

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF DE M'SILA

FACULTE DES SCIENCES ET SCIENCES DE L'INGENIEUR

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE DE SOUTENANCE DE THESE DE

MAGISTERE

EN PHYSIQUE ET CHIMIE DES MATERIAUX

Option : Chimie Inorganique

Présenté par

BARKA FATIHA

THEME

**LA CORRELATION ENTRE L'IONICITE ET LES FACTEURS
DE FORME SYMETRIQUES ET ANTISYMETRIQUES DANS
LES SEMICONDUCTEURS**

Soutenu le : 08 / 07 / 2004

Devant le jury composé de :

Mr . N.CHELLALI	Professeur	Président	C.U.B.B.A
Mr . N. BOUARISSA	Professeur	Rapporteur	U.M.B. M'sila
Mr . A. DEKHOUCHE	Maître de conférence	Examineur	U.M.B. M'sila.
Mr . D. OUALI	Maître de conférence	Examineur	U.M.B. M'sila .

Résumé

Le but de ce travail est d'étudier la variation des facteurs de forme symétriques $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$, et antisymétriques $V_a(3)$, $V_a(4)$, $V_a(11)$, des pseudopotentiels en fonction de l'ionicité dans les semiconducteurs suivants :

IV: Ge, Si .

III-V : AlSb, GaSb, AlAs, GaAs, InSb, AlN, InN, InP, InAs.

II- VI : MgS, MgSe, ZnS, ZnSe.

Dans cette étude, on a utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels (E.P.M) afin de calculer la structure de bande électronique et par conséquent le facteur d'ionicité .Ce dernier a été calculé en utilisant le gap antisymétrique et l'énergie de cohésion .

Nos calculs ont montré que le gap antisymétriques dans des résultats plus proches à ceux de littérature .

Mots clés : Ionicité , Pseudopotentiel , Semiconducteur .

ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة تغيرات عوامل الشكل المتناظرة $V_s(11)$, $V_s(8)$, $V_s(3)$ وضد المتناظرة $V_a(11)$, $V_a(4)$, $V_a(3)$ للكومات الكاذبة بدلالة الأيونية لأشباه النواقل التالية :

IV: Ge, Si .

III-V : AlSb, GaSb, AlAs, GaAs, InSb, AlN, InN, InP, InAs.

II- VI : MgS, MgSe, ZnS, ZnSe.

في هذه الدراسة استعملنا الطريقة التجريبية للكومات الكاذبة من أجل حساب بنية العصابات الإلكترونية وبالتالي الأيونية. هذه الأخيرة حسبت باستعمال العصابة ضد المتناظرة وطاقة الالتحام. أظهرت حساباتنا أن العصابة ضد المتناظرة تعطي نتائج قريبة من النتائج النظرية .
الكلمات المفتاحية : الأيونية ، الكومات الكاذبة ، أشباه النواقل .

Abstract

The purpose of this work is to study the variation of the symmetric form factors $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$, and antisymmetric form factors $V_a(3)$, $V_a(4)$, $V_a(11)$ of the pseudopotential in function of the ionicity in the following semiconductors :

IV: Ge, Si .

III-V : AlSb, GaSb, AlAs, GaAs, InSb, AlN, InN, InP, InAs.

II- VI : MgS, MgSe, ZnS, ZnSe.

In this study the empiric pseudopotential method has been used in order to calculate the electronic band structur thus, the ionicity factor . This last has been calculated using the antisymmetric gap and the cohesion energy .

Our calculations have shown that, the antisymmetric gap has given a close results to the one in the literature .

REMERCIEMENTS

Je tiens à présenter mes remerciements les plus distinguées et ma profonde reconnaissance à mon promoteur Mr : N bouaissa d'avoir accepté de diriger ce travail et pour ses fructueux conseils .

J'exprime ma gratitude à Mr : D.Ouali pour l'honneur qu'il me fait en acceptant la présidence de se jury .

J'adresse mes plus sincères remerciements aux membres de jury : Mr :N.Benouattas, Mr :Y.BenArioua, Mr:N.Bouchibi, Mr:C.Farsi qui m'ont fait l'honneur d'accepter de juger ce modeste travail .

J'adresse mes vifs remerciements à mon mari pour son soutien moral et son encouragement ainsi à Mer et Même Baaziz et à mon amie F.Barka pour leur aide.

SOMMAIRE

Introduction générale	1
------------------------------------	----------

Chapitre I

Les propriétés cristallines et énergétiques

des semiconducteurs	4
----------------------------------	----------

I.1 . Définition des semi-conducteurs.....	4
I.2. propriétés physiques essentielles des semi-conducteurs.....	4
I.3 . structure cristalline.....	4
I.4 . liaisons cristallines.....	6
I.4.1 . la liaison cristalline type Van Der Waals.....	6
I.4.2 . la liaison cristalline type ionique.....	8
I.4.3 . la liaison cristalline type covalents.....	10
I.4.4 . la liaison cristalline type métallique.....	12
I.4.5 . la liaison cristalline type mixte.	13
I.5 . le réseau réciproque.	13
I.6 . la zone de Brillouin.....	17
I.7 . le gap d'énergie.	18
I.7.1 . le gap direct.	19
I.7.2 . le gap indirect.	20

Chapitre II

La méthode des pseudopotentiels.....	22
---	-----------

II.1. l'équation de Schrödinger.....	22
--------------------------------------	----

II.2. l'approximation adiabatique	23
II.3.L'approximation de Hartree-Fock.....	23
II.4.La méthode des pseudopotentiels.....	24
II.4.1. Formalisme mathématique	24
II.4.2. Les modèles des pseudopotentiels.....	26
II.4.2.1.Le modèle local.....	26
II.4.2.Le modèle non local.....	28
II.5.La méthode empirique des pseudopotentiels.....	28
II.5.1.L'approximation empirique locale.....	29

Chapitre III

Résultats et discussion.....	32
III.1.Introduction.....	32
III.2.Le facteur d'ionicté à partir de la structure de bande électronique.....	33
III.2.1.Calcul le facteur d'ionicté en utilisant le gap E_g^x	37
III.2.2.Calcul le facteur d'ionicté en utilisant l'énergie de cohésion.....	39
III.3. la relation entre les facteurs de forme et les facteurs d'ionicté.....	42
Conclusion générale	61

Références.

Introduction générale

Les semis-conducteurs ont des intérêts considérables en technologie surtout pour la réalisation des composants électroniques et optoélectroniques.

Les éléments du groupe IV, particulièrement le silicium et le Germanium sont la base de l'industrie de la micro-électronique dont les principaux avantages sont : la miniaturisation des circuits et l'accroissement de la vitesse de fonctionnement[1].

Les composés binaires ZnS et ZnSe sont utilisés pour la réalisation des diodes électroluminescentes et les laser à semiconducteurs couvrant la gamme de fréquence bleu - vert [2,3]. Les semiconducteurs III-V à base de nitrogène (InN ,AlN) ont de large gap énergétique et de forte énergie de la liaison ,ce qui permet de les utiliser pour la fabrication des dispositifs électroluminescents violet bleu et vert ,les transistors à haute température et les lasers à semiconducteurs[4].

Le Germanium et le Silicium se cristallisent dans la structure diamant cette dernière est constituée de deux réseaux cubiques faces centrées imbriqués, décalés l'un de l'autre du quart de la diagonale principale. La maille élémentaire contient deux atomes de Silicium ou bien de Germanium, les atomes en position (0,0,0) et (1/4,1/4 ,1/4), chaque atome a une coordination tétraédrique et établit des liaisons covalentes avec chacun de ses quatre voisins.

Le réseau de la blende ZnS est une variante du précédent, il est constitué de deux réseaux cubiques faces centrées, l'un de Zn et l'autre de S décalés du quart de la diagonale principale. C'est le réseau dont lequel cristallisent tous les composés III -V(AlSb ,GaSb ,AlAs GaAs ,InSb ,Inp, InAs ,AlN ,InN) et certains composés II-VI (ZnSe ,ZnS ,MgS , MgSe). Chaque atome III a une coordination

tétraédrique avec quatre atomes V, les atomes étant différents, les liaisons sont partiellement covalentes et partiellement ioniques[5].

Pour déterminer la nature de liaison dans le cristal, il faut calculer le facteur d'ionicté, ce dernier est l'objet de très importantes dernières recherches, mais à tous ces recherches, le facteur de l'ionicté a été calculé à partir de la densité de charge [6-8].

Dans ce mémoire, on a procédé une méthode différente pour calculer l'ionicté des semiconducteurs, c'est la structure de bande électronique. Plusieurs méthodes théoriques ont été utilisées pour calculer la structure de bande électronique des matériaux, parmi les : La méthode empirique des pseudopotentiels qui donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience [9-12].

Le pseudopotentiels empirique est défini comme étant la superposition des potentiels atomiques qu'on écrit sous la forme.

$$V_p(r) = V_L(r) + V_{NL}(r \cdot E)$$

Où :

$V_L(r)$ et $V_{NL}(r \cdot E)$ sont respectivement les parties locales et non locales du pseudopotentiel.

Dans ce travail, on se contente de la partie locale de telle sorte qu'on a :

$$V_p(r) = V_L(r) = \sum_G V(G) \cdot S(G) \exp(i \cdot Gr)$$

Où :

V(G) sont les facteurs de forme qui sont déterminés par une méthode d'ajustement basé sur la méthode des moindres carrés non-linéaire [13].

Dans notre calcul, nous avons utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels afin de calculer la structure de bande électronique des semiconducteurs suivants :

IV : Si, Ge.

III-V : AlSb , GaSb , AlAs , GaAs , InSb , AlN , InN, InP.

II-VI : ZnS , ZnSe , MgS , MgSe .

A partir de la structure de bande électronique, nous avons calculé le facteur d'ionicté puis on a essayé de trouver la relation entre l'ionicté et les facteurs de formes symétriques et antisymétriques du pseudopotentiel.

- Ce mémoire est organisé comme suit:

le premier chapitre traite les propriétés cristallines et énergétiques des semiconducteurs dont le quel on a étudié :

- La structure Zinc blende et les liaisons chimiques qui assurent la cohésion du cristal.
- L'espace d'étude, c'est le réseau réciproque.
- Le gap d'énergie.

Le deuxième chapitre est consacré à la méthode des pseudopotentiels que nous avons utilisée afin de calculer la structure de bande électronique.

Le troisième chapitre résume les résultats obtenus, ces résultats sont accompagnés par des discussions et des interprétations.

Finalement notre travail est achevé par une conclusion générale.

CHAPITRE I

Les propriétés cristallines et énergétiques des semiconducteurs

I.1.Définition des semiconducteurs

Les semiconducteurs sont définis comme des isolants à faible bande interdite[14].

I.2.propriétés physiques essentielles des semiconducteurs [14]

- a- les semiconducteurs sont sensibles à la lumière visible, mais transparents dans l'infrarouge.
- b - leur résistance est compris entre 10^{-5} et $10^{+6} \Omega$.
- c- leur résistivité diminue quand la température augmente au contraire des métaux.

I.3.structure cristalline

les semiconducteurs III-V et certains composés II-VI forment un cristal avec arrangement Zin-blende (fig.I.1), qui est une structure d'origine cubique ,appartenant un groupe spécial F_{43m} où les atomes du réseau sont à liaisons tétraédriques .La maille élémentaire de cette structure est identique a celle du

diamant avec la seule différence est que chaque atome d'un élément est entouré tétraédriquement par quatre atomes de l'espèce opposée. De ce fait, les alliages cristallisant dans la structure Zinc-blende sont des cristaux simples manquant d'un centre de symétrie. On note que cette structure présente un taux de compacité d'ordre 0.35 (taux de remplissage).

Elle est donc considérée comme étant une structure ouverte, d'où la possibilité d'insertion d'atomes légers [15-17].

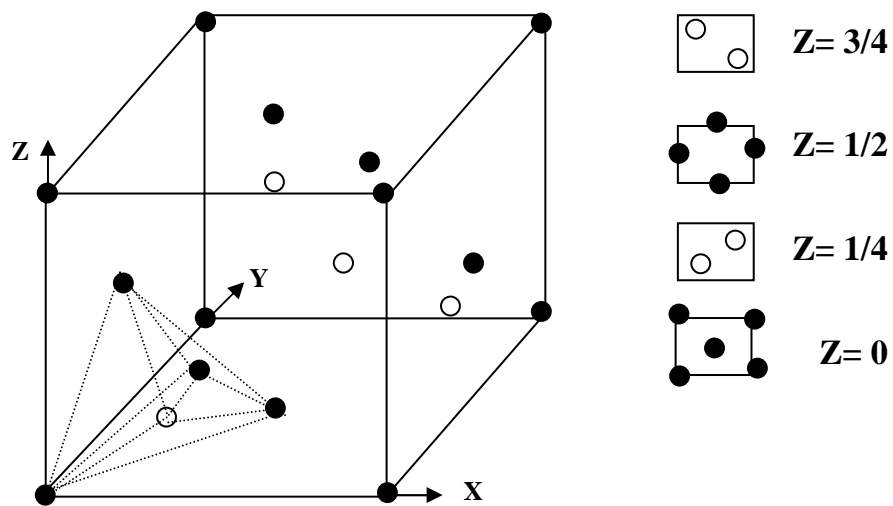


Figure I.1: La structure Zinc-blende.

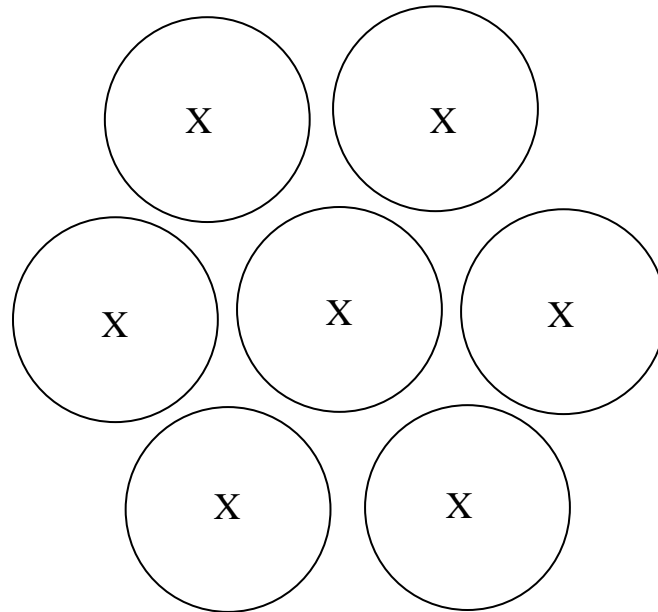
I.4.liaisons cristallines

Le solide semiconducteur est un ensemble d'atomes ou des molécules disposés selon un réseau particulier, la question qu'on peut se poser est de savoir quelles sont les forces qui maintiennent ces atomes et molécules dans un tel état?

Dans un solide la distance inter -atomique ou inter moléculaire est comparable a la taille atomique ou moléculaire .Le solide peut être imaginé comme une molécule géante où les forces de cohésion sont le résultat de l'interaction du nuages électronique et telle que le réseau obtenu forme un système thermodynamiquement stable .cette interaction électronique conduit à plusieurs types de liaisons [18].

I.4.1.la liaison cristalline type Van Der Waals

Dans certains solides les molécules sont si stables que l'interaction inter-moléculaire est très faible. Dans un tel cas, la force de liaison est due à l'interaction des dipôles électriques des molécules. Ce dipôle électrique est lui-même du aux fluctuation électronique a l'intérieur de la molécule. Ce type de liaison est dit liaison type Van Der Waals (fig.I.2). L'énergie mise en jeu dans une telle liaison est de l'ordre (0,01ev). C'est pour quoi, ce type de liaison n'existe qu'à basse température. Les solides ainsi formés seront faciles à déformer ou compresser. D'autre part la stabilité de la molécule fait d'eux de très mauvais conducteurs de la chaleur et de l'électricité [18].



X = atome d'Argon , d'Azote

Figure I.2 : la liaison cristalline type Van Der Waals .

I.4.2. La liaison cristalline type ionique

Les cristaux ioniques résultent de l'association d'un élément fortement électropositif et d'un élément fortement électronégatif .l'élément électropositif à généralement un seul électron périphérique (métaux alcalins :Li,Na,K,Rb,Cs)qu'il cède facilement cet électron pour devenir un ion positif avec une configuration électronique stable de couche saturée .l'élément électronégatif à généralement sept électrons (halogènes :F,Cl,Br,I),il accepte facilement un huitième électron pour devenir un ion négatif avec une configuration électronique stable .les deux ions ainsi créées sont liés par attraction coulombienne ,d'ou le nom de cristaux ioniques que l'on donne au cristaux tels que NaCl. (fig.I.3)

L'électron libéré par le métal alcalin est fortement fixé sur l'halogène de sorte qu'aucun électron n'est libéré dans le réseaux des matériaux ces cristaux sont des isolants. En outre, l'énergie de liaison entre les atomes est très importante de sorte que ces cristaux sont généralement très durs [5].

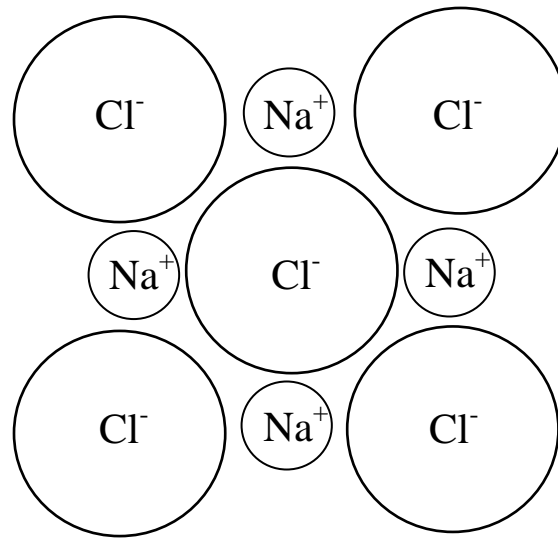


Figure I.3 : la liaison cristalline type ionique

I.4.3. La liaison cristalline type covalent

La liaison covalente est habituellement formée de deux électrons provenant de chacun des atomes liés. Les électrons participant à la liaison tendent à être partiellement localisé entre les deux atomes liés. Les spins des deux électrons de la liaison sont antiparallèles [19]. Cette liaison (fig.I.4), est forte et c'est pour quoi les solides covalents sont difficiles à déformer et ont des température de fusion élevées (937.1 C°-pour Ge ,1410C°- pour Si). Comme ce type de liaison ne produit pas des électrons libres, les solides covalents ne sont pas des bons conducteurs de chaleur ni de l'électricité [18].

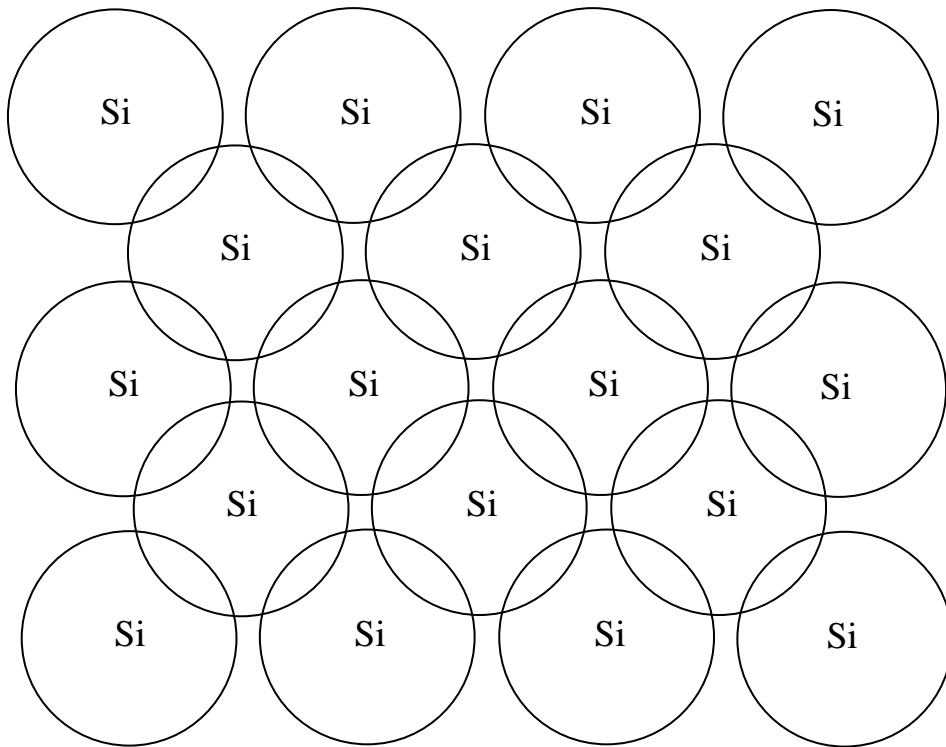


Figure I.4 : La liaisons cristalline type covalent

I.4.4. la liaison cristalline type métallique

Les solides où la liaison est du type métallique peuvent être considérés comme un cas limite des solides covalents où les électrons de valence sont partagés entre tous les atomes du cristal. Ces électrons deviennent libres, à relativement basse température, il se déplacent dans le potentiel électrostatique créé par l'ensemble des ions du solides. On parle souvent de gaz d'électrons (Fig.I.5) évidemment ces électrons peuvent absorber l'énergie d'un point du solides et sous l'influence d'un gradient de température ou d'un champs électrique, vont la transporter à une autre point du solides [18].

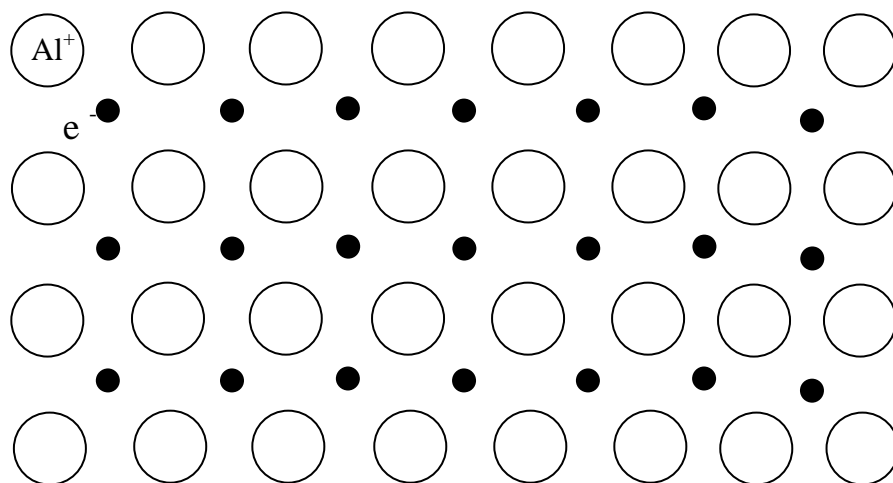


Figure : I.5 : La liaison cristalline type métallique.

I.4.5. la liaison cristalline type mixte

Pour certains solides la cohésion cristalline ne peut être interprétée que comme une mixture des principales liaisons précédentes.

I.5. Le réseau réciproque

En physique des semiconducteurs, on associe souvent à chaque structure cristalline deux réseaux importants: Le réseau direct ou de Bravais et le réseau réciproque. Le réseau de Bravais correspond à l'espace réel ou physique. Dans un tel espace les vecteurs \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} du réseau ont la dimension d'une longueur. Donc une image du réseau direct est toute image faite du solide lorsqu'il est examiné au microscope, par exemple. Le réseau réciproque quant-à-lui correspond à l'espace des vecteurs d'onde.

Dans cet espace les vecteurs du réseau ont la dimension de l'inverse d'une longueur. une image du réseau réciproque et tout image faite du solide par diffraction des rayons -X-ou des électrons.

L'intérêt d'associer à tout réseau direct un réseau réciproque est considérable. Ce dernier permet de:

- Simplifier certains calculs de cristallographie géométrique.
- formuler de façons simples la théorie de la diffraction des rayonnements par les cristaux.
- Exprimer commodément de nombreuses autres propriétés des cristaux (diffusion atomique, propriétés optiques).

Les vecteurs fondamentaux de ces deux réseaux ne sont pas indépendants. N'oublions pas que le réseau direct et le réseau réciproque représentent une même et unique structure cristalline, Les vecteurs fondamentaux \vec{A} , \vec{B} , \vec{C} , du

réseau réciproque sont liés aux Les vecteurs fondamentaux a,b,c, du réseau direct par les définition suivantes [18] :

$$\left. \begin{aligned} \vec{A} &= 2\pi (\vec{b} \wedge \vec{c}) / (\vec{a} \cdot \vec{b} \wedge \vec{c}) \\ \vec{B} &= 2\pi (\vec{c} \wedge \vec{a}) / (\vec{b} \cdot \vec{c} \wedge \vec{a}) \\ \vec{C} &= 2\pi (\vec{a} \wedge \vec{b}) / (\vec{c} \cdot \vec{a} \wedge \vec{b}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{I.1})$$

Où :

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{b} \wedge \vec{c} &= (\vec{b} \cdot \vec{c} \wedge \vec{a}) \\ &= (\vec{c} \cdot \vec{a} \wedge \vec{b}) \\ &= V_e \end{aligned}$$

V_e : le volume de la maille élémentaire du réseau direct.

On peut définir, de la même manière que dans le réseau réciproque, un vecteur de translation.

$$\vec{G} = h \vec{A} + k \vec{B} + l \vec{C} \quad (\text{I.2})$$

Qui nous permettra d'engendrer tout le réseau réciproque. Les nombres h, k, l sont trois entiers positifs, négatifs ou nuls.

Il découle des relations (I. 1) et (I.2) les caractéristiques suivants:

- un vecteur du réseau réciproque est normal à un plan du réseau direct .En effet, on démontre facilement que:

$$\left. \begin{aligned}
 \vec{A} \cdot \vec{b} = \vec{A} \cdot \vec{c} = 0 \quad \text{soit A normale au plan } (\vec{b}, \vec{c}) \\
 \vec{B} \cdot \vec{a} = \vec{B} \cdot \vec{c} = 0 \quad \text{soit B normale au plan } (\vec{a}, \vec{c}) \\
 \vec{C} \cdot \vec{a} = \vec{C} \cdot \vec{b} = 0 \quad \text{soit C normale au plan } (\vec{a}, \vec{b})
 \end{aligned} \right\} \quad (I.3)$$

D'une manière générale, on démontre que toute rangée du réseau réciproque est perpendiculaire à une famille de plans réticulaires du réseau direct dont les indices de Miller sont égaux aux indices de la rangée réciproque. En effet, soit $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$ un vecteur du réseau réciproque correspondant à la rangée (h k l) (n=h, m=k, p=l).

Un plan réticulaire (h k l) du réseau direct a pour équation :

$$Hx+ky+lz = t \quad \text{et pour coordonnées } (t/h, t/k, t/l).$$

Un vecteur de ce plan est tout vecteur qui joint deux coordonnées (Fig I-6)

Donc:

$$\left. \begin{aligned}
 \vec{P} &= - (t/k)\vec{b} + (t/h)\vec{a} \\
 \vec{Q} &= - (t/l)\vec{c} + (t/k)\vec{b} \\
 \vec{S} &= - (t/h)\vec{a} + (t/l)\vec{c}
 \end{aligned} \right\} \quad (I.4)$$

Et on vérifie facilement que :

$$\left. \begin{aligned}
 \vec{G} \cdot \vec{P} &= 0 \\
 \vec{G} \cdot \vec{Q} &= 0 \\
 \vec{S} \cdot \vec{G} &= 0
 \end{aligned} \right\} \quad (I.5)$$

La relation (I - 5) montre que la rangée réciproque est perpendiculaire au plan (hkl) du réseau direct .

*Les vecteurs du réseau réciproque représentent une fraction de ceux du réseau direct

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{a} &= \vec{B} \cdot \vec{b} \\ &= \vec{C} \cdot \vec{c} \\ &= 2 \pi. \end{aligned}$$

L'équidistance d_{hkl} des plan réticulaires du réseau direct est l'inverse du module G_{hkl} du vecteur correspondant à la rangée réciproque qui leur est perpendiculaire.

$$d_{hkl} = \frac{1}{G_{hkl}}$$

On remarque que plus les plans réticulaires (hkl) du réseau direct sont écartés, plus les nœuds de la rangée réciproque de même indices sont serrés.

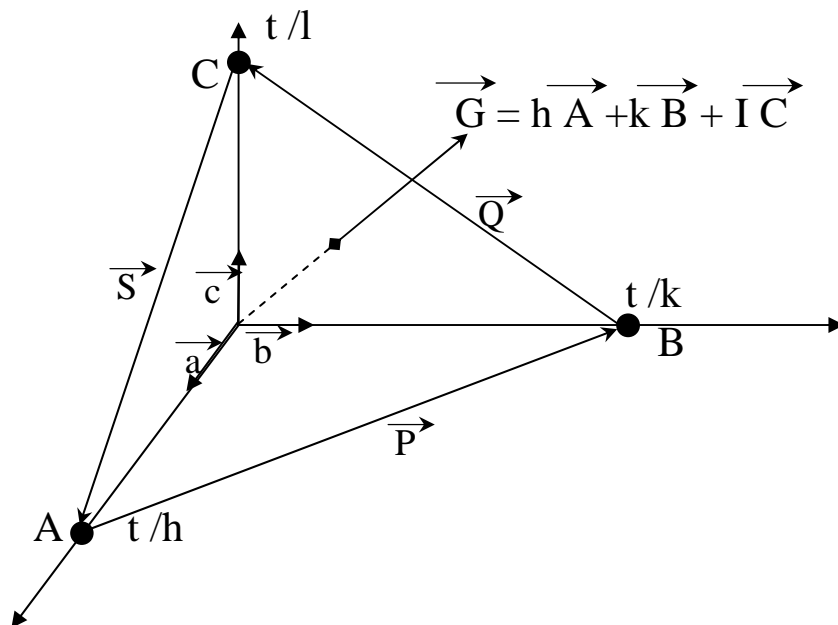


Figure I.6 : la rangée réciproque correspondant au vecteur G est perpendiculaire au plan (hkl) du réseau direct

I.6.La zone de Brillouin

Une zone de Brillouin est par définition la maille de Wigner Seitz du réseau réciproque, et satisfaisant à la condition de diffraction de Bragg. Considérons les plans médiateurs des différents vecteurs G du réseau réciproque à partir de l'origine. Ces plans divisent l'espace de Fourier du cristal. La maille élémentaire du réseau réciproque a une importance particulière dans la théorie des solides et nous l'appelons "première zone de Brillouin".

La première zone de Brillouin est le petit volume entièrement compris entre les plans médiateurs des vecteurs du réseau réciproque tracés à partir de l'origine [20].

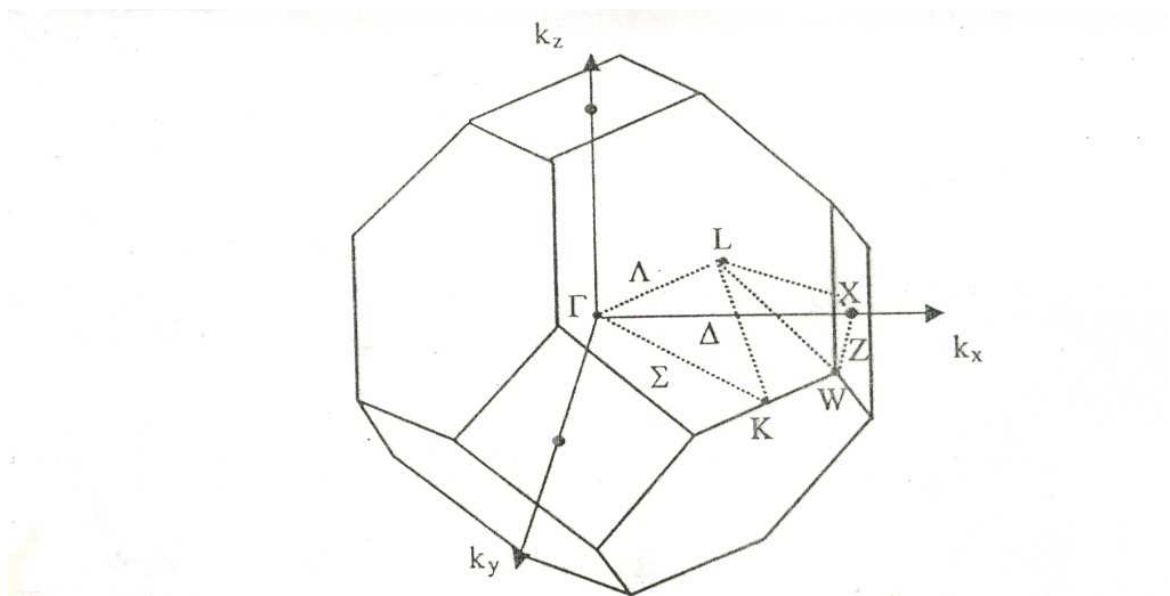


Figure I.7: La zone de Brillouin

I.7. Le gap d'énergie

Le gap est la bande interdite, c'est -à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [5].

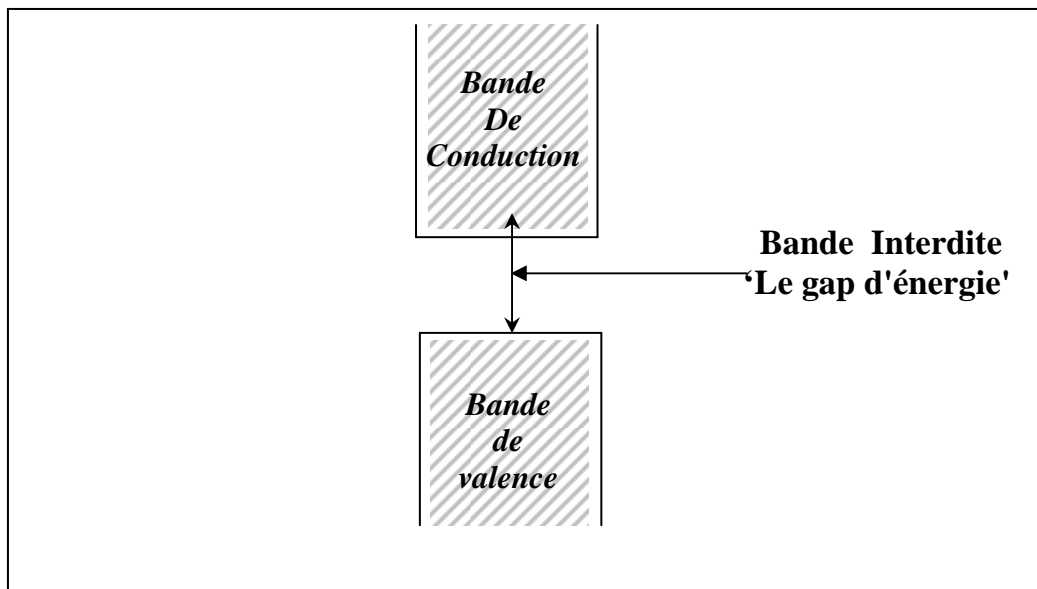


Figure I.8 : Le gap d'énergie "bande interdite"

Il y a deux types de gap d'énergie:

I.7.1. Le gap direct

Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés au même point de l'espace K [5] comme le montre la figure (I.9).

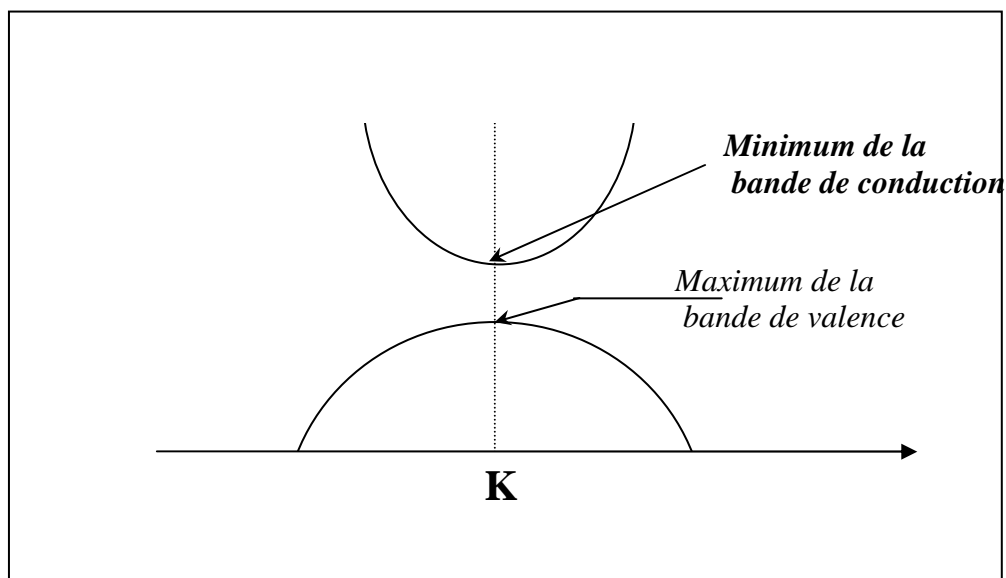


Figure 1.9 : le gap direct

I.7.2. Le gap indirect

le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des point différent de l'espace de K [5] comme le montre la figure (I.10).

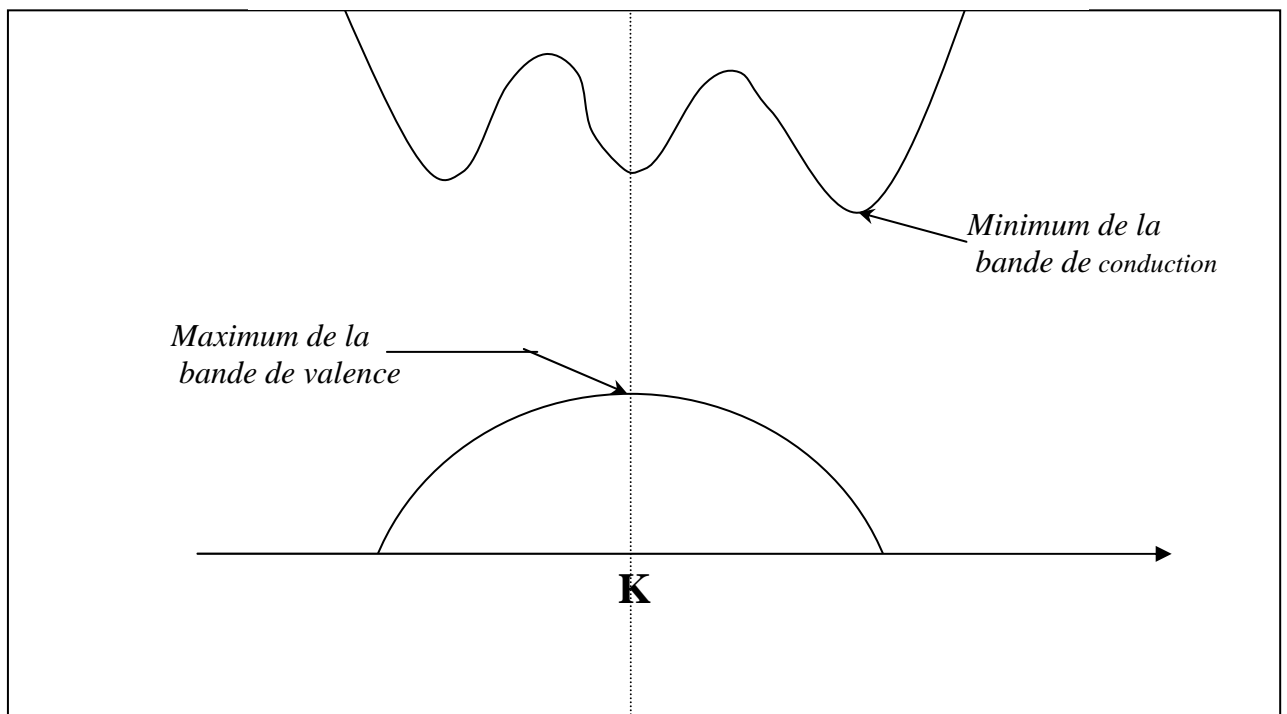


Figure I.10 : Le gap indirect

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique et par suite dans le fonctionnement des composants optoélectroniques. Le tableau suivant montre la

structure cristalline, la nature de gap et l'énergie de cohésion des semiconducteurs utilisés dans ce mémoire.

<i>Semiconducteurs</i>	<i>Structure Cristalline</i>	<i>Nature du gap</i>	<i>Energie de cohésion [e.v]</i>
Si	diamont	indirect [5]	2.32 [22]
Ge	diamont	indirect [21]	1.94 [22]
AlSb	zinc blende	indirect [21]	
AlAs	zinc blende	direct [21]	1.89 [22]
GaSb	zinc blende	direct [5]	1.48 [22]
InN	zinc blende	direct [5]	1.93 [22]
InP	zinc blende	direct [5]	1.74 [22]
InAs	zinc blende	direct [5]	1.55 [22]
InSb	zinc blende	direct [5]	1.40 [22]
ZnS	zinc blende	direct [5]	1.59 [22]
ZnSe	zinc blende	direct [5]	1.29 [22]
MgS	zinc blende	direct [5]	
MgSe	zinc blende	indirect [21]	
AlN	zinc blende	direct [21]	2.88 [22]
GaAs	zinc blende	direct [21]	1.63 [22]

Tableau I-1 :la structure cristalline ,nature de gap et l'énergie de cohésion des semiconducteurs utilisés dans ce mémoire

CHAPITRE II

La méthode des pseudopotentiels

II.1. L'équation de Schrödinger

Tout cristal semi-conducteur constitue un système comportant un nombre extrêmement grand de noyaux atomiques et d'électrons.

La résolution de l'équation de Schrödinger caractérisant ce système permettrait de décrire ses propriétés quantiques [23].

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{II-1})$$

Où :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en} \quad (\text{II-2})$$

H : l'hamiltonien total d'un cristal .

T_e : l'énergie cinétique des électrons .

T_n : l'énergie cinétique des noyaux .

V_{ee} : l'énergie d'interaction electron- electron .

V_{nn} : l'énergie d'interaction noyau – noyau .

V_{en} : l'énergie d'interaction électron – noyau .

Ψ : la fonction d'onde du système.

E : l'énergie total e du système.

L'équation (II-1) donne formellement les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde du cristal , mais ne peut-être résolu qu'en faisant un certain nombre d'approximation .

II.2. L'approximation adiabatique

Cette approximation conduit à la séparation du Hamiltonien total en une partie électronique et une partie reliée aux noyaux .

Le problème de la structure de bande ne s'intéresse qu' au comportement des électrons dans le cristal, c'est pourquoi elle ignore les vibrations des noyaux qui sont considérés immobiles [5]. Donc, on peut écrire l'hamiltonien des électrons H_e comme :

$$H = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (\text{II-3})$$

II.3. L'approximation de Hartree- Fock

Elle consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment dans un champs moyen crée par les autres électrons et noyaux . Donc, cette approximation ramène le problème à N corps au problème à un seul électron[3,4]

L'hamiltonien peut-être écrit comme une somme des hamiltoniens décrivant un seul électron [24,25] .

$$H = H_e = \sum_i H_i \quad (\text{II-4})$$

avec :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(r) \quad (\text{II-5})$$

Où :

$V(r)$; le potentiel moyen du cristal possédant la périodicité du réseau . Il contient le potentiel périodique du aux ions et les effets dus aux interactions de l'électron avec les autres électrons

II.4. La méthode des pseudopotentiels

Cette méthode fut introduite par Fermi en 1939 [26] pour étudier les états atomiques des couches minces . Dans l'année suivante, Hellman [26] proposa que cette méthode peut être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des matériaux alcalins .Cependant ,c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à philips et kleinman en 1959 [26].Elle utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et de conduction avec les états du cœur .

L'effet d'orthogonalité est incluse dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel [27]

II.4.1. Formalisme mathématique

La fonction d'onde Ψ est donnée par la somme d'ondes planes Φ_K^V et des états atomiques occupés de cœur Φ_K^C [27]

$$\Psi_K(r) = \Phi_K^V(r) + \sum_C b_C \Phi_K^C(r) \quad (\text{II-6})$$

En utilisant la condition d'orthogonalité de Ψ_K avec chaque niveau du cœur on trouve :

$$\Psi_K = \Phi_K^V - \sum_C \langle \Phi_K^C / \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \quad (\text{II-7})$$

La fonction d'onde Ψ_K vérifie l'équation de Schrödinger (II-1) .

En remplaçant l'expression (II-7) dans l'équation (II-1) on obtient :

$$H\Phi_K^V - H \sum_C \langle \Phi_K^C / \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \Psi_K \quad (\text{II-8})$$

on sait que :

$$H\Phi_K^V = E_K^C \Phi_K^C \quad (\text{II-9})$$

donc :

$$H\Phi_K^V - E_K^C \sum_C \langle \Phi_K^C / \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \Psi_K \quad (\text{II-10})$$

$$H\Phi_K^V - E_K^C \sum_C \langle \Phi_K^C / \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \left[\Phi_K^V - \sum_C \langle \Phi_K^C / \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \right] \quad (\text{II-11})$$

$$H\Phi_K^V + \sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C / \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \Phi_K^V \quad (\text{II-12})$$

on pose :

$$V_R \Phi_K^V = \sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C / \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \quad (\text{II-13})$$

L'équation (II-12) peut être écrite d'une façon condensée

$$(H + V_R)\Phi_K^V = E_K^V \Phi_K^V \quad (\text{II-14})$$

L'hamiltonien du cristal H est donnée comme :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V_C \quad (\text{II-15})$$

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V_C + V_R \right) \Phi_K^V = E_K^V \Phi_K^V \quad (\text{II-16})$$

on pose

$$V_P = V_C + V_R \quad (\text{II-17})$$

Ou :

V_P : Le pseudopotentiel .

V_C : Le potentiel attractif

V_R : Le potentiel répulsif

II.4.2. Les modèles des pseudopotentiels

Le pseudopotentiel a une large application comme outil pour obtenir les structures de bandes électronique des matériaux, dans ce cas le modèle et le potentiel empirique (EPM) sont utilisés pour ajuster quelque propriétés des semi-conducteurs et de leurs alliages .

II.4.2.1. Le modèle local

Le modèle le plus simple consiste en un potentiel local dépendant de la variable r , à cet effet plusieurs formes de potentiel ont été proposées

Le premier modèle consiste en un potentiel de coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région du cœur . La forme de ce potentiel est [26] :

$$V(r) = \begin{cases} -Ze/r & \dots\dots\dots r > r_c \\ -Ze/r_c & \dots\dots\dots r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II.18})$$

Ou :

Z : le nombre d'électrons de valence .

r_c : le rayon de cœur .

Heirne et Aberenkov ont plus de flexibilité pour cet ajustement par l'introduction d'un potentiel A considère comme constant dans la région du cœur, dans ce cas la forme du potentiel sera [26-28] :

$$V(r) = \begin{cases} -Ze/r & \dots\dots\dots r > r_c \\ A & \dots\dots\dots r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-19})$$

En fin Ashcroft proposa une autre forme de potentiel qui est beaucoup utilisée, c'est le potentiel des cœurs inoccupé donné par [26-29] .

$$V(r) = \begin{cases} -Ze/r & \dots\dots\dots r > r_c \\ 0 & \dots\dots\dots r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

II.4.2.2. Le modèle non local

Le pseudopotentiel est essentiellement non local et dépend de r et de l'énergie E , il est donné par la forme suivante [30]:

$$V_{NL}(r, E) = \sum_l A_l(E) F_l(r) P_l \quad (\text{II-21})$$

Ou :

A_l : une fonction dépendante de l'énergie des états du cœur.

F_l : une fonction qui représente l'effet des états du cœur .

P_l : l'opérateur projecteur de la $l^{\text{ème}}$ composante des moments angulaires .

La fonction $F_l(r)$ peut prendre plusieurs formes telle que la forme Gaussienne [31.32] Hiene-Abernkov [33] et la forme de Aschkroft [34].

II.5. La méthode empirique des pseudo potentiel

C'est une autre image de la méthode des pseudo potentiels elle a été appliquée avec succès aux semi-conducteurs de structure diamant et Zinc-blend. Dans cette méthode empirique des pseudo potentiels qui s'est révélée très fructueuse, La structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelques termes de $V(G)$ que l'on obtient par des ajustements théorique aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux [27].

L'EMP a deux approximations importantes.

- L'approximation empirique locale.
- L'approximation empirique non locale.

II5.1. L'approximation empirique locale

L'hamiltonien d'un électron dans le cristal est donnée par:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V_p(r) \quad (\text{II-22})$$

Dans l'approximation local le potentiel $V_p(r)$ est représenté par superposition linéaire de potentiels atomiques :

$$V_p(r) = \sum_{R,t} V_a(r - R - t) \quad (\text{II.23})$$

Ou :

R : vecteur du réseau direct.

T : vecteur de base.

Si on étend le potentiel $V_p(r)$ dans le réseau réciproque, il aura la forme suivante :

$$V_p(r) = \sum_G V(G) S(G) e^{iGr} \quad (\text{II-24})$$

Ou :

S(G) : le facteur de structure donnée par :

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iGr) \quad (\text{II-25})$$

V(G) : le facteur d forme .

N_a : le nombre d'atomes de base.

L'approximation locale se base sur l'interpolation des facteurs de formes à partir des expériences. Donc le plus important dans se calcul est la connaissance des facteurs de formes.

Pour les semi-conducteurs diamant ou Zinc blende on à [21]

$$V(G) = V^s(G)\cos(Gt) + iV^a(G)\sin(Gt) \quad (\text{II-26})$$

Où

$$V^s(G) = \frac{1}{2}[V_A(G) + V_B(G)] \quad (\text{II-27})$$

$$V^a(G) = \frac{1}{2}[V_A(G) - V_B(G)] \quad (\text{II-28})$$

$$t = \pm \frac{1}{8}(1,1,1)a$$

a : la constante du réseau .

$V_A(G)$: le facteur de forme de l'atome A .

$V_B(G)$: le facteur de forme de l'atome B .

$V^s(G)$: les facteurs de formes symétriques .

$V^a(G)$: les facteurs de formes antisymétriques .

On peut résumer le calcul de LEPM qui est adaptée a notre travail par le diagramme suivant :



Organigramme de la méthode E.P.M

CHAPITRE III

Résultats et discussions

III .1 .Introduction

La connaissance de la densité de charge dans les solides présente un intérêt fondamental, dans le domaine des sciences des matériaux notamment les propriétés chimiques et physiques des semi-conducteurs. Elle nous renseigne sur le caractère de la liaison chimique [35] .

A partir les courbes de la densité de charge, on peut calculer la surface anionique S_A et la surface cationique S_C et par conséquent le facteur d'ionicté en utilisant la formule suivante [7].

$$F_i = \left[\frac{S_A}{S_A + \lambda \cdot S_C} \right]^\lambda \quad (\text{III . 1})$$

où :

S_A : la surface anionique

S_C : la surface cationique

λ : le paramètre sépare les éléments de forte ionicté des éléments de faible ionicté.

$\lambda = -1$ pour les éléments des groupes III – V

$\lambda = +1$ pour les éléments des groupes II – VI

Mais, cette formule a été utilisée dans plusieurs études précédentes c'est pourquoi, on va procéder une autre méthode différente afin de calculer le facteur d'ionicté, c'est « la structure de bande électronique » .

III.2. Le facteur d'ionicté à partir de la structure de bande électronique.

Les propriétés essentielles du solide sont déterminées par la répartition des niveaux d'énergie ce qu'on appelle « la structure de bande ». Fig. III.1-3 .

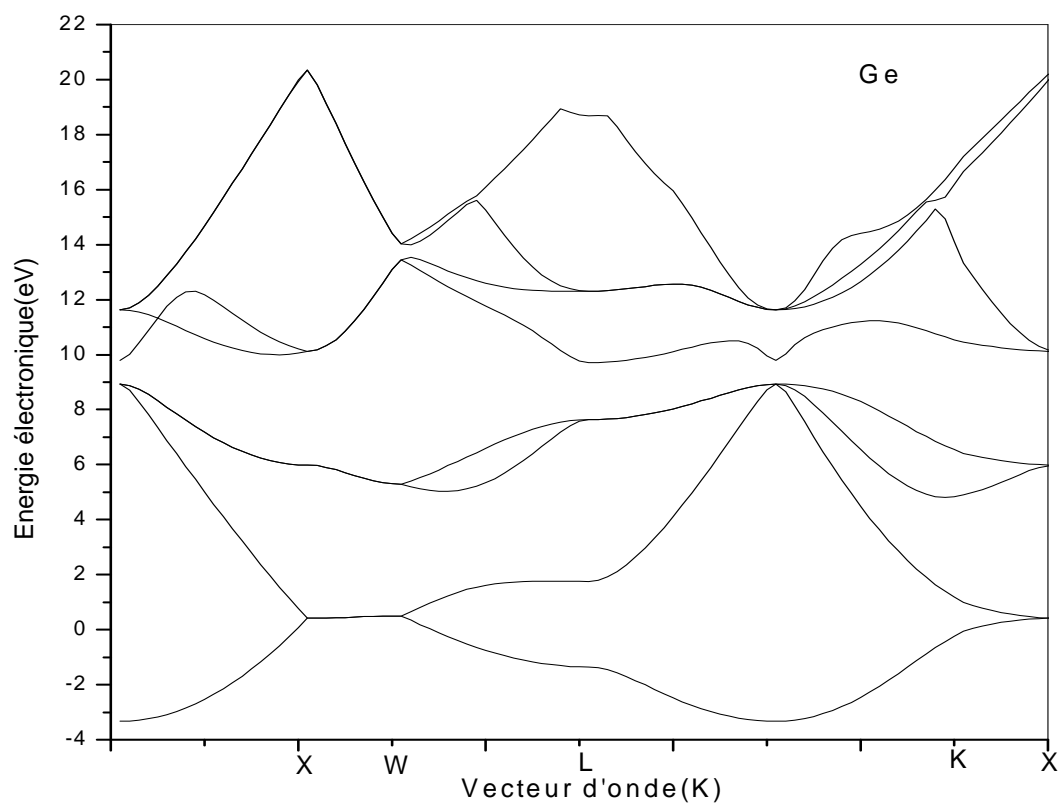


Figure III.1 : La structure de bandes électroniques de Ge

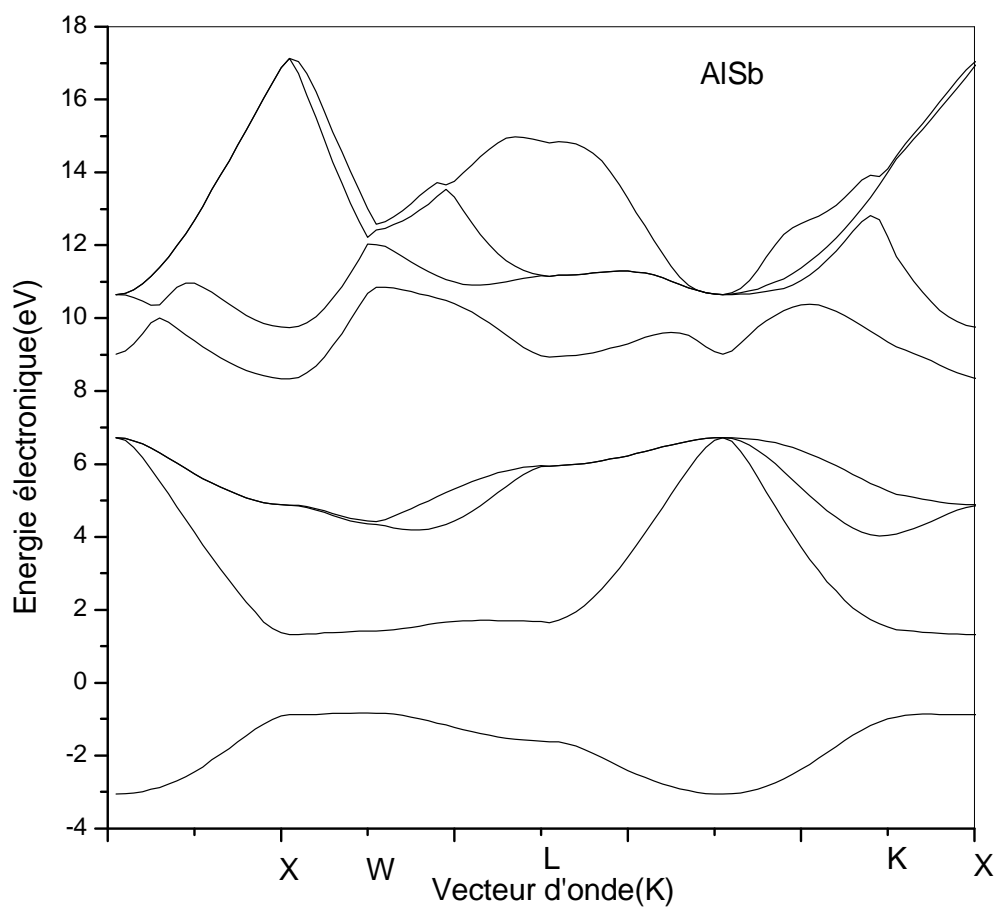


Figure III.2 : La structure de bandes electronique de AlSb

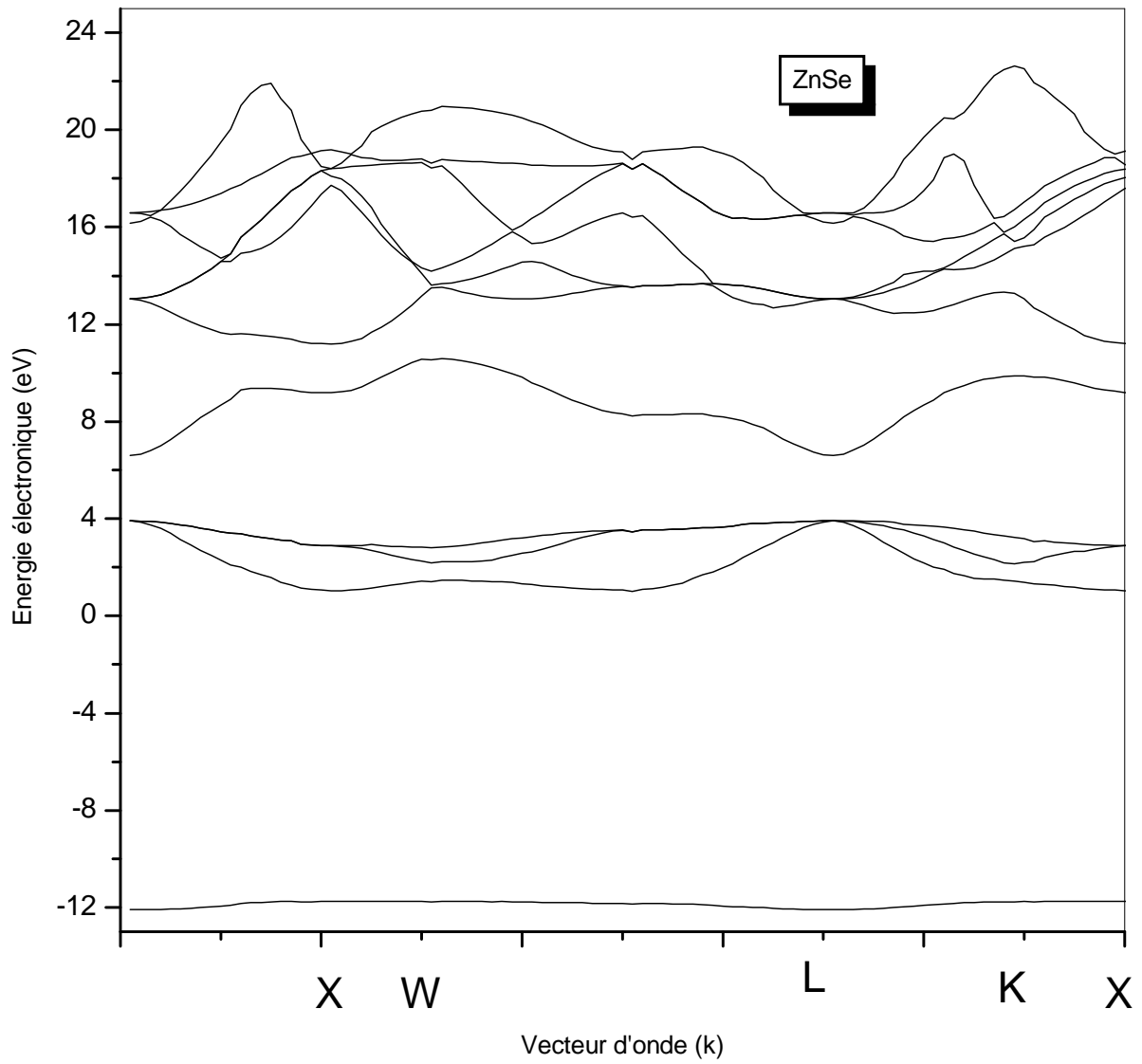


Figure III.3 : La structure de bandes électronique de ZnSe

III.2.1. Calcul le facteur d'ionicté en utilisant le gap E_g^x

Il a été rapporté dans la littérature que le gap antisymétrique E_g^x (le gap entre la première et la deuxième bande de valence au point x) est relié à l'ionicté du matériaux [36]. Ce gap a été confirmé par les calcules de N. Bouarissa et ses collaborateurs [25, 37, 38] dans leurs études sur les semiconducteurs de type IV , III-V , et II-VI . Il est important donc d'utiliser ce gap afin de calculer le facteur d'ionicté [39] :

$$F_i = \left[\left[\frac{E_g^x}{E_g^x - l} \right]^{-1} - 0.75 \right] - \left[\frac{l}{E_g^x} - 0.66 \right] \quad (\text{III} - 2)$$

où :

E_g^x : le gap antisymétrique au point x .

$l = 1$ ev .

Nos calculs sont illustres dans le tableau (III-1), d'après ce dernier on constate que le facteur d'ionicté augmente avec le gap antisymétrique et cette remarque confirme la relation entre les deux paramètres.

Semiconducteurs	E_g^x (eV)	F_i
Ge	0	0
Si	0	0
AlSb	2.20374	0.002
GaSb	2.59464	0.139
AlAs	3.45062	0.330
InSb	3.69996	0.369
GaAs	3.80541	0.384
ZnS	4.62546	0.477
InP	5.14561	0.521
InAs	5.15716	0.522
MgSe	6.65447	0.609
MgS	7.29105	0.635
AlN	9.04696	0.689
InN	9.31492	0.695
ZnSe	12.79756	0.754

E_g^x : le gap antisymétrique.

F_i : le facteur d'ionocité.

Tableau III-1 : le gap antisymétrique et le facteur d'ionocité des semiconducteurs étudiés.

III.2.2. Calcul de facteur d'ionicté en utilisant l'énergie de cohésion.

Pour définir la cohésion, nous comparons l'énergie totale du solide, cinétique plus potentielle, à l'énergie d'un nombre égal d'atomes neutres, libres, infiniment éloignés les uns des autres. Un cristal est stable si son énergie total est inférieur à l'énergie totale des atomes ou molécules libres. La différence entre l'énergie de l'atome libre et l'énergie cristalline est appelé l'énergie de cohésion, cette dernière est utilisée pour calculer le facteur d'ionicté selon la formule suivante [39]:

$$F_i = \left[\frac{E_{coh}}{2.E_{\Gamma_x}} \right] \lambda \quad (\text{III-3})$$

Où :

$\lambda = 0$: pour les éléments du groupe IV

$\lambda = 1$: pour les éléments des groupes III-V

$\lambda = 6$: pour les éléments des groupes II-VI

Nos calculs sont illustrés dans le tableau suivant:

Matériaux	$E_{\Gamma x}$ (ev)	E_{coh} (ev) [22]	F_i
Si	1.19 [41]	2.32	0
Ge	1.10 [41]	1.94	0
AlAs	2.16 [42]	1.89	0.437
AlSb	1.615 [42]	-	-
AlN	4.9 [43]	2.88	0.294
GaAs	1.81 [44]	1.63	0.450
GaSb	1.03 [44]	1.48	0.718
InN	2.51[45]	1.93	0.384
InP	2.21 [46]	1.74	0.394
InAs	1.37 [44]	1.55	0.566
InSb	1.63 [46]	1.40	0.429
ZnS	5.92 [47]	1.59	0.806
ZnSe	5.28 [47]	1.29	0.733
MgS	4.50 [48]	-	-
MgSe	4.05 [48]	-	-

E_g^x : le gap indirect $\Gamma \rightarrow x$.

F_{coh} : l'énergie de cohésion.

F_i : le facteur d'ionocité.

Tableau III-2 : L'énergie de cohésion, le gap indirect et le facteur d'ionocité des matériaux étudiés

Matériaux	$F_i(1^{ere} Méthode)$	$F_i(2^{eme} Méthode)$	$F_i [49]$	$F_i[50]$	$F_i [51]$
Si	0	0	0	0	0
Ge	0	0	0	0	0
AlAs	0.330	0.437	0.274	0.367	0.375
AlSb	0.002	-	0.250	0.163	0.230
AlN	0.689	0.294	0.449	-	0.794
GaAs	0.384	0.450	0.31	0.31	0.316
GaSb	0.139	0.718	0.261	0.108	0.169
InN	0.695	0.384	-	-	-
InP	0.521	0.394	0.421	0.534	0.506
InAs	0.522	0.566	0.357	0.553	0.450
InSb	0.369	0.429	0.321	0.303	0.294
ZnS	0.477	0.806	0.623	0.764	0.673
ZnSe	0.754	0.733	0.630	0.740	0.597
MgS	0.635	-	-	-	-
MgSe	0.609	-	-	-	-

Tableau III-3 : Les facteurs d'ionicté calculés comparés avec ceux de Phillips [49], Christensen et al [50], et Garacia et Cohen [51].

D'après ce tableau, On remarque que les résultats de la 1^{ère} Méthode sont plus proches à ceux de la littérature

III. 3 .La relation entre les facteurs de forme et le facteur d'ionicté

Le pseudopotentiel empirique est défini comme étant
La superposition des pseudopotentiels atomiques, qui est défini par :

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) + V_{NL}(\mathbf{r}) \quad (\text{III-4})$$

Où :

$V_L(\mathbf{r})$: La partie locale du pseudopotentiel .

$V_{NL}(\mathbf{r})$: la partie non locale du pseudopotentiel .

Dans ce travail, on s'est contenté de la partie locale donc l'expression (III- 4) devient :

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) \quad (\text{III- 5})$$

Et dans le réseau réciproque, il aura la forme suivante :

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) = \sum_G V(G) S(G) \exp i\mathbf{G}\mathbf{r} \quad (\text{III . 6})$$

Où :

$V(G)$ sont les paramètres du pseudopotentiel ou facteurs de forme, ces derniers ont été au départ tirés de la littérature, ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres cares [52 ,53], dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère consistant à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie qui est définie par :

$$\delta = \left[\sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m - N} \right]^2 \quad (\text{III} - 7)$$

Où :

$$\Delta E_{i,j} = E_{i,j}^{\text{exp}} - E_{i,j}^{\text{cal}}$$

$E_{i,j}^{\text{exp}}, E_{i,j}^{\text{cal}}$ sont respectivement les énergies observées et calculées entre l'état i avec $k = k_i$ du $m^{\text{ième}}$ paire (i,j) et N est le nombre de paramètre du pseudopotentiel empirique .

Les valeurs de départ de ces paramètres sont modifiées par itération jusqu'à minimisation de δ .

Les facteurs de forme symétriques et antisymétrique des matériaux précédents ajustés par cette méthode sont illustrés dans les deux tableaux suivants :

<i>Matériaux</i>	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$
Si	-0.231074	0.05656	0.068254
Ge	-0.294588	0.074802	0.001723
AlSb	-0.225597	0.028086	0.062230
GaSb	-0.191206	0.005	0.043533
AlAs	-0.212694	0	0.09275
GaAs	-0.239833	0.0126	0.059625
InSb	-0.201822	0.01	0.028443
InP	-0.213862	0.00	0.070499
InAs	-0.182147	0.00	0.047107
ZnS	-0.312933	0.021262	0.170554
MgSe	-0.241454	0.026	0.05
MgS	-0.209338	0.04	0.06
AlN	-0.309603	0.112783	0.067538
ZnSe	-0.207808	-0.008	0.036046
InN	-0.172195	-0.01555	0.044698

Tableau III-4 : les facteurs de forme symétriques ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés.

<i>Matériaux</i>	$V_a(3)$	$V_a(4)$	$V_a(11)$
Si	0	0	0
Ge	0	0	0
AlSb	0.007109	0.05896	0.004544
GaSb	0.045340	0.03	0.00
AlAs	0.068833	0.05	-0.0075
GaAs	0.06536	0.05	0.01
InSb	0.064645	0.03	0.015
InP	0.088818	0.06	0.03
InAs	0.094714	0.05	0.03
ZnS	0.030061	0.116000	0.129269
MgSe	0.15	0.089	-0.03
MgS	0.19	0.12	-0.03
AlN	0.28	0.33	0.015
ZnSe	0.342762	0.099	0.022
InN	0.238742	0.23210	-0.03143

Tableau III-5 : les facteurs de forme antisymétriques ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés.

Les figures (III.4-9) représentent la variation des facteurs de forme symétriques $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$ et antisymétriques $V_a(3)$, $V_a(4)$, $V_a(11)$ en fonction de l'ionocité qui a été calculé en appliquant la formule (III-2) .

La figure (III.4) montre que le facteur de forme $V_s(3)$ de silicium est grand que celui de Germanium et l'ionocité de ces deux éléments est nul.

Le facteur de forme symétrique $V_s(3)$ des éléments des groupes III-V varie aléatoirement avec l'augmentation de l'ionocité. Mais pour les éléments des groupes II-VI , le facteur de forme $V_s(3)$ varie généralement d'une manière uniforme .

Le facteur de forme $V_s(8)$, de Germanium est grand que celui de Silicium mais le facteur de forme $V_s(11)$ de ce dernier est grand que celui de Germanium. .Pour les deux groupes III-V et II-VI, les facteurs de forme varient d'une manière aléatoire avec l'augmentation de l'ionocité (fig.III .5,6).

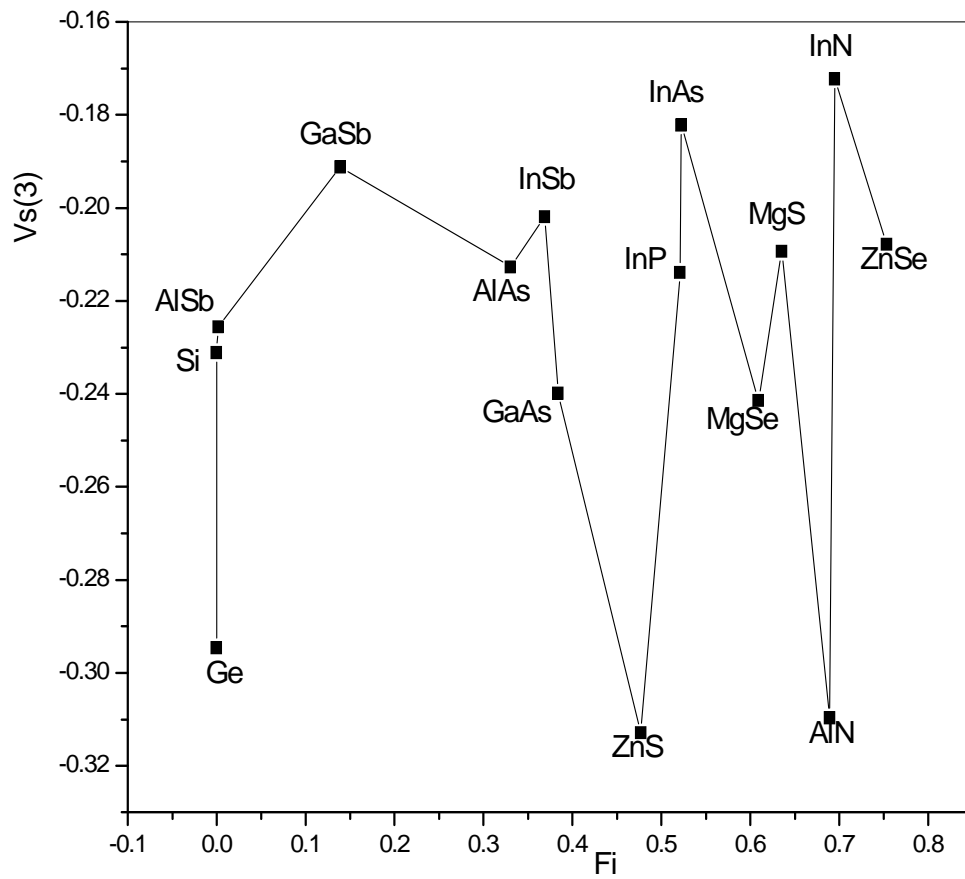


Figure III.4: La variation du facteur de forme $V_s(3)$ en fonction du facteur de l'ionicité

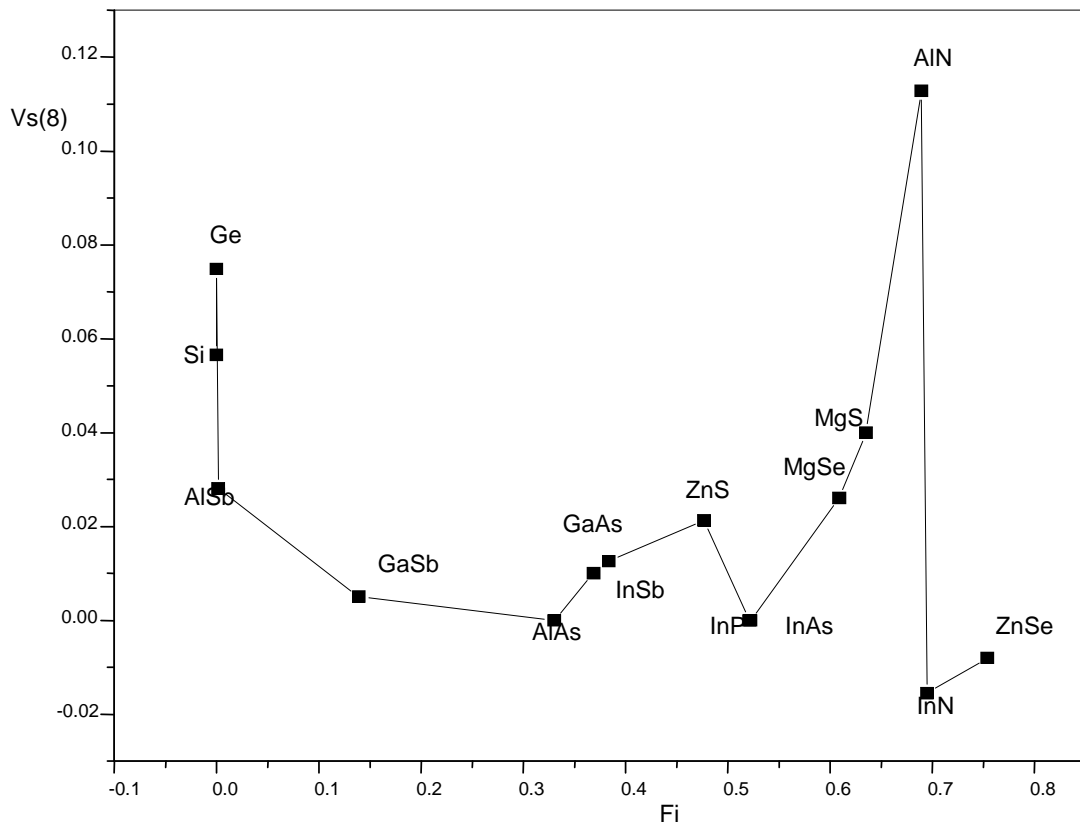


Figure III.5: La variation du facteur de forme $V_s(8)$ en fonction du facteur de l'ionicité

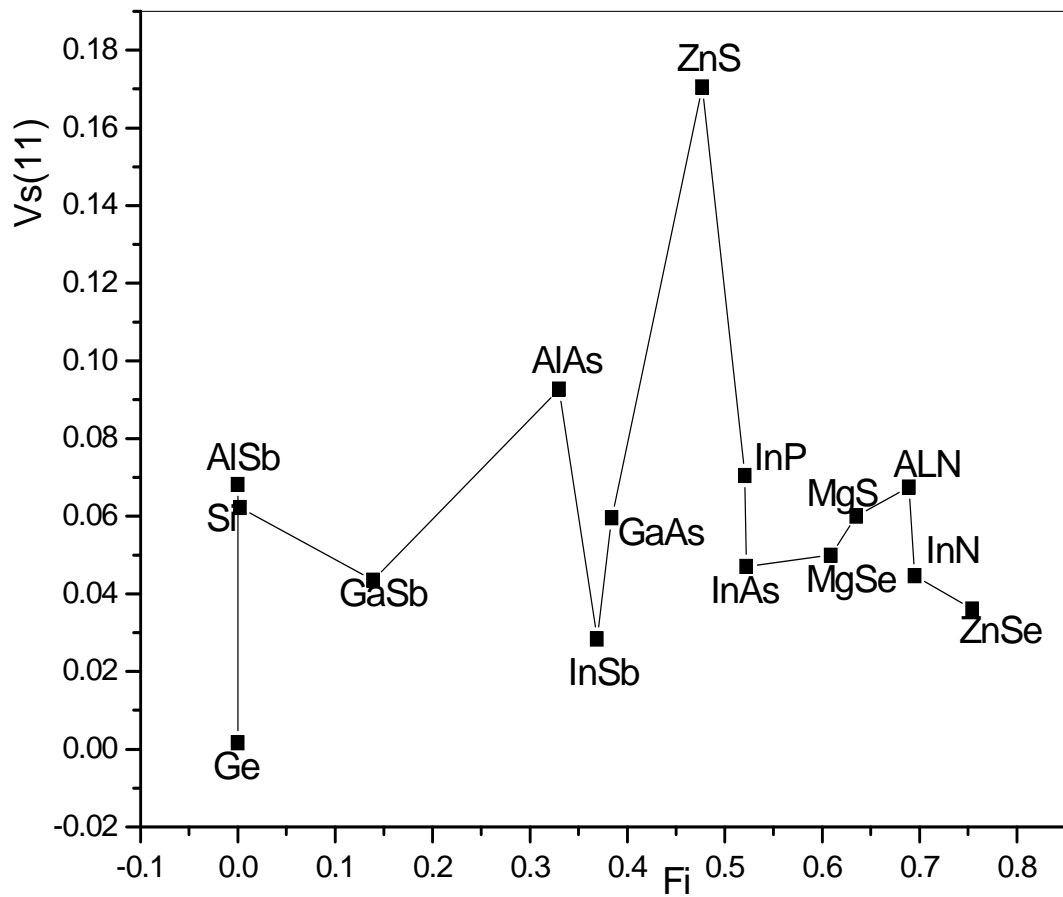


Figure III.6 :La variation du facteur de forme Vs(11) en fonction du facteur de l'ionicite

Les facteurs de forme antisymétrique $V_a(3)$, $V_a(4)$, $V_a(11)$ des éléments du groupe VI sont nuls (fig.III.7-9) .

La figure (III.7) montre que le facteur de forme $V_a(3)$ varie d'une manière uniforme avec l'augmentation de l'ionicté soit pour les éléments des groupes III-V ou bien les éléments des groupes II-VI. Donc, on peut dire que le facteur de forme antisymétrique $V_a(3)$, nous donne une idée sur l'ionicté des matériaux .

Les facteurs de forme antisymétriques $V_a(4)$, $V_a(11)$, varient d'une manière aléatoire avec l'augmentation de l'ionicté (fig.III.8,9).

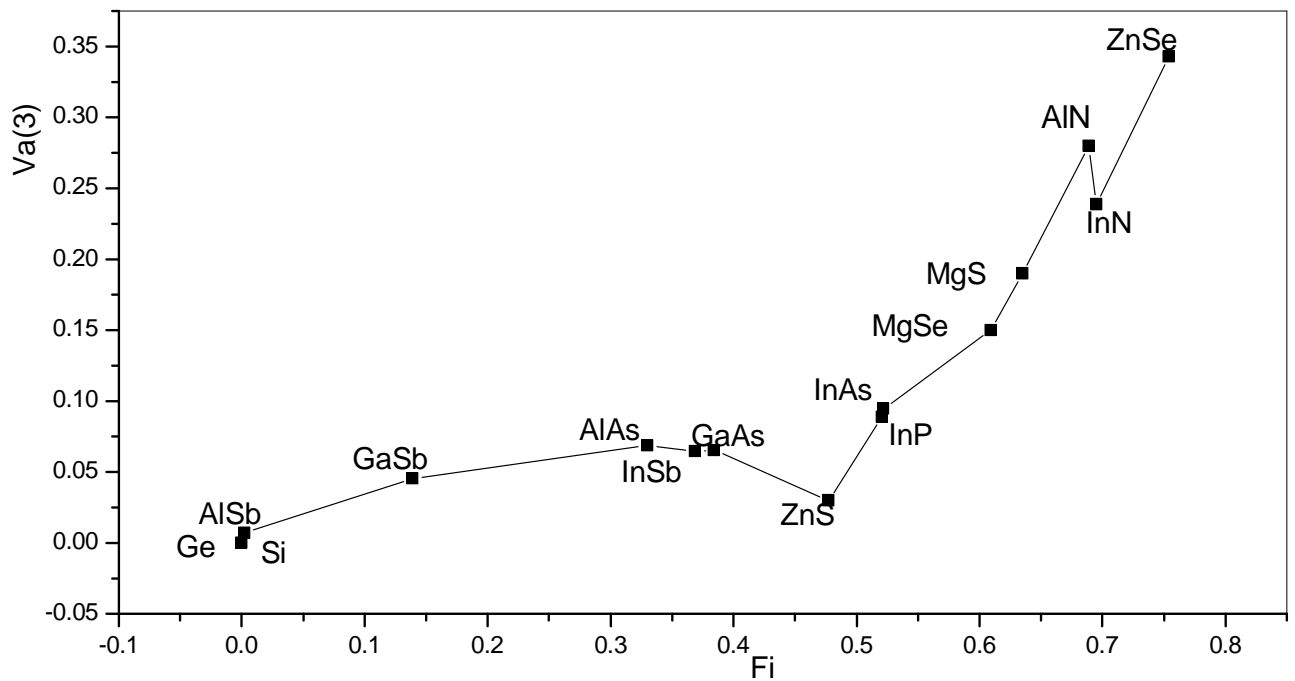


Figure III.7: La Variation du facteur de forme $Va(3)$ en fonction du facteur de l'ionicité

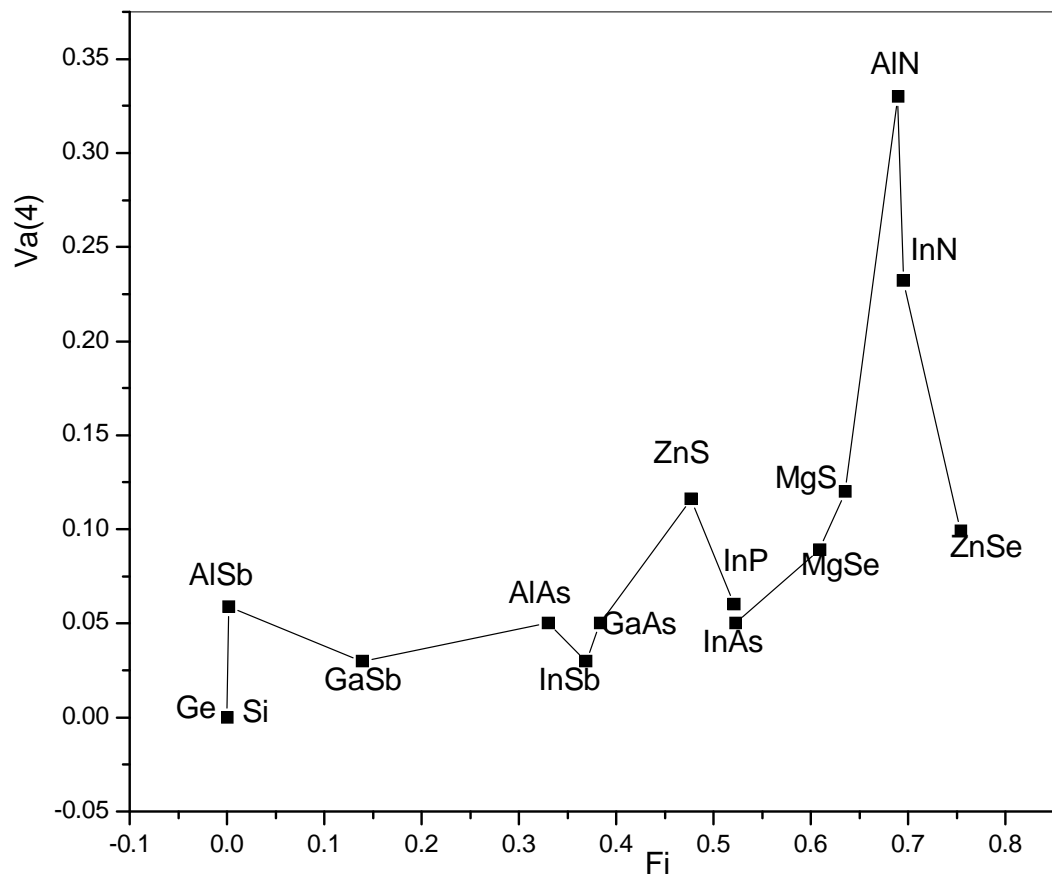


Figure III.8 : La variation du facteur de forme Va(4) en fonction du facteur de l ionicite

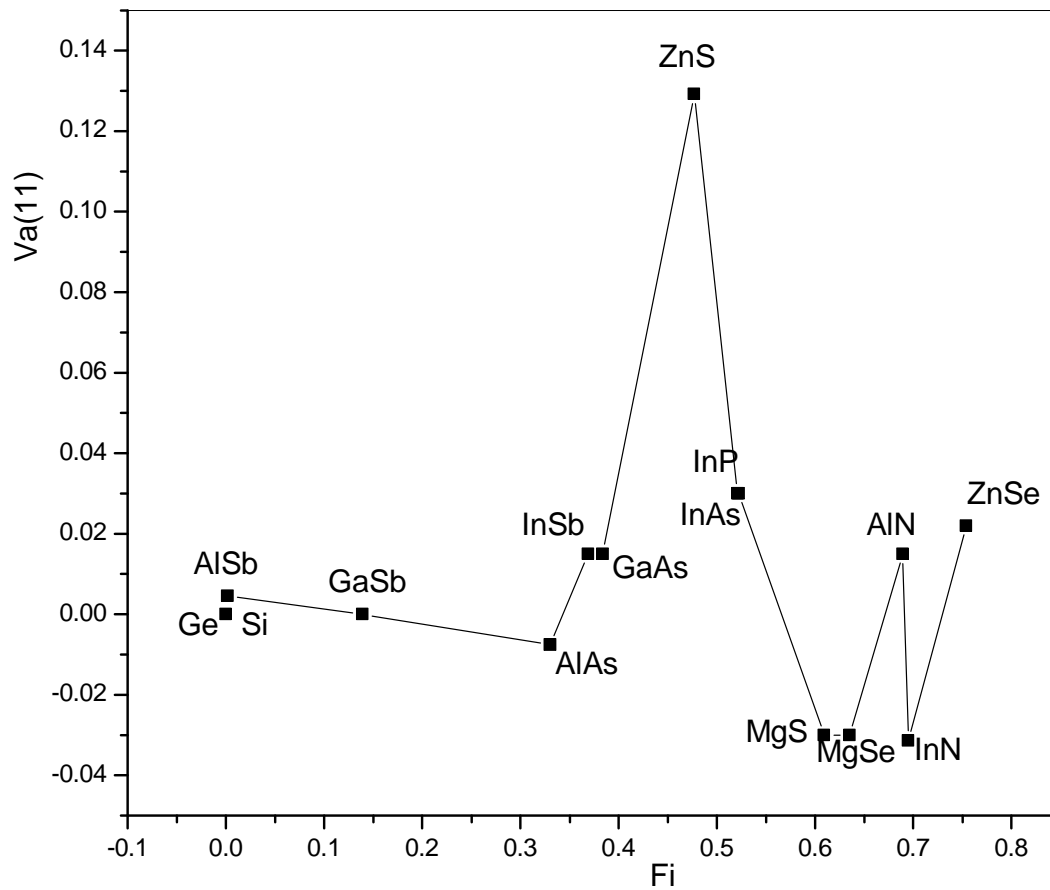


Figure III.9 :La variation du facteur de forme $Va(11)$ en fonction du facteur de l'ionicite

Les figures (III.10-15) représentent la variation des facteurs de forme symétriques $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$, et antisymétriques $V_a(3)$, $V_a(4)$, $V_a(11)$, en fonction de l'ionocité qui a été calculé en appliquant la formule (III-3) .

Les facteurs de forme symétriques $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$ varient d'une manière aléatoire avec l'augmentation de l'ionocité(fig.III.10-12).

Les figures (III.13,14) montrent que les facteurs de forme antisymétriques diminuent avec l'augmentation de l'ionocité pour les éléments III-V .
Mais la figure (III.15) montre que le facteur de forme $V_a(11)$ varie d'une manière aléatoire avec l'augmentation de l'ionocité.

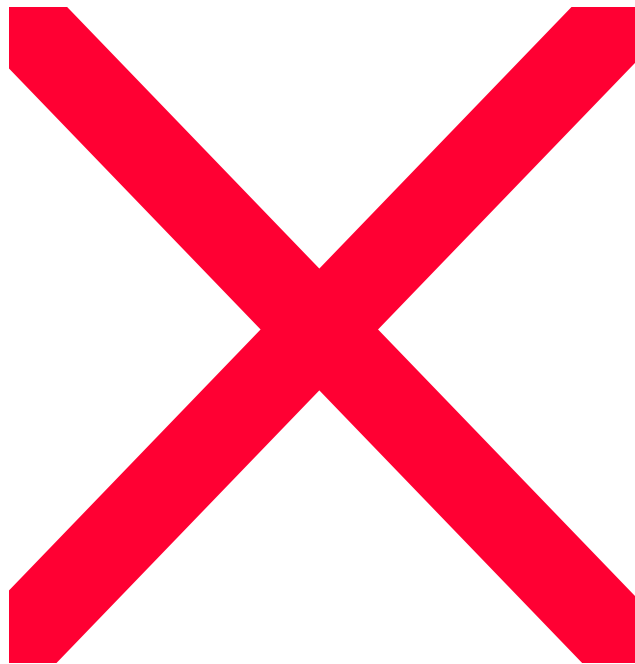


Figure III.10: La variation du facteur de forme $V_s(3)$ en fonction du facteur de l'ionicite

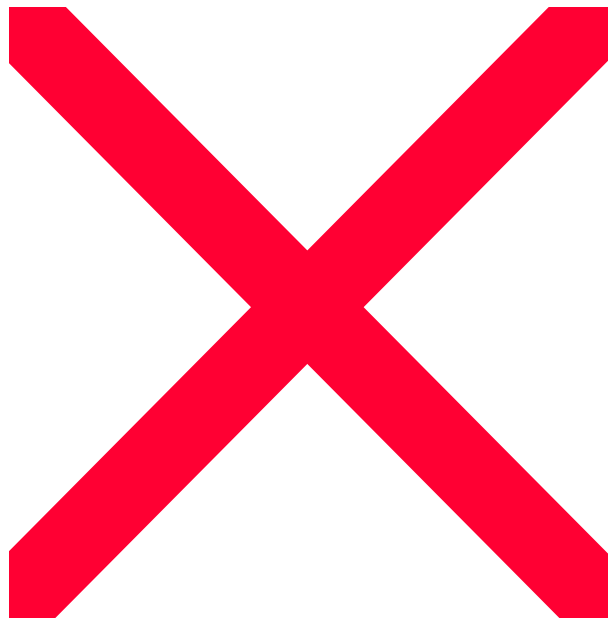


Figure III.11: La variation du facteur de forme $V_s(8)$ en fonction du facteur de l'ionicté

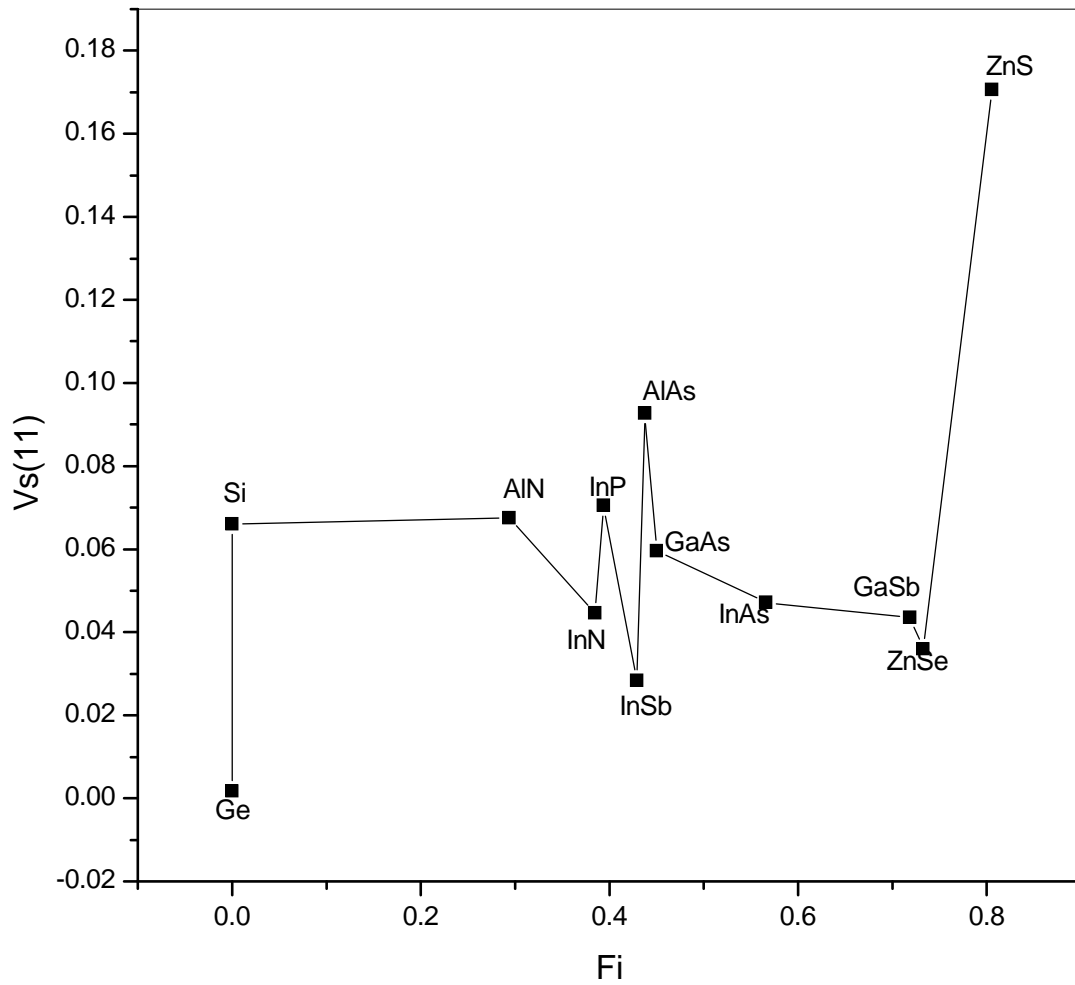


Figure III.12 : La variation du facteur de forme $V_s(11)$ en fonction du facteur de l'ionicté

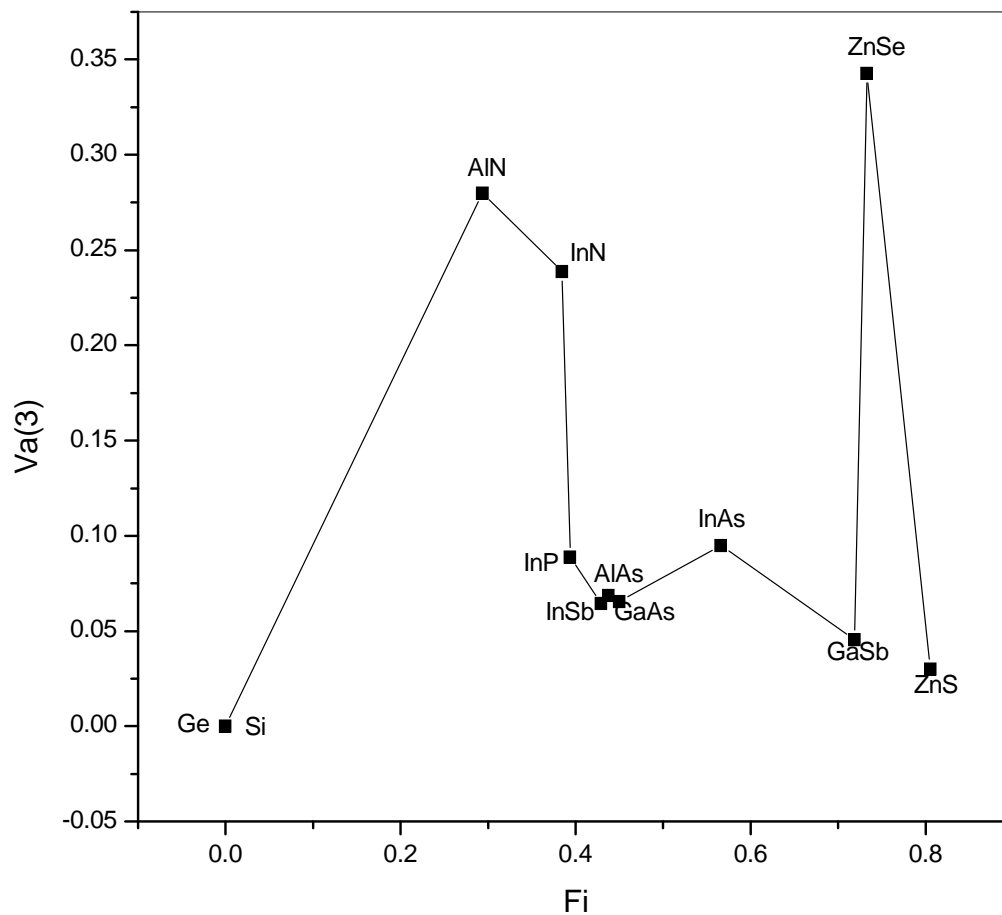


Figure III.13 : La variation du facteur de forme $V_a(3)$ en fonction du facteur de l'ionicté

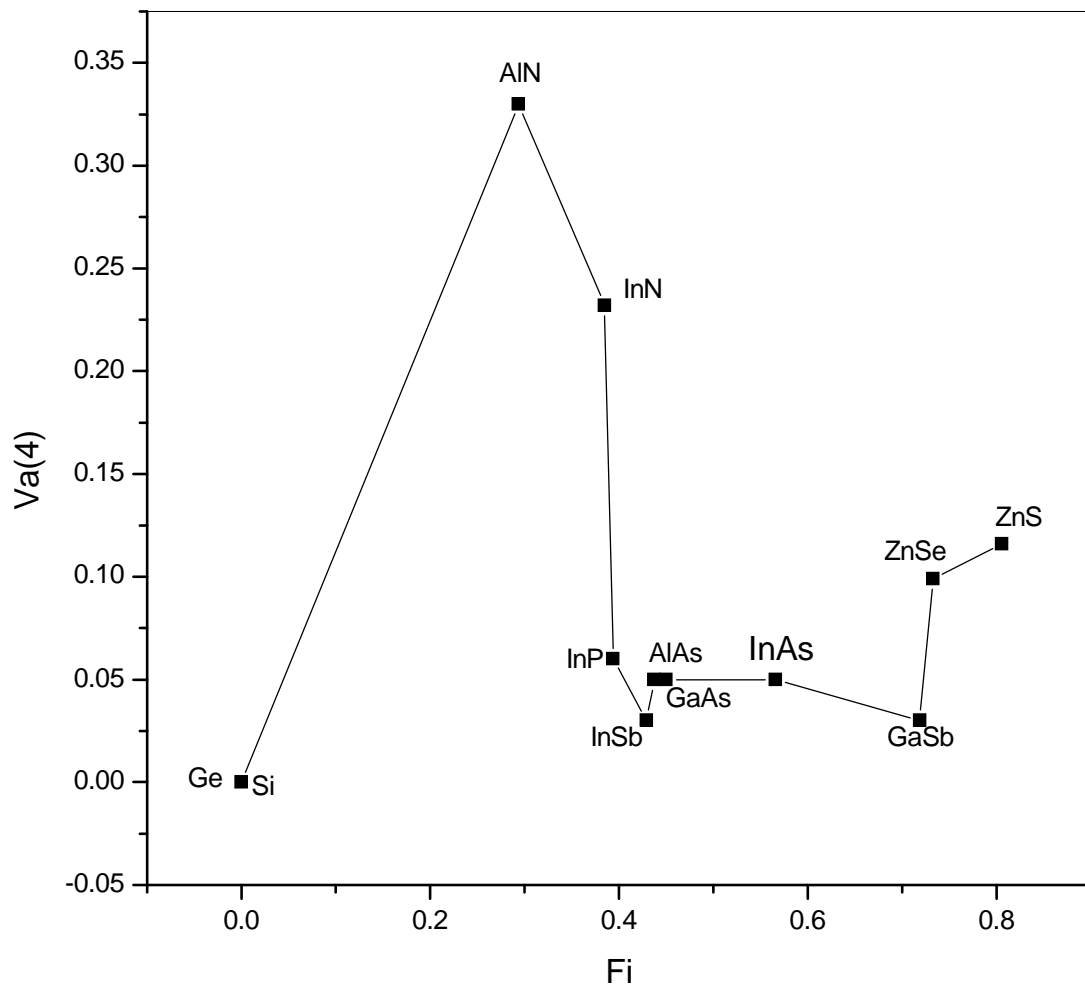


Figure III.14 : La variation du facteur de forme $Va(4)$ en fonction du facteur de l'ionicté

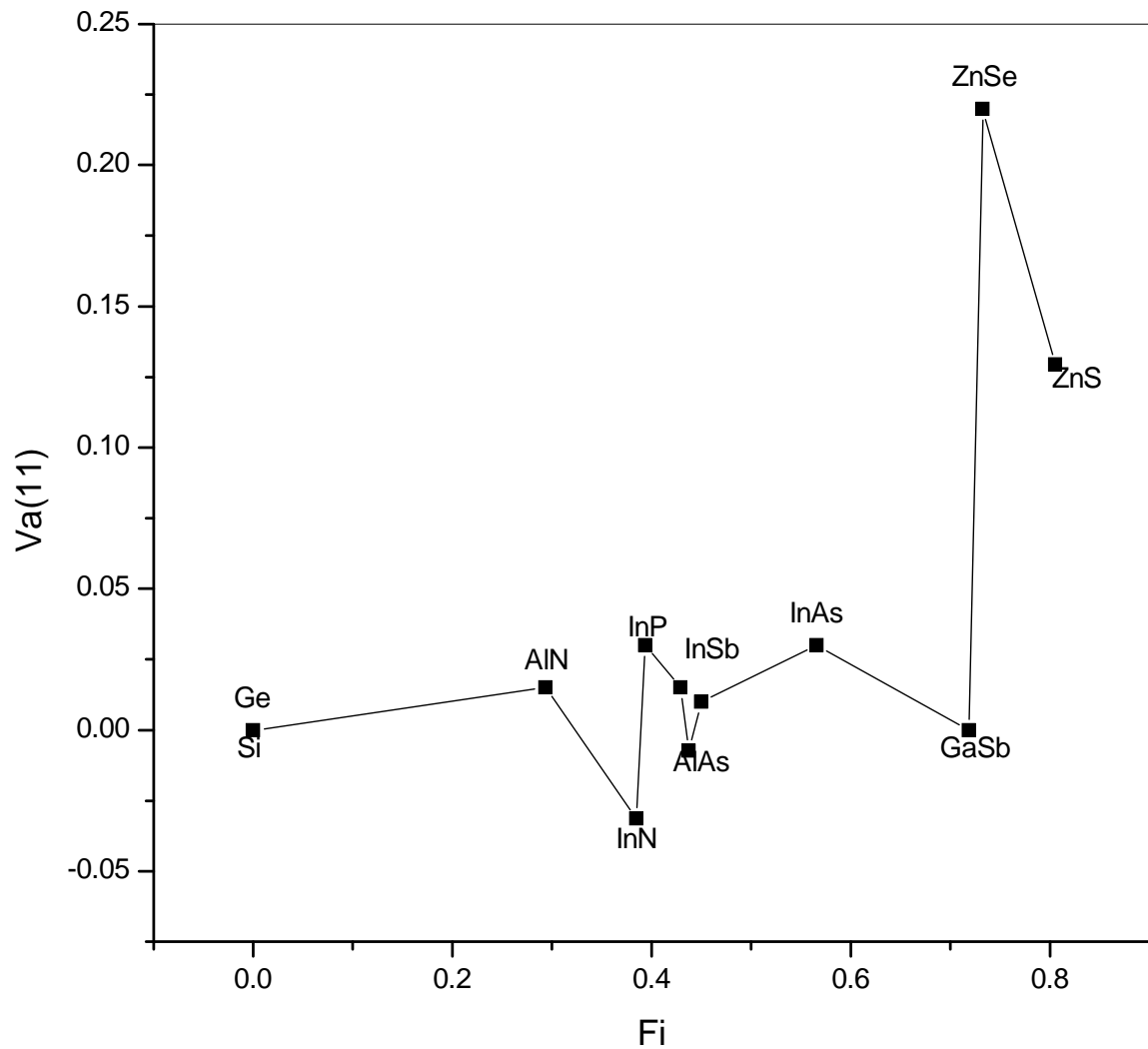


Figure III.15 : La variation du facteur de forme $Va(11)$ en fonction du facteur de l'ionocité

CONCLUSION GENERALE

Dans ce modeste travail, nous avons étudiés la variation des facteurs de forme symétriques et antisymétriques en fonction de l'ionicité

Nous avons utilisé la méthode des pseudopotentiels empiriques EPM afin de calculer la structure de bande électronique et par conséquent le facteur d'ionicité. Ce dernier a été calculé en appliquant deux méthodes :

La première méthode : on a utilisé le gap antisymétrique (le gap entre la première et la deuxième bande de valence au point X) des matériaux étudiés : Ge , Si (IV) qui se cristallisent dans la structure diamant et AlSb, GaSb , AlAs , GaAs , InSb , AlN , InN (III – V) ZnS , ZnSe, MgS , MgSe (II – VI) qui se cristallisent dans la structure Zinc – blend.

La deuxième méthode : on a utilisé l'énergie de cohésion.

Les facteurs de forme symétrique et antisymétriques sont les paramètres de la méthode de pseudopotentiels qui sont tirés à partir de la littérature et ajustés à l'aide de l'expérience.

Dans nos calculs, on a utilisé les facteurs de forme symétriques et antisymétriques afin de calculer les facteurs d'ionicité puis on a tracé la variation de ces facteurs en fonction de l'ionicité.

Les principaux résultats obtenus d'après cette étude sont :

La première méthode donne des résultats plus proches à la littérature que la deuxième méthode.

Les facteurs de forme symétrique $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$ varient d'une manière aléatoire avec l'augmentation de l'ionicté soit en appliquant la première ou bien la deuxième méthode .

Le facteur de forme antisymétrique $V_a(3)$ varie d'une manière uniforme avec l'augmentation de l'ionicté .

Donc on peut dire que le facteur de forme $V_a(3)$ nous donne une idée sur l'ionicté .

REFERENCES

- [1].I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, J.Appl.phys.89 (2001) 5815 and references cited therein.
- [2].B.Fraytage, P. Pavone and U.Rossler, Solid. Stat. Commun.94,103(1995).
- [3].H.Stanzel, T. Reisinger, K.Wolf, M.Kastner, B.Halnand, W.Gbhardt, Phys. Stat. Sol (b) 187, 303 (1995).
- [4].S.C Jain, M.Willander, J.Narayan and R.Van. Overstraeten, J.App. Phys, 87 (2000) 965 and références cited therein.
- [5].H.Mathieu, Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques, 4Ed , Masson , (1998).
- [6].L.Bouchlelg, Thèse de magister, Univ de Batna, Algeria , (2000).
- [7].H.Baaziz, Z. Charifi and N. Bouarissa, Matrial chemistry and physics 68 (2001) 197.
- [8].N. Bouarissa, infrared, Phys. Technol. 39 (1998) 265.
- [9].Z.Charifi and N.Bouarissa, Phys.lett.A234 (1997) 493.
- [10].K.Kassali and N.Bourrissa, Microelectronic.Eng.54 (2000) 277.
- [11].N.Bourrissa, Mater.Sci.Eng.B86 (2001) 53.
- [12].N.Bourrissa,Mater.Chem.phys.72 (2001) 387.
- [13].Y.F.Tray,S.S.Mitra and J.F.Vetelino,J.Phys.chem. Solids.vol 34 (1973).
- [14].B.Sapoval,C.Herman, Physique des Semiconducteurs, Ellipses , Paris, (1990).
- [15].A.N.Pikhtin, sov.phys.Semicon. 11(245), (1977)
- [16]. A.R.Goni , K.Strusser , K.Syasseem and M.Cardona, Phys.Rev. B36 (1987) 158.

- [17]. V.K.Bashenov , V.I .Soloshenkov and V.V.Tinofeenko , Phys. Status. Solid B70 (1975) K101 .
- [18]. A.Saidane , Physique des Semiconducteurs , tome 1, Office des publication universitaires, Ben-Aknoune, Algeria,(1992).
- [19]. C.Kitell , Physique de l'état solide , 5^{eme} édition , Masson , Paris , (1983).
- [20].E.Wigner and F.Seitz , Phys. Rev . 34 , 804 , (1983) .
- [21]. N.Bouarissa , chem . Phys. 65 (2000) 107 .
- [22] . W.A.Harrison , Electronic Structure and the Propriétés of Solids , général publishing company toronto, (1989).
- [23]. P.Kireev , La Physique des Semi-conducteurs, Edition Mir, Mosco, (1975).
- [24] .N.W. Aschroft and N.D.Mermin, Solid. Stat. Physic, Ed, Holt, Benchart and Winston philadelphia, (1976).
- [25].Z. Charifi, Thèse de magister, Unité de Setif, Algéria, (1997).
- [26].M.L.Cohen and J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Propriétés of Semiconductors, Berlin: Springer, (1988) .
- [27].S.Bounab, Thèse de magister, Univ de Constantine, (2002).
- [28].J.C.Philips and K.C.Pandy, Phys.Rev.lett 30 (1973) 787.
- [29].T.Sona, J. Phys.Solid. Stat.Phys.11 (1978) 2669.
- [30].C.S.Wang, B.M.Klein, Phys.Rev. B24 (1981) 3417.
- [31].J.R.CheliKowsky and M.L.Cohen, Phys.Rev.B14 (1976) 556.
- [32].H.Nara and T.Kobayasi, J.Phys.Soc.Japon, 14, 1429 (1976).
- [33].I.V.Abarencov and V.Heine, Phil Mg, 10, 529 (1965).
- [34].S.Laoui, Thèse de magister, Univ de Setif (1996).
- [35].David Singh and Y.P. Varshni, Solid. State. Communi.Vol 55, N° 6, (1985).
- [36].J.R.Chelikowsky, T.J.Wagner, A.Jin and J.H.Weaver Phys. Rev.B40 (1989) 9644.

-
- [37].A.Tonto, Thèse de magister, Univ de Setif, Algeria, (1996).
- [38].K.Kassali, Thèse de magister, Univ de Setif, Algeria, (1996).
- [39].Y-Al-Douri et al : *Physica B* 324 (2002) 173.
- [40].Y-Al-Douri et al, *Mat. Chem. Phys.*65 (2000) 117.
- [41].F.Benzid, A.Bhourri, H. Mejri, M.Said, N.Bouarissa,J-L. Lazzari, F.Arnand. d'avitaya, J. Derrien. *Physica B* 322 (2002) 225.
- [42].N. Bouarissa, R.Bachiri, *Physica B* 322 (2002) 193.
- [43].N. Bouarissa, *Phys. Stat. Sol (b)* 231 (2002) 391.
- [44]. N.Bouarissa, *Europ. Phys. J. B*32 (2003) 139.
- [45]. K.kassali, N.Bouarissa, *Solid.stat. Electronic.* 44(2000)501.
- [46]. N.Bouarissa, *Europ.Physis.J.B.*32 (2003) 421 .
- [47]. K.Kassali, N.Bouarissa, *Mater.Chem.Phys.* 76 (2002) 225 .
- [48]. Z.Charifi, H.Baaziz, *Mat.Chem.Phys.* 76 (2002)255.
- [49]. J.C.Phillips.*Band and Bands in Semiconductors*; Academic Press,New York (1973).
- [50]. N.E.Christensen,S.Satpathy,and Z.Pawlowska, *Phy.Rev.*B36,1032(1987).
- [51]. A. Garcia and M.L.Cohen, *Phys. Rev.*B47.4215 (1993).
- [52].T.kobayasi and H.Nara, *Bull.coll.Med.Sci.Tohoky. Univ.*2 (1999)7.
- [53].N.Bouarissa, T.kobayasi,and H.Nara , *Solid. State. Commun.* 96 (1995) 689.