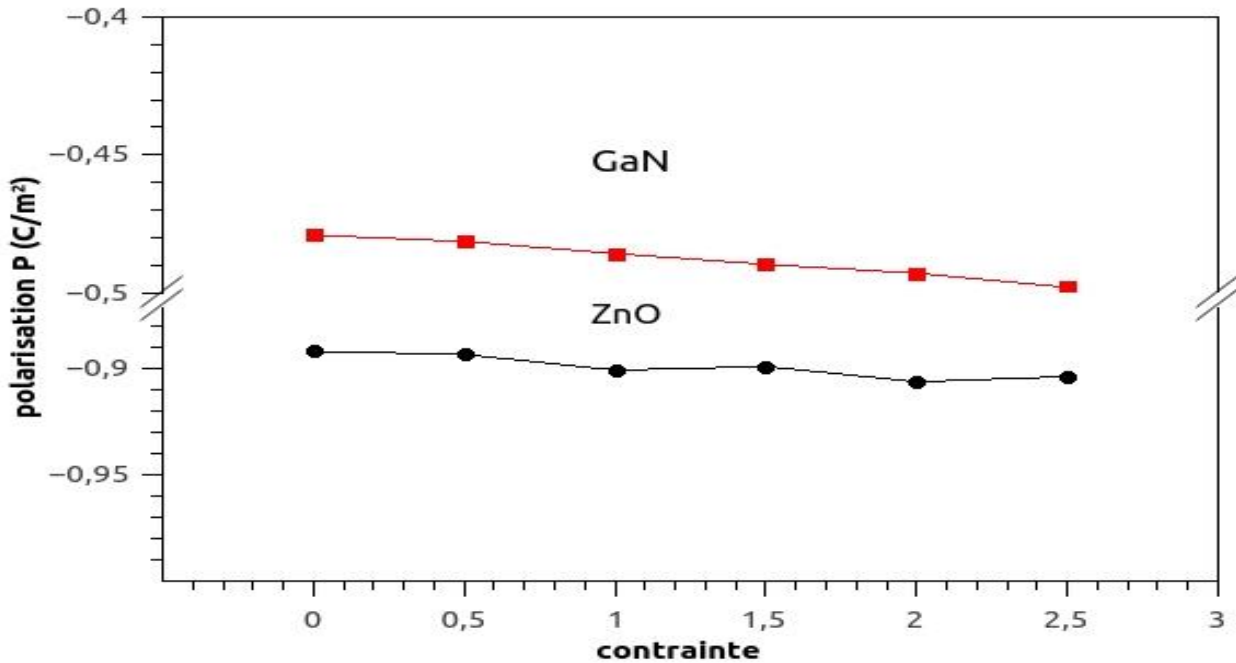


Figure II-16 : Courbe de polarisation P du ZnO et GaN.

La courbe nous indique que même en absence de contrainte mécanique ou même un champ électrique extérieur, les deux composés présentent une polarisation électrique. Alors on peut confirmer que les deux composés possèdent une polarisation spontanée.

On remarque que la variation de la contrainte mécanique uni-axiale fait varier aussi la polarisation en diminution. On peut expliquer cette diminution par le fait que la polarisation est la mesure du moment dipolaire microscopique et le fait qu'on comprime les matériaux à chaque fois, on diminue aussi la distance entre les ions (Zn^{2+} , O^{2-}) alors le moment dipolaire diminue et par conséquent la polarisation. On peut dire aussi que avec l'augmentation de la contrainte dans les deux composés diminue la magnitude de leur non-centro symétrie.

Chapitre II : Résultats et discussions

II.7.2 Constante piézoélectrique e_{zz}

Tout matériau possède une polarisation spontanée peut devenir un matériau piézoélectrique, du fait qu'on peut calculer la constante piézoélectrique selon l'axe z ou c, e_{zz} à l'aide de l'expression suivante :

$$e_{zz} = \frac{\Delta P}{\Delta \varepsilon} \quad (2.10)$$

$$e_{zz} = \frac{P_i - P_0}{\varepsilon_i} \quad (2.11)$$

Avec

ΔP la différence de polarisation entre polarisation spontanée et la polarisation induite (P_0 polarisation sans contrainte, P_1 polarisation avec 0.5% c)

$\Delta \varepsilon$ la différence de contrainte.

La figure II-17 représenté la constante piézoélectrique en fonction de la contrainte mécanique

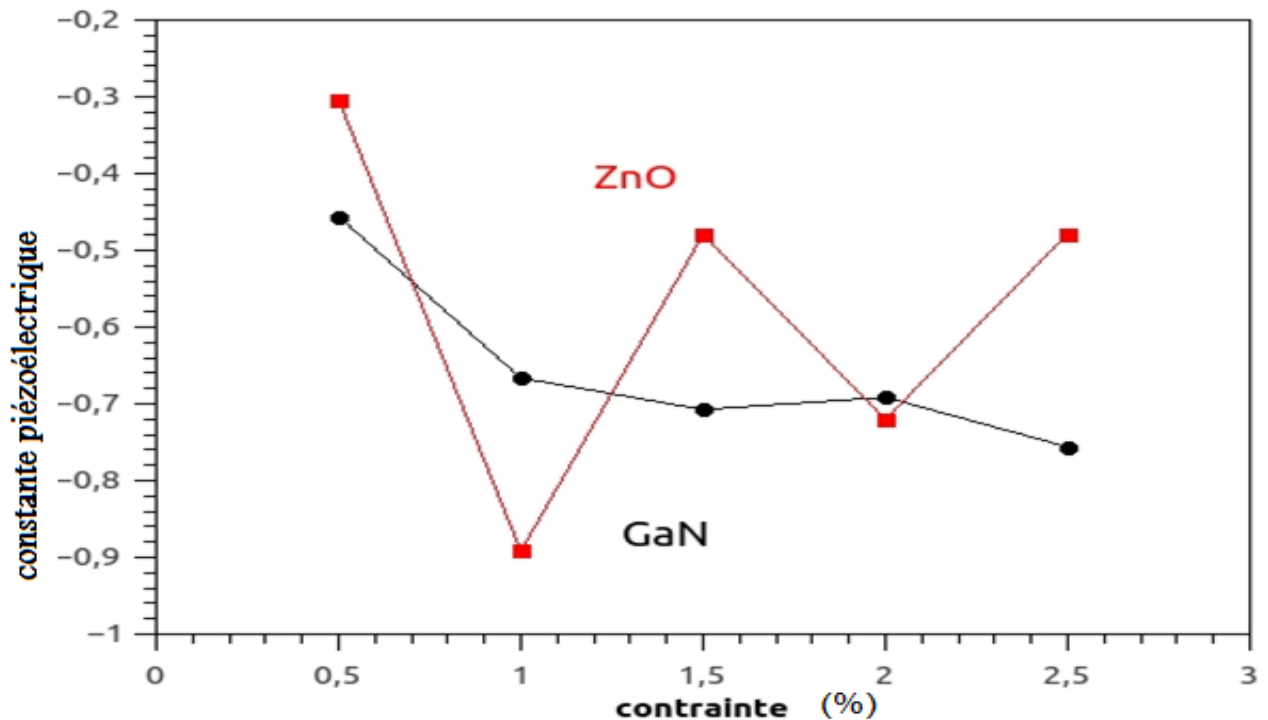


Figure II-17 : courbe de piézoélectricité du ZnO et GaN

Dans le cas du composé GaN le comportement non linéaire de la variation de la constante piézoélectrique en fonction de la contrainte est claire, et on remarque une diminution de cette

Chapitre II : Résultats et discussions

constante et ça coïncide avec la diminution de la polarisation. On peut déduire que dans ce cas la piézoélectricité peut avoir un caractère non linéaire dans cette gamme de contrainte.

Pour ce qui concerne le ZnO la figure ne laisse aucune logique pour expliquer ce résultat étrange, malgré le nombre de calculs refait.

Conclusion générale

Conclusion générale

Le travail présenté dans ce mémoire consiste à étudier la polarisation et la constante piézoélectrique pour les matériaux ZnO et GaN soumis à des contraintes mécaniques uni-axiale.

Dans la première étape de notre travail nous avons réussie à déterminer les paramètres structurales (a , c , u) qui minimisent le mieux l'énergie totale pour chacun des deux composés. Après cette étape, nous avons décrit la manière que nous avons utilisé, pour simuler la contrainte mécanique uni-axial. Les contraintes sont des compressions le long de l'axe c , où nous pris 5 points : 0 compression, 0.5% c , 1.0% c , 1.5% c , 2.0% c et 2.5% c .

Ensuite nous avons étudié les propriétés électroniques, où on a présenté la densité d'états électronique et la structure de bande pour les deux composés ZnO et GaN. On a remarqué que la densité d'états du ZnO est importante dans la bande de valence, par contre pour le GaN présente une densité d'états élevée pour les deux bandes. Le ZnO et le GaN possèdent un gap direct. On a remarqué aussi que l'énergie de gap augment progressivement pour les deux composés lorsque on augmente la compression.

Pour les propriétés optiques, on a choisi la longueur d'onde du jaune autour de 500 nm comme référence, pour voire l'évolution des propriétés optique avec la contrainte mécanique. on a constaté que l'indice de réfraction diminue pour la direction zz et augment pour xx , et le coefficient d'absorption diminue pour les deux directions. On peut dire que l'indice de réfraction et le coefficient d'absorption sont affectés par la contrainte mécanique.

Et en fin on a terminé notre mémoire avec les résultats importants qui nous intéresse, c'est la piézoélectricité, la polarisation et la constante piézoélectrique. On peut confirmer que les deux composés possèdent une polarisation spontanée alors que cette polarisation diminue au fur et à mesure que la contrainte mécanique uni-axiale augmente du fait de la diminution de la distance du dipôle électrique. Aussi le calcul de la piézoélectricité selon l'axe z nous a montrer que le comportement est non linéaire dans la gamme de contrainte choisie et ça dans le cas du GaN.

Références

- [1] Marie Bousket « Croissance, caractérisations et étude des propriétés Physiques de filmsminces du matériau ferroélectriqueNa0, 5Bi0,5TiO3 » thèse doctorat des MatériauxCéramiques et Traitements deSurface, UNIVERSITE DE LIMOGES 2010
- [2] H.E. Brown, J. Phys. Chem. Solids, 15 (1960) 86
- [3] Z.W. Li*, W. Gao, «Growth of zinc oxide thin films and nanostructures by wet oxidation», Thin Solid Films 345 (2006) 224.
- [4] Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Doğan,c_ V. Avrutin, S.J. Cho, and H. Morkoçd, « A comprehensive review of ZnO materials and devices» Journal of Applied Physics, 98, 041301 (2005).
- [5] J. Jousset, Dubien , Nouveau Traité de Chimie Minérale , Vol. 5, Masson , Cie , Paris, 1962.
- [6] M. Zerdali, « Etude et Réalisation de Transducteur SAW à base de Couches Minces de type II-VI ZnO », thèse de doctorat sciences, université des Sciences et Technologie "Mohamed Boudiaf ", Oran, 2007.
- [7] Liu Yang, « Caractérisation de couches minces de ZnO élaborées par la pulvérisation cathodique en continu », These de DOCTORAT, Université du littoral côte d'opale (2012).
- [8] K. Ramamoorthy, M. Arivanandhan, K. Sankaranarayanan, C. Sanjeeviraja, Materials Chemistry and Physics, 85 (2004) 257-262.
- [9] K.Ramamoorthy , M.Arivanandhan, K. Sankaranarayanan, C. Sanjeeviraja, Materials Chemistry and physics, 85 (2004) 257-262.
- [10] S.A. T Redfern, R.J. Harrison, H.S.O'Neill,D.RR.Wood, Am. Miner, 84 (1999) 299.
- [11] E.J.W. Verwey,P.W.Haayman,F.C.Romeyn,G.W.Van Osterhout, Philips Res.Rep,5,173 (1950).
- [12] H.S.C. O'Neill, A.Navrotsky, "Simple spinels; crystallographic parameters, cation.
- [13] E.Schrodinger, Phys.Rev.28, 1049 (1926)