

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° : Ph/APP/05/2022



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique Appliquée

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Ameer Rahmouni

Intitulé

**Etude des propriétés électroniques et élastiques
des alliages ternaires semiconducteurs**

Soutenu le / /2022 devant le jury composé de:

Bounab Sabrina	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Président
Mezrag Fadila	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Rapporteur
Ferahtia Samia	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Examineur

Année universitaire : 2021/2022

REMERCIEMENTS

Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

*J'adresse mes vifs remerciements à mon Encadreur Dr **Mezrag Fadila** pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet et pour les précieux conseils qu'elle m'a donné, et pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs.*

Je tiens à remercier, le président de jury, Dr Bounab Sabrina et l'examinatrice ,Dr Ferahtia Samia , pour l'honneur qu'elles m'ont fait en acceptant de juger ce travail.

Mes remerciements vont également à tous les enseignants du département de Physique.

Je ne pourrai jamais oublier le soutien moral, l'aide et les encouragements que ma famille et mes amis m'ont donnés

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à ma famille et mes amis

Dédicace

*Je dédie ce travail :
A mon père et A ma mère
A mon frères et A mes soeurs
A toute la famille rahmouni et
laamayed
A tous ceux que j'aime*

Rahmouni. Ameer

Tables des matières

Titre	Page
Remerciement	I
Dédicace	II
Tables des matières	III
Introduction générale	1
Références bibliographiques	3
Chapitre 1: Propriétés Fondamentales Des Semi-conducteurs III-V	
1.1 Introduction	4
1.2 Définition d'un semi-conducteur	4
1.3 Semi-conducteurs III-V	4
1.4 Les composés Semi-conducteurs II-VI	6
1.5 Différents types de semi-conducteurs:	6
1.5.1 Semi-conducteur intrinsèque:	6
1.5.2 Semiconducteur extrinsèque	7
1.5.2.1 Semi-conducteur extrinsèque de type N	7
1.5.2.2 Semiconducteur extrinsèque de type P	7
1.6 Bandes d'énergie	8

1.7 Gap énergétique	9
1.8 Les propriétés des semi-conducteurs III-V	10
1.8.1 Les propriétés électroniques	10
1.8.2 Propriétés élastiques	11
1.9 Applications technologiques d'un alliage semiconducteur ternaires	11
1.10 Conclusion	12
Références bibliographiques du chapitre 1	13
Chapitre 2: Propriétés physiques des alliages semi-conducteurs	
2.1 Introduction	15
2.2 Classification des alliages semi-conducteurs:	15
2.3 Les méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs	17
2.3.1 L'approximation du cristal virtuel (VCA) :	17
2.3.1.1 Cas d'un alliage ternaire	18
2.3.2 L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)	18
2.4 Les propriétés physiques des alliages ternaires	19
2.4.1 Propriétés électroniques	19
2.4.1.1 Bandes d'énergie	19
2.4.1.2 Structure de bandes électroniques	20

2.4.1.3 Gap énergétique de l'alliage ternaire:	20
2.4.2 Les Propriétés structurales	21
2.4.2.1 la maille cristalline	22
2.4.2.2 La constant de réseau	22
2.4.3 Les propriétés élastiques	23
2.4.3 .1 Les tenseurs des contraintes	24
2.4.3.2 Les tenseurs de déformation	24
2.4.3.3 Les Constantes élastiques	27
2.5 Les paramètres mécaniques	28
2.5.1 Le module d'Young	28
2.5.2 Coefficient de Poisson	28
2.5.3 Modules de compression et de compressibilité	29
2.5.4 Module de cisaillement	30
2.5.5 Facteur d'anisotropie	30
2.6 Les applications des matériaux semi-conducteurs II-VI	30
2.7 Conclusion	31
Références bibliographiques du chapitre 2	32

Chapitre 3 : Résultats et discussions	
3.1 Introduction	35
3.1. Etude des propriétés électroniques :	35
3.2.1 Structure de bandes des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}	35
3.3 Structure de bandes de CdS et de CdTe	37
3.3.1 Le composé CdS	37
3.3.2 Le composé CdTe	37
3.4 Gap énergétique des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}	39
3.5 Les propriétés élastiques	44
3.5.1 Les Constants élastiques C11.C12.C44	44
3.5.2 Paramètres mécaniques	49
3.5.2.1 Module de compressibilité	49
3.5.2.2 Module de cisaillement.	50
3.5.2.3 Module de Young	52
3.5.2.4 rapport de Pugh	54

3.5.2.5 la pression de Cauchy	55
3.5.2.6 Coefficient de poisson	57
3.6 Conclusion	58
Références bibliographiques du chapitre 3	59
Conclusion générale	60
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Résumé	

Introduction générale

Introduction générale

La Physique des Matériaux a joué et continue à jouer un rôle fondamental dans le développement de notre société moderne en permettant l'avènement de nombreuses applications technologiques. L'électronique, le stockage de données, les communications, les capteurs et les transducteurs requièrent l'utilisation de matériaux aux propriétés spécifiques qui, à travers leur comportement particulier, vont pouvoir jouer un rôle actif au sein des dispositifs et y assurer une certaine fonction. L'existence même de nombreux dispositifs ainsi que l'évolution récurrente de leurs performances (rapidité, sensibilité, diminution de taille) reposent souvent de manière cruciale sur la découverte de nouveaux matériaux aux propriétés uniques ou exacerbées [1].

La technologie moderne et les développements technologiques dans beaucoup de domaines sont basés sur la science des matériaux.

Les semiconducteurs sont les plus étudiés grâce à leur importance dans notre société. Ils sont utilisés dans le domaine de l'électronique (diode, transistor...), de l'informatique, médecine, industrie, télécommunication, optoélectronique, les appareils électroménagers...etc

Les alliages ternaires des composés semi-conducteurs II-VI sont considérés comme une classe importante des matériaux grâce au réglage de leurs paramètres de réseau, de leurs écarts d'énergie, de leurs indices de réfraction, de leurs constantes élastiques et des paramètres mécaniques liés ainsi que d'autres paramètres physiques qui peuvent être réglés et contrôlés pour obtenir des composants optoélectroniques souhaités. [2]

Quoique plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel reste la méthode la plus simple et rapide, elle donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience, cependant l'approximation du cristal virtuel VCA est connue pour rendre les paramètres du bowing (courbure) du gap fondamental aussi faible que les résultats trouvés expérimentalement. [3]

L'investigation des propriétés électroniques, élastiques ainsi que les paramètres mécaniques des alliages ternaires $\text{CdS}_x\text{Te}_{x-1}$ seront présentés dans ce travail. Le plan de travail que nous présentons dans ce mémoire est organisé comme suit :

Après une introduction générale, le premier chapitre est consacré à l'étude des propriétés fondamentales des semiconducteurs.

Le deuxième chapitre va faire l'objet d'un rappel de la théorie des alliages, ainsi nous avons exposé l'approximation du cristal virtuel avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel comme potentiel effectif.

Le troisième chapitre est consacré aux résultats et discussions.

Enfin, le manuscrit se terminera avec une conclusion générale qui résume les principaux résultats obtenus dans le cadre de cette étude.

Références bibliographiques

[1] P. Arnaud, "chimie physique" édition Dunod, (2001).

[2] N.Bouarissa, R.Bachiri ,Phys B .322(2002)193

[3] Q.Tridoan, thèse de doctorat, Université de Reims, Champagne.Ardenne, (2011).

Chapitre 1: Propriétés Fondamentales des Semiconducteurs

Chapitre 1: Propriétés fondamentales des semiconducteurs

1.1 Introduction

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteur.[1]

Dans ce chapitre, nous allons rappeler quelques propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs.

1.2 Définition d'un semi-conducteur

Un semi-conducteur intermédiaire entre un métal et un isolant, à $T=0K$, il se comporte comme un isolant mais il conduit l'électricité dès que la température augmente, sa conductivité augmente avec la température contrairement aux métaux.

La structure de bande est analogue à celle des isolants avec une zone interdite séparant la bande de valence de celle de conduction, mais la largeur de celle-ci est plus faible. Elle est par exemple ; de 1.17eV pour le silicium et de 1.42eV pour le GaAs.

À $T=0K$, la bande permise est, occupée la plus haute est complètement remplie: c'est la bande de valence. La bande permise est vide la plus basse est la bande de conduction ; elle est vide à $T=0K$. Lorsque la température augmente, l'énergie d'agitation thermique excite un certain nombre d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction, comme celle-ci est partiellement remplie, il y a conduction si on applique une excitation électrique.

À cette conduction d'origine électronique, s'ajoute celle des trous qui sont les places vacantes laissées par les électrons dans la bande de valence, pour un semiconducteur, la conductivité est d'autant plus grande que le nombre d'électrons dans la bande de conduction est élevé, c'est-à-dire que la température est plus grande. [2]

1-3 Semi-conducteurs III-V

On distingue, de la classification périodique de Mendeleev de nombreux composés binaires, les semi-conducteurs III-V formés par la combinaison d'éléments du groupe III et du groupe V, qui peuvent être transformés en ternaire ou quaternaire, selon l'élément déjà formé.

Le tableau (1.1): contient des extraits de cette classification (les nombres en haut et en bas représentent respectivement le numéro atomique et la masse atomique. [3]

Tableau (1.1) Extrait de la classification périodique des éléments

III	IV	V
$10.81^{5}B$	$12.01^{6}C$	$14.01^{7}N$
$26.98^{13}Al$	$28.09^{14}Si$	$30.97^{15}P$
$69.74^{31}Ga$	$72.59^{32}Ge$	$74.92^{33}As$
$114.82^{49}In$	$118.69^{50}Sn$	$121.75^{51}Sb$

Dans les semi-conducteurs III-V, les électrons ns^3 des dernières orbitales des atomes de groupe III et les électrons ns^3p^3 des atomes du groupe V, se réarrangent pour former, eux aussi les orbitales hybridées $(2x)sp^3$. [4]

Tableau (1.2) : propriétés des principaux composés de semi-conducteurs III-V à 300 K.

Composé III-V	E_g (eV)	m^*/m_0	μ (cm ² /V.s)	a (Å)	$\alpha(\Gamma)$ (mev/k)
BN	7,5			3,6150	0.593
AlP	2,45			5,4510	0.5771
AlAs	2,16			5,6605	0.885
AlSb	1,58	0,12	200	6,1355	0.420
B P	2,0			4,5380	
GaN	3,36	0,19	380	4.50	0.593
GaP	2,26	0,82	110	5,4512	0.5771
GaAs	1,42	0,067	8500	5,6533	0.5405
GaSb	0,72	0,042	5000	6,0959	0.417
InP	1,35	0,077	4600	5,8686	0.363
In As	0,36	0,023	33000	6,0584	0.276
InSb	0,17	0,0145	80000	6,4794	0.320

Tableau(1.3) : Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-VI [5].

Matériau	a (Å)	Structure
ZnSe	5,6692	Zb
ZnTe	6,1037	Zb
CdS	4,1367	Zb
CdSe	4,2999	W
CdTe	6,481	Zb
HgS	5,852	Zb
HgSe	6,084	Zb

1.4 Les composés Semi-conducteurs II-VI

Le symbole II signifie la seconde colonne, qui représente les éléments suivants : Zinc (Zn), Cadmium (Cd), Mercure (Hg), Copernicium (Cn), dans le tableau périodique des éléments. Le symbole VI signifie la Sixième colonne, qui représente les éléments suivants : Oxygène (O), Soufre(S), sélénium (Se), Tellure (Te), Polonium (Po), Livermorium (Lv), la famille des semi-conducteursII-VI est CdS, CdSe, CdTe, HgS, HgTe, ZnO, ZnS, ZnSe et ZnTe.

1.5 Différents types de semi-conducteurs:

Un semi-conducteur est un matériau situé entre un conducteur et un isolant en raison de sa capacité à conduire le courant électrique. Les semi-conducteurs purs (intrinsèques) ne sont pas de bons conducteurs ou isolants. Les éléments semi-conducteurs les plus couramment utilisés sont le silicium, le germanium et le carbone [6]

Ils existent deux types de semi-conducteurs, l'un est pur dit intrinsèque et l'autre dopé dit extrinsèque.

1.5.1 Semi-conducteur intrinsèque

Si le cristal est si pur que les impuretés, sa contribution à la densité de porteurs de charge est négligeable, on parle alors de semi-conducteur intrinsèque. Dans ce cas, les électrons de la bande de conduction ne peuvent provenir que des niveaux d'énergie de la bande de valence qu'ils occupaient autrefois, laissant des trous. Par conséquent, le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre de trous dans la bande de valence. [7]

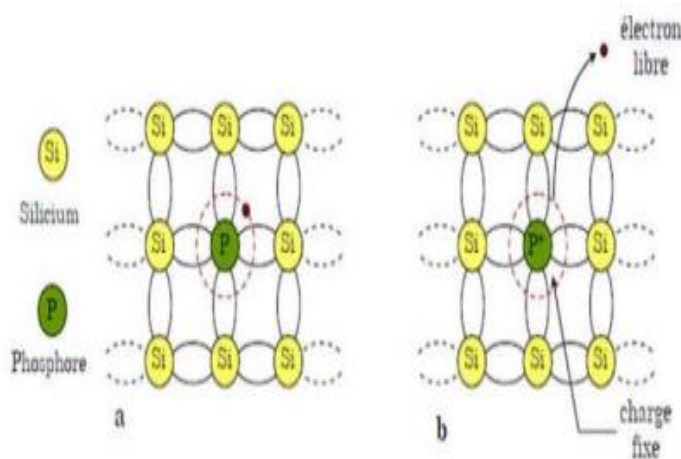
$$n(T) = ni(T) = pv(T) \quad (1-1)$$

1.5.2 Semi-conducteur extrinsèque

Les semi-conducteurs extrinsèques sont des semiconducteurs intrinsèques dopés avec des impuretés spécifiques qui leur confèrent des propriétés électriques adaptées au domaine d'utilisation du matériau. L'introduction de ces dopants perturbe la bande interdite, créant des états accessibles au sein de ces bandes et rendant la bande interdite plus perméable. Selon le type de dopage, on distingue deux types de semiconducteurs. [8]

1.5.2.1 Semi-conducteur extrinsèque de type N

L'insertion d'atomes pentavalents dans la structure cristalline des semiconducteurs permet d'introduire artificiellement des électrons libres. En fait, l'un des cinq électrons de l'enveloppe externe d'un atome pentavalent ne participe pas à une liaison de valence. Ainsi, dans un semi-conducteur de type N, les électrons libres sont majoritaires et les trous sont minoritaires. Les atomes donneurs sont des atomes pentavalents qui sont introduits dans le semiconducteur pour le rendre de type N extrinsèque, ces atomes sont susceptibles de générer des électrons libres. On parle de dopage de type N (Figure 1.1)



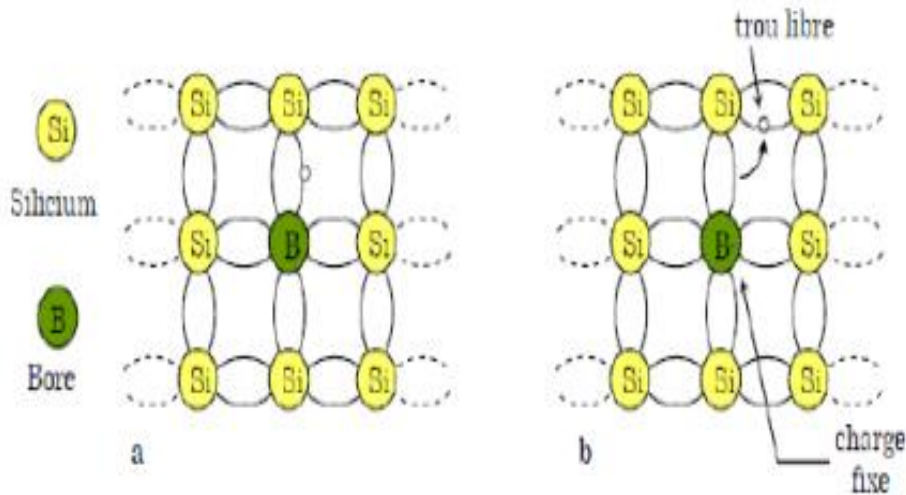
Figure(1.1): Silicium dopé au Phosphore. a) $k=0$ et b) $k \neq 0$. [3]

1.5.2.2 Semi-conducteur extrinsèque de type P

Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore aluminium ou galium). Celui-ci ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par

atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semiconducteur est dit de type p [9].

(Figure.1.2).



Figure(1.2): Silicium dopé au Bore. a) $k = 0k$ et b) $k \neq 0k$

1.6 Bandes d'énergie

Les électrons d'un atome isolé ont des niveaux d'énergie permis bien définis, mais leur comportement dans un réseau cristallin périodique est totalement différent.

Si la distance entre les atomes voisins génère une sorte d'interférence entre les niveaux, les atomes admissibles, qui nécessitent des états multiples quasi continus autour de chaque niveau admissible d'un seul atome, un ensemble d'états très proches les uns des autres, plutôt que d'être traités comme des bandes d'énergie admissibles, avec une densité d'états associée.

Le niveau d'énergie et le niveau d'énergie d'ionisation des électrons de valence donnent donc deux bandes d'énergie autorisées particulièrement intéressantes. Les bandes de valence et de conduction sont séparées par une bande sans niveau d'énergie admissible, appelée bande interdite (Figure 1.3). Les particularités de ces bandes de conduction admissibles sont dues au fait que les électrons peuvent circuler librement à travers le réseau et ainsi générer des courants de conduction. [10]

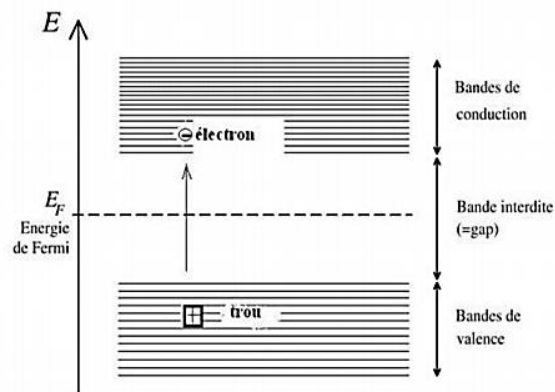


Figure (1.3) Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs

1.7 Gap énergétique

Les courbes $E_{cv}(k)$ représentent également la relation de dispersion, où E_c est le minimum dans la bande de conduction, E_v est le maximum dans la bande de valence, et \vec{K} est le vecteur d'onde associé à l'électron, ces courbes montrent les deux types de semi-conducteurs. Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur \vec{K} , on dit que le semi-conducteur est directement gappé. A l'inverse, un semi-conducteur est dit à gap indirect si ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs différentes de \vec{K} . (Fig.1.4)

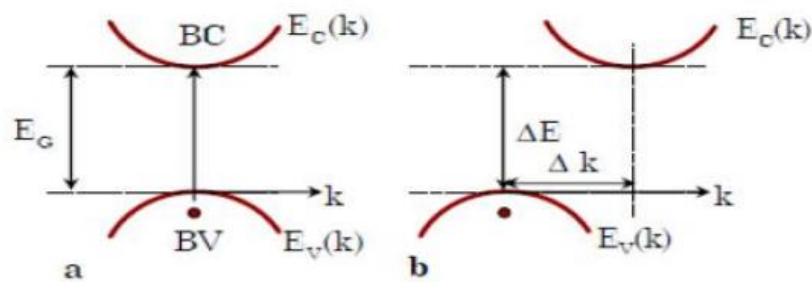


Figure (1.4): Semi-conducteur a gap direct et indirect

a) Semi-conducteur à gap direct. b) Semi-conducteur à gap indirect

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction d'un semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique [11].

1.8 Les propriétés des semi-conducteurs

1.8.1 Les propriétés électroniques

Dans un semi-conducteur il a deux bandes permises, la bande de valence qui contient les électrons et la bande de conduction qui est remplie par les électrons de la bande de valence, ces bandes séparées par un gap appelé aussi bande interdite, sa largeur est plus petite que dans un isolant, par exemple dans le silicium cette bande est égale 1,12 eV. Par chauffage ou autre facteur les électrons de bande de valence passent vers la bande de conduction. La plupart des semi-conducteurs III-V sont au gap direct.

Les matériaux semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétérostructures. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome (comme exemple le gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As), et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type sp^3 : 4 orbitales liantes et 4 orbitales anti liantes [11].

Les semi-conducteurs II-VI sont caractérisés par une grande largeur de bande interdite, correspond à des longueurs d'onde situées dans le domaine du visible jusqu'à l'ultraviolet. Ces matériaux semi-conducteurs possèdent un gap direct varie de 3.741 eV (ZnS) [12] à (CdTe) [13]. Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouve au centre de la zone de Brillouin voir la figure 1.5. La bande de valence à $\vec{k} = \vec{0}$ se compose de trois courbures différentes:

- Bande de trous lourds (hh pour heavy hole) ;
- Bande de trous légers (lh pour light hole) ;
- Bande spin-orbite Δ_{so} .

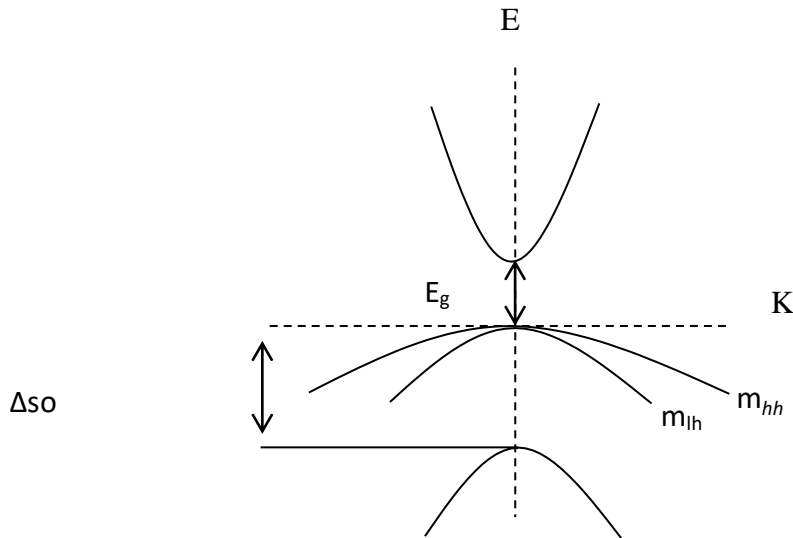


Figure (1.5) Structure de Bande d'un semi-conducteur à gap direct

1.8.2 Propriétés élastiques

La méthode contrainte-déformation a été utilisée pour déterminer les constantes élastiques du composé étudié afin de confirmer sa stabilité. Nous avons remarqué qu'il n'y a que trois constantes élastiques indépendantes C_{ij} , à savoir C_{11} , C_{12} et C_{44} pour un système cubique.

De plus, d'autres paramètres macroscopiques tels que le module de cisaillement C' , le coefficient de Poisson σ_0 et le module de Young Y_0 ont également été étudiés dans ce travail. Ces paramètres ont été calculés en utilisant les approximations de Voigt Reuss-Hill pour les structures cubiques. [14-16]

1.9 Applications technologiques d'un alliage semi-conducteur ternaires

L'alliage ternaire CdSTe a connu un intérêt croissant dans ces dernières années vu que son gap et son paramètre cristallin peuvent être variés systématiquement par le choix de composition de l'alliage, il présente des multiples applications, par exemple l'alliage ternaire préparé par épitaxie, a été employé comme couche active dans les lasers et des détecteurs photoélectriques, ainsi il est utilisé comme détecteur de rayonnement dans les systèmes de télécommunication optique. En outre, c'est un très bon candidat pour les transistors à grand vitesse [17].

Il est couramment préparé sur des substrats d'InP (phosphore d'indium).

Pour les cellules solaires à triple jonction, le CdSTe est implanté comme sous cellule du milieu pour couvrir la partie du spectre.

Dans Étude des propriétés électriques de films CdSe préparés par technique d'évaporation thermique sous vide et dans la préparation d'un capteur de gaz à partir d'un film de séléniure de cadmium pur parsemé d'aluminium.

Technologie d'évaporation sous vide

1.10 Conclusion

Dans ce premier chapitre nous avons donné des notions fondamentales sur matériaux semiconducteurs que nous allons étudier, en insistant sur les semiconducteurs II-VI des alliages ternaires. Chaque matériau possède ses propres propriétés permettant de le caractériser. La connaissance des propriétés physiques et du comportement de ces matériaux est évidemment essentielle pour l'évaluation de leur domaine d'application.

Références bibliographiques du chapitre 1

- [1] I.Hernández.Calderon," Opitcal properties and electronic of wide band gap II-VI Semi-conductors ",In II-VI semi-conductor Materials and their Applications Taylor and Francis New York ,113-170 (2002).
- [2] J. Chelikowsky and M. L Cohen Phys. Rev B14, 552 (1976).
- [3] M. Gell and al. Phys. Rev. B35, 1196 (1987).
- [4] S. Laval .Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique(2002).
- [5] S.Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur », Wiley, Chichester, (2009).
- [6] T.L. Floyd « Electronique : Composants et systèmes d'application », Ed Reynald Gouletinc , (2004).
- [7] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, « Physique des solides », Ed EDP Science, France, (2002).
- [8] R. Omnès, « Comprendre la mécanique quantique », Ed EDP sciences, France (1999).
- [9] B.N. Brahmi, Thèse Doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013)
- [10] A.BECHRI, « effets de désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V », Thèse de Doctorat, Université de Constantine, 2006.
- [11] MEZRAG, F. (2012). Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider-Biskra).
- [11] N. Baghdadli, Thèse de Doctorat en physique, Université Tlemcen (2013)
- [12] P.Baranski, V.Klotehkov,I.Potykeritch,« électronique des semi-conducteurs», Ed.MirMoscow ,(1978).
- [13] I. Hernández.Calderón, "Optical properties and electronic structure of wide band gapII-VI semiconductors", in II-VI Semiconductor Materials and their Applications, TaylorandFrancisNew York, 113–170(2002).
- [14] W. Voigt, Lehrburch der Kristallphysik, Teubner, Leipzig (1928).
- [15] A. Reuss and Z. Angew, Math. Mech. **9**, 49 (1929).
- [16] D.C. Wallace , Thermodynamics of Crystals, Courier Corporation, New York, (1972).

[17] S. Bacha, A. Bechiri, F. Benmakhlouf, N. Bouarissa, “Effects of substrate and compositional disorder upon optical and lattice vibration properties of quaternary semiconductor ”, Infrared physics & technology, Vol 63, 2014, P.22

Chapitre 2: Propriétés physiques des alliages semiconducteurs

Chapitre 2: Propriétés physiques des alliages semi-conducteurs

2.1 Introduction

L'alliage fait référence à un mélange homogène de deux matériaux ou plus. Il fut un temps où le terme alliage n'était utilisé que pour les métaux, mais cette définition a rapidement été associée à d'autres matériaux, notamment les céramiques et les polymères. Une variété de composants binaires, ternaires et quaternaires ont été introduits peu de temps après le développement de la technologie moderne des semi-conducteurs de croissance et de purification des cristaux. Ces applications en microélectronique et optoélectronique incitent les chercheurs à se développer théoriquement et expérimentalement

En fait, les progrès réalisés par les chimistes, les physiciens des matériaux et les technologues ont effectivement fait progresser la recherche et la fabrication de nouveaux matériaux, notamment les alliages semi-conducteurs III-V et II-VI. [1]

2.2 Classification des alliages semi-conducteurs

Les alliages semi-conducteurs peuvent être divisés en plusieurs catégories par quantité. [2]

Alliage binaire de la forme $A^N B^{8-N}$:

$A^I B^{VII}$: *AgCl, CuBr, KBr, LiF*,

$A^{II} B^{VI}$: *CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnO, ZnSe, HgTe, HgSe, ..*

$A^{III} B^V$: Les antimoniures, les arséniures, les phosphures, et les nitrides des éléments : Aluminium, Gallium, Indium et Bore (*GaAs, InSb, BN, AlAs, InP,*).

$A^{IV} B^{IV}$: *SiC, SiGe,*

- Alliage binaire de la forme $A^N B^{10-N}$:

$A^{IV} B^{IV}$: *PbS, PbSe, PbTe,*

- Alliage binaire de la forme $A^N B^{7-N}$:

$A^I B^{VI}$: CuS, CuO, Cu₂O,

Lorsque les éléments binaires $A^N B^{8-N}$ et $A^N C^{8-N}$ sont associés, l'alliage formé peut être soit :

- Alliage ternaire anionique : $A^N B_x^{8-N} C_{1-x}^{8-N}$
- Alliage ternaire cationique: $A_x^N B_{1-x}^N C^{8-N}$

Ces alliages sont caractérisés par la présence du coefficient stœchiométrique x

Cependant, il existe un autre type d'alliages semi-conducteurs : ce sont les matériaux "Quad". Ce type d'alliage semi-conducteur implique quatre composés binaire, caractérisé par la présence de deux coefficients stœchiométriques x et y.

Un intérêt particulier a été porté récemment aux alliages quaternaires principalement à cause de l'avantage qu'ils offrent de concevoir des dispositifs avec les propriétés physiques souhaitées.

Ces alliages peuvent être divisés en deux classes [3, 4]

- Les solutions quadratiques : ces alliages ont la forme $A_{1-x}^N B_x^N C_y^{8-N} D_{1-y}^{8-N}$.
- Les solutions triangulaires dans cette classe, deux cas se présentent, les solutions purement anioniques. $A^N B_x^{8-N} C_y^{8-N} D_{1-x-y}^{8-N}$ et les solutions purement cationiques $A_x^N B_y^N C_{1-x-y}^{8-N} D^{8-N}$.

Les alliages quaternaires quadratiques ont été les premiers et les plus recherchés et étudiés, particulièrement $Ga_x In_{1-x} As_y P_{1-y}$, Néanmoins, les alliages triangulaires semblent devenir tous aussi importants.

Les critères concernant l'accord des paramètres de maille ainsi que l'identité des structures cristallines des éléments binaires parents restent toujours valables dans le cas des alliages quaternaires.

Les alliages semi-conducteurs penternaires ont la forme $A_x B_{1-x} C_y D_z E_{1-y-z}$, ils sont formés de six composés binaires AC, AD, AE, BC, BD et BE, la recherche de la propriété physique d'un alliage penternaire revient à utiliser une interpolation des propriétés physiques de ses binaires, en utilisant trois concentrations molaires x, y et z, tout en se basant sur la théorie développée pour les alliages quaternaires.

La constante du réseau pour l'alliage penternaire est donnée par la loi de Vegard [5]:

$$a^{\text{alliage}}(x, y, z) = xy a_{AC} + xz a_{AD} + x(1-y-z) a_{AE} + (1-x)y a_{BC} + (1-x)z a_{BD} + (1-x)(1-y-z) a_{BE} \quad (2-1)$$

Ou

a_{AC} , a_{AD} , a_{AE} , a_{BC} , a_{BD} et a_{BE} sont les constantes du réseau des composés AC, BC, AD, AE, BE et BD respectivement. Dans le même formalisme, les facteurs de forme symétriques et antisymétriques de l'alliage penternaire sont calculés comme suit :

$$V^{S,A}VCA^{(G)} = xyV^{S,A}AC^{(G)} + xzV^{S,A}AD^{(G)} + x(1-y-z) \quad (2-2)$$

$$y(1-x)V^{S,A}BC^{(G)} + z(1-x)V^{S,A}BD^{(G)} + (1-x)(1-y-z)V^{S,A}BE^{(G)} \quad (2-3)$$

Avec

$V^{S,A}AC^{(G)}$, $V^{S,A}AD^{(G)}$, $V^{S,A}AE^{(G)}$, $V^{S,A}BC^{(G)}$, $V^{S,A}BD^{(G)}$ et $V^{S,A}BE^{(G)}$ sont les facteurs de formes symétriques et antisymétriques des composés binaires de l'alliage penternaire. Les critères concernant l'accord des paramètres de maille entre l'alliage et le substrat restent toujours valables dans le cas des alliages penternaires, permettant ainsi de trouver une relation entre les différentes fractions molaires x , y et z .

2.3 Les méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs

2.3.1 L'approximation du cristal virtuel (VCA)

L'Hamiltonien H considéré pour la VCA est donné par :

$$H = -\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{AC}(r)\right] + x[V_{AB}(r) - V_{AC}(r)] \quad (2-4)$$

L'approximation du cristal virtuel VCA est l'approche la plus préférée grâce à sa simplicité, elle postule que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + [xV_{AB}(r) + (1-x)V_{AC}(r)] \quad (2-5)$$

Où : V_{AB} et V_{AC} sont respectivement les potentiels périodiques des éléments AB et AC. [6]

La méthode de pseudo potentiel empirique (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA) reste la plus simple et offre des résultats compatibles et raisonnables pour la structure de bande. [7]

Le gap énergétique pour la plupart des alliages ternaires est approximativement donné sous la forme d'une fonction quadratique [8]

$$T_{ABC}(x) = xT_{AB} + (1-x)T_{AC} + Cx(1-x) \quad (2-6)$$

avec T_{AB} est le gap énergétique du composé AB

avec T_{AC} est le gap énergétique du composé AC.

C est souvent nommé « paramètre de courbure » ou « Bowing » ou « paramètre non linéaire » et prouvé par l'expérience. Cependant la VCA donne des paramètres de courbure (Bowing) du gap énergétique déviant d'une valeur importante de celle fournie par l'expérience, pour remédier à cela, il est nécessaire d'introduire l'effet du désordre compositionnel dans le formalisme de la VCA, on ajoutant un terme correctif à l'Hamiltonien appelé potentiel du désordre. [7]

2.3.1.1 Cas d'un alliage ternaire

Un semi-conducteur ternaire $A_x^v B_{1-x}^v C^{\text{III}}$ est supposé uniforme, cependant, l'effet des fluctuations de la composition x est inévitable. Le désordre peut être dû à la différence des potentiels intrinsèques des atomes A et B qui se substituent mutuellement sur les sites correspondant aux atomes du groupe V dans la blende. La différence entre les potentiels intrinsèques des substituants (A et B) se traduit par des distorsions locales et les paramètres du nouveau matériau ainsi obtenu dépendront de l'amplitude de ces distorsions.

Dans l'approximation du cristal virtuel (VCA) [9,10], Nous considérons que ces distorsions sont suffisamment faibles. Pour préserver la structure de bande du cristal parfait, ce qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Ce modèle prévoit une variation linéaire des principaux paramètres dans l'alliage [11].

$$V(x) = xV_{AC} + (1-x)V_{BC} \quad (2-7)$$

2.3.2 L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)

Dans les années soixante-dix, Baldereschi et Maschke ont traité l'effet du désordre compositionnel comme une perturbation mais restant toujours incapable d'expliquer le paramètre de courbure. Les efforts requis pour cette méthode sont importants rendant son application assez difficile. Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel dû au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système devient :

$$V(r) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (2-8)$$

$$V(r) = V_{VCA} - p(x(1-x))^{1/2} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (2-9)$$

Avec

V_{VCA} Le potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}$ Le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel.

2.4 Les propriétés physiques des alliages ternaires

Les propriétés des matériaux sont souvent les limites de performances des systèmes conçus. La conscience de ces propriétés s'avère capitale mais il faut nécessairement savoir que ces propriétés macroscopiques sont très liées aux structures élémentaires de ces matériaux, c.à.d. descendre jusqu'à l'échelle atomique. [12]

Les physiciens ont été, depuis des siècles, tentés de mettre en équations, le comportement élastique de la matière. Plus ou moins générales, précises ou robustes, ces modélisations s'appuient sur la représentation du phénomène à l'aide de champs vectoriels et de tenseurs. Ceux-ci décrivent, en particulier, la déformation de l'objet ainsi que les contraintes internes qu'ils subissent.

De plus on constate que la quantité de déformation est proportionnelle aux contraintes appliquées. Au niveau microscopique cela implique que le tenseur des déformations d'un cristal peut être relié aux tenseurs des contraintes par une loi linéaire (loi de Hooke). [13]

Dans ce chapitre, nous donnons les définitions de quelques propriétés physiques (électroniques, structurales et élastiques : déformation, contrainte et constantes élastiques, loi de Hooke avec les paramètres élastiques (module de compressibilité, module de cisaillement, module d'Young, coefficient de poisson, facteur d'anisotropie).

2.4.1 Propriétés électroniques

2.4.1.1 Bandes d'énergie

Les électrons dans les atomes isolés ont des niveaux d'énergie bien définis. Cette interaction productrice d'électrons dans les matériaux à réseau périodique se traduit par un état quasi-continu très proche, appelé bande. Les électrons dans les matériaux sont confinés aux bandes d'énergies séparées par des domaines énergétiques qui ne contiennent plus d'orbitales.

Une bande d'énergie appelée bande interdite ou trou d'énergie. La bande admissible pour l'occupation et le remplissage est la bande de valence, la bande admissible la plus basse et vide est la bande de conduction. [14]

Les semi-conducteurs II-VI ont longtemps été le prototype des matériaux rayonnement, ce qui les rend très efficaces en raison de leur bande interdite directe rayonnement et leurs énergies interstitielles élevées, entraînant une émission de photons dans le spectre visible. [15]

Les propriétés électroniques des semi-conducteurs sont affectées par les électrons soumis à des potentiels périodiques générés par des ions situés aux nœuds treillis. Dans les cristaux infinis, les porteurs de charge sont libres.

Se déplaçant dans trois directions de l'espace, le vecteur d'onde de l'électron \vec{K} peut prendre toutes les valeurs possibles de la première zone de Brillouin. [16]

2.4.1.2 Structure de bandes électroniques

La structure de bande des semi-conducteurs peut déterminer la nature de l'écart et sa valeur et les transformations optiques possibles. Nous représentons le graphique. En étudiant l'énergie E en fonction du vecteur d'onde La direction cristallographique du réseau réciproque. Le schéma définit es valeurs extrêmes des bandes de conduction et de valence et montrant la différence symétrie de la première zone de Brillouin.

2.4.1.3 Gap énergétique de l'alliage ternaire

Le gap énergétique de l'alliage ternaire suit une dépendance quadratique, il est de la forme: [17,18]

$$E_g(x)_{CdS_xTe_{1-x}} = xE_{CdS} + (1-x)E_{CdTe} + dx(1-x) \quad (2-10)$$

Avec :

E_{CdS} : Gap du composé CdS.

F_{CdTe} : Gap du composé CdTe.

d : Paramètre de courbure optique.

Le paramètre de courbure optique (d) pour des gaps d'énergie basse est généralement positif [19,20] sauf quelques exceptions pour quelques alliages où on le trouve négatif [21].

Quelques paramètres physiques des alliages changent de l'interpolation linéaire vers l'interpolation quadratique, des équations, on a:

$$F(x)_{CdS_xTe_{1-x}} = xF_{CdS} + (1-x)F_{CdTe} + dx(1-x) \quad (2-11)$$

En développant l'équation (2-11) on a une équation quadratique de la forme:

$$F(x)_{CdS_xTe_{1-x}} = A + Bx + Cx^2 \quad (2-12)$$

Où : $A = F_{CdTe}$, $B = F_{CdS} - F_{CdTe} + d$, $c = -d$

Le paramètre de non linéarité (C) est appelé paramètre de courbure ou bowing. Sachant que la VCA néglige l'effet de désordre, ce paramètre est très différent de celui donné par l'expérience. Pour pallier le désaccord, le bowing est calculé différemment comme suit. [22]

$$C_{\text{exp}} = C_i + C_e \quad (2-13)$$

Tels que le C_i est le bowing intrinsèque dû à la VCA et C_e est le bowing extrinsèque dû au désordre.

L'inconvénient de la VCA est qu'elle donne un paramètre de courbure du gap fondamental très différent de celui trouvé par l'expérience. Ce désaccord est dû au fait d'avoir négliger l'effet du désordre compositionnel.

2.4.2 Les Propriétés structurales

L'état cristallin diffère des autres états solides en ce que les atomes se rangent dans un certain ordre.

Cet état est formé par la répétition périodique d'atomes ou un groupe d'atomes (de même nature ou de nature différente) appelé un motif de cristaux, ou maille selon les trois directions de l'espace, et permettre la translation par générer une structure cristalline. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et électrons essentiellement maintenus ensemble par la force de Coulomb.

L'immense majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si, Ge) ou optoélectroniques (GaAs, InP), sont basés sur la même structure cristalline, celle de diamant (Si, Ge) ou la structure Zinc blende (GaAs, InP). Les deux structures sont présentées dans la Figure (2.1) [23]

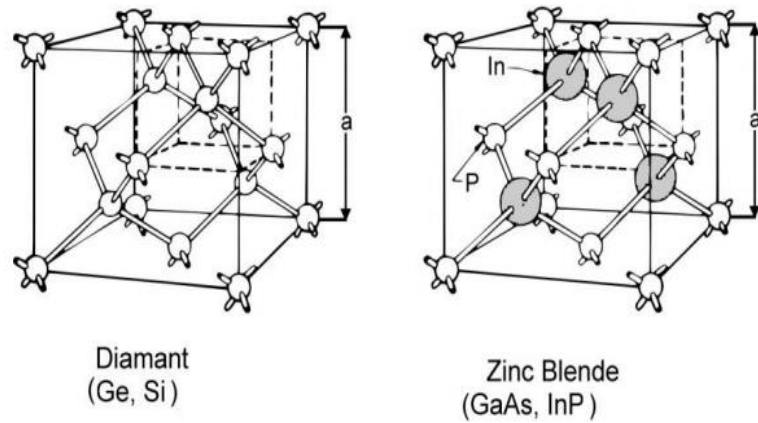


Figure (2.1) : Structure cristalline Diamant et Zinc Blende

2.4.2.1 La maille cristalline

La maille cristalline est définie par trois paramètres a , b , c et par trois angles qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (2.2), suivant les valeurs relatives de six grandeurs, on définit les différentes structures cristallines.

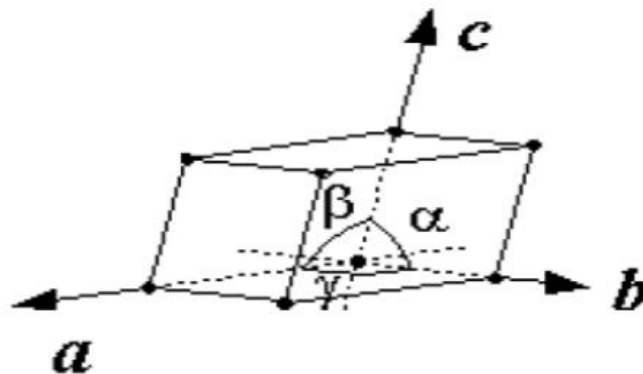


Figure (2.2): Réseau triclinique primitif d

2.4.2.2 La constant de réseau

La constant de maille est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives, notée a [24]. Sa détermination est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. La connaissance de cette constante de maille permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique, il peut varier dans l'espace tridimensionnel en fonction de la température et de la pression. [25]

Les tableaux suivants présentent la structure cristalline et la constante de maille des matériaux semi-conducteurs des groupes II-VI et III-V

Tableau (2.1) : Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-VI. [26]

Matériau	a (Å)	Structure
ZnSe	5,6692	Zb
ZnTe	6,1037	Zb
CdS	4,1367	Zb
CdSe	4,2999	W
CdTe	6,481	Zb
HgS	5,852	Zb
HgSe	6,084	Zb

Tableau (2.2): Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V [26].

Matériau	a(Å)	Structure
GaP	5,4508	Zb
GaN	3,1896	Zb
GaAs	5,65330	Zb
InN	3,548	W
InP	5,8690	Zb
InSb	6,47937	Zb
InAs	6,0583	Zb

2.4.3 Les propriétés élastiques

Les propriétés élastiques des solides transforment leurs réponses en interventions de certains facteurs externes. Dans le cas le plus simple, ces facteurs sont des actions. mécanique : Compression, traction, flambage, choc, torsion. Sauf intervention mécanique, elles peuvent être thermiques, magnétiques, etc. Ces propriétés sont d'abord déterminées en intervenant dans les atomes ou molécules qui composent un solide.

2.4.3.1 Les tenseurs des contraintes

Le concept de retenue découle de la réflexion des efforts internes générés lorsqu'un objet est déformé. Le stress est une force divisée par la surface est donc homogène sous pression et s'exprime en Pascals.

Tenseur de contrainte, notée σ , est une matrice 3×3 symétrique.[27] Les neuf composantes du tenseur des contraintes σ sont représentées sur la figure (2.3).

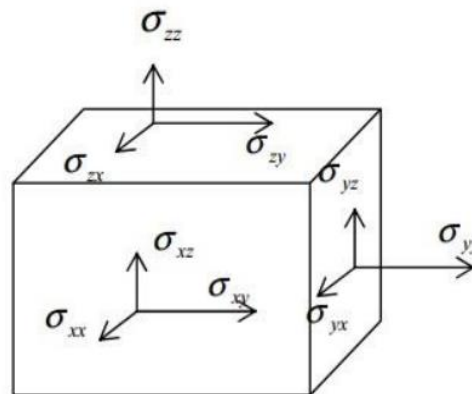


Figure (2.3) : Composantes normales et tangentielles d'un tenseur de contraintes.

Dans cette notation, le premier indice (i) indique la direction de la force, le deuxième indice (j) représente la normale au plan de force.

Ces composants sont appelés contraintes normales car ils fonctionnent Perpendiculaire aux différentes faces du cube (Figure 2.4). Élément σ_{ij} avec $i \neq j$ sont les contraintes tangentielles lorsqu'elles agissent dans le plan de la surface.

La composante de contrainte a une force par unité de surface ou énergie par unité de volume.

Le tenseur des contraintes est symétrique et il s'écrit:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2-14)$$

2.4.3.2 Les tenseurs de déformation

Sous l'action de la force appliquée, le solide se déforme [28], Il change de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position de repos de l'objet dans laquelle aucune force

n'est appliquée à l'objet.

Pour représenter les déformations que subit un matériau sous l'action d'une contrainte, supposons que trois vecteurs orthogonaux $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$ de longueur unité soient liés au solide non déformé. Une petite déformation uniforme du solide fait changer l'orientation et la longueur des axes (figure 1.5).

Les nouveaux axes peuvent être exprimés en fonctions des anciens : les mots des anciens :

$$\vec{x}' = (1 + \varepsilon_{xx})\vec{x} + \varepsilon_{xy}\vec{y} + \varepsilon_{xz}\vec{z} \quad (2-15)$$

$$\vec{y}' = \varepsilon_{yx}\vec{x} + (1 + \varepsilon_{yy})\vec{y} + \varepsilon_{yz}\vec{z} \quad (2-16)$$

$$\vec{z}' = \varepsilon_{zx}\vec{x} + \varepsilon_{zy}\vec{y} + (1 + \varepsilon_{zz})\vec{z} \quad (2-17)$$

Les $\varepsilon_{\alpha\beta}, \alpha, \beta \rightarrow x, y, z$ définissent la déformation.

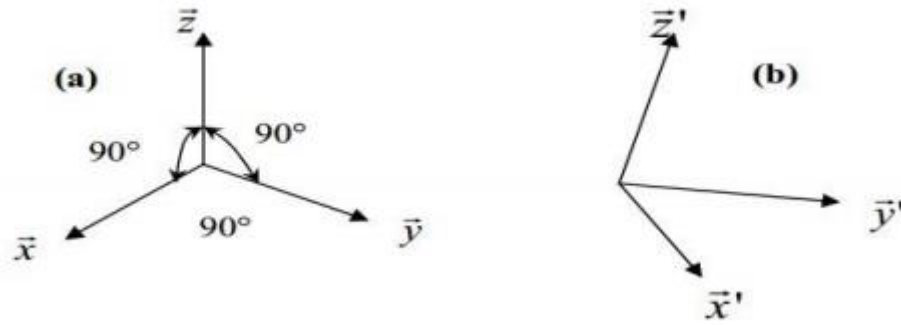


Figure (2.4): Positions des axes de coordonnées : (a) état initial, (b) état déformé

Si la déformation est uniforme [28], le point initialement en $\vec{r} = x\vec{x} + y\vec{y} + z\vec{z}$ occupera la position $\vec{r}' = x\vec{x}' + y\vec{y}' + z\vec{z}'$.

Le déplacement \vec{R} de la déformation est défini par :

$$\vec{R} = \vec{r}' - \vec{r} = x(\vec{x}' - \vec{x}) + y(\vec{y}' - \vec{y}) + z(\vec{z}' - \vec{z}) \quad (2-19)$$

Soit, d'après (2-15), (2-16) et (2-17) :

Sous une forme plus générale :

$$\vec{R} = u(r)\vec{x} + v(r)\vec{y} + w(r)\vec{z} \quad (2-20)$$

A partir des équations (2-20) et (2-21) un développement de \vec{R} en série de Taylor donnera alors [28] :

$$x \varepsilon_{xx} \approx x \frac{\delta u}{\delta x} \quad (2-22) \quad y \varepsilon_{yx} \approx x \frac{\delta u}{\delta y} \dots \text{etc} \quad (2-21)$$

On définit la déformation ε de la manière suivante [29]:

$$\varepsilon_{ij} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2-22)$$

Avec $(x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z)$ et $(u_1 = u, u_2 = v, u_3 = w)$

Donc

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\delta u}{\delta x}; \varepsilon_{yy} = \frac{\delta v}{\delta y}; \varepsilon_{zz} = \frac{\delta w}{\delta z} \quad (2-23)$$

$$\varepsilon_{yx} = \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right), \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right), \quad (2-24)$$

Le tenseur des déformations, est un tenseur symétrique d'ordre 2 servant à décrire l'état de déformation local résultant de contraintes. Les composantes sont notées ε_{ij} , avec :

Les termes diagonaux ε_{ii} sont les allongements relatifs dans la direction i (selon l'axe X_i). Les autres termes ε_{ij} ($i \neq j$) sont les demi-variations de l'angle droit (en supposant un petit volume de matière cubique avant déformation).

Donc le tenseur de déformation s'écrit comme suit :

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (2-25)$$

Après avoir décrit la déformation, nous verrons comment connecter La loi de comportement du tenseur de contrainte au tenseur de déformation.

2.4.3.3 Les Constantes élastiques

L'application de contraintes sur des matériaux anisotropes provoque une déformation ε est proportionnel à la contrainte dans la limite d'élasticité. La méthode de Nielsen et Martin [30] a montré que les composantes σ_{ij} du tenseur des contraintes sont des fonctions lignes des composants du tenseur de déformation ε_{kl} .

La constante de proportionnalité définit la constante élastique C_{ijkl} du tenseur.

La symétrie du tenseur des contraintes et la déformation permet d'écrire la loi de Hooke comme suit [31, 32] :

$$\sigma_{ij} = \sum_{ijkl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2-26)$$

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (2-27)$$

$$\varepsilon_{kl} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (2-28)$$

$$(C_{ijkl}) = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (2-29)$$

Dans un matériau à symétrie cubique, il existe deux constantes ;

Les constantes de raideur, d'élasticité et de cisaillement sont données par :

$$C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (2-30)$$

Ces constantes élastiques sont exprimées en fonction des coefficients de Lamé λ et μ

$$C_{11} = \lambda + 2\mu \quad (2-31)$$

$$C_{12} = \lambda \quad (2-32)$$

$$C_{44} = \mu \quad (2-33)$$

- Calcul de C_{11} et C_{12}

Méthode de calcul des constantes élastiques C_{11} , C_{12} , et C_{44} Développé par Nielsen et Martin [30] la déformation ε_1 et ε_2 résultante de l'application d'une contrainte dans la direction [100] donne ;

$$C_{11} = \frac{\sigma_1}{\varepsilon_1} \quad (2-34)$$

Et

$$C_{12} = \frac{\sigma_1}{\varepsilon_2} \quad (2-35)$$

- Calcul de C_{44}

Une contrainte σ le long de la direction [111] donne la déformation :

$\varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6$ dans la structure de zinc blende. Le résultat de cette déformation est :

$$C_{44} = \frac{\sigma}{\varepsilon_4} \quad (2-36)$$

2.5 Les paramètres mécaniques

2.5.1 Le module d'Young

Le module de Young (Y_0) ou module d'élasticité longitudinale ou encore module de traction, est la constante qui relie la contrainte de traction ou de compression (σ) et la déformation (ε) pour un matériau élastique isotrope.

Ce paramètre s'exprime en fonction des coefficients de Lamé et des constantes élastiques par [33]:

$$Y_0 = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{(\lambda + \mu)} = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (2-37)$$

2.5.2 Coefficient de Poisson :

Le coefficient de Poisson σ_0 caractérise la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué [34].

$$\sigma_0 = \frac{(l_0 - l) / l_0}{(L_0 - L) / L_0} = - \frac{\Delta l / l_0}{\Delta L / L_0} \quad (2-38)$$

La variation relative du volume $\frac{\Delta v}{v}$ due aux petites déformations est donnée

par:

$$\frac{\Delta v}{v_0} = (1 - 2\sigma_0) \frac{\Delta L}{L_0} \quad (2-39)$$

Le coefficient de Poisson s'exprime en fonction des coefficients de Lamé, μ et les constantes élastiques par :

$$\sigma_0 = -\frac{\Delta l / l_0}{\Delta L / L_0} = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} = \frac{C_{12}}{C_{11} + 2C_{12}} \quad (2-40)$$

La figure (2.5) représente Le schéma qui montre la contraction du matériau perpendiculairement à l'effort est illustré.

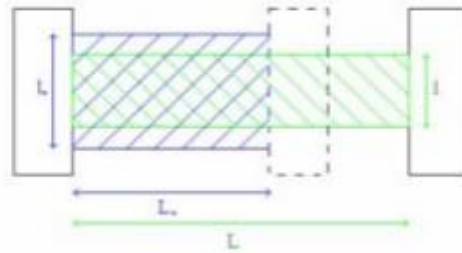


Figure (2.5) : Illustration de la contraction d'un matériau.

2.5.3 Modules de compression et de compressibilité

Le module de compression d'un matériau est défini comme étant la variation relative de son volume V par unité de la pression hydrostatique appliquée P [35]:

$$B_S = -\frac{1}{v} \frac{dv}{dP} \quad (2-41)$$

L'obtention de la compressibilité B_S d'un matériau anisotrope nécessite la connaissance du changement de volume par unité de volume [36]:

$$\varepsilon_{ii} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = -\frac{3}{C_{11} + 2C_{12}} P = -\frac{3(1 - 2\sigma_0)}{Y_0} P \quad (2-42)$$

$$K = \frac{3}{C_{11} + 2C_{12}} = \frac{3(1 - 2\sigma_0)}{Y_0} \quad (2-43)$$

Le module de compressibilité s'exprime en fonction des constantes élastiques et en fonction du module d'Young et du coefficient de Poisson par:

$$B_S = 1/k = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) = \frac{Y_0}{3(1 - 2\sigma_0)} \quad (2-44)$$

2.5.4 Module de cisaillement

Le module de cisaillement ou de rigidité C' est le rapport entre les contraintes de la force de cisaillement appliquée et l'angle de déformation résultant. Le module de cisaillement, également appelé module de glissement, module de Coulomb ou second coefficient de Lamé, est une grandeur propre à chaque matériau qui interfère avec la caractérisation du matériau. Il est exprimé comme Constantes élastiques en fonction du module d'Young et du coefficient de Poisson Via l'expression [34] :

$$C' = \frac{\sigma}{\theta} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} = \frac{Y_0}{2(1 + \sigma_0)} \quad (2-45)$$

La figure (2.6) représente le schéma d'une déformation par effet de cisaillement.

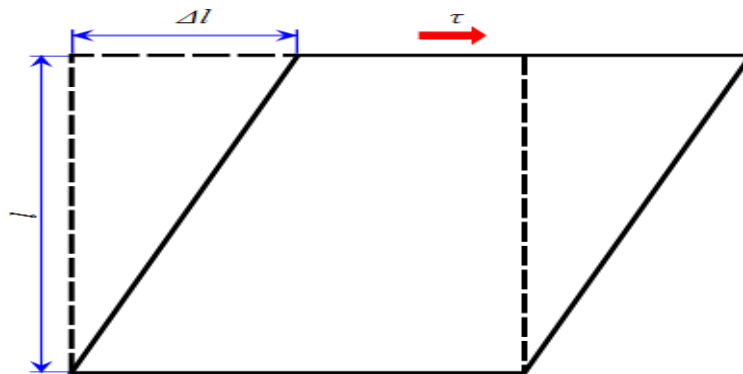


Figure (2.6) : Essai de cisaillement

2.5.5 Facteur d'anisotropie

L'anisotropie est la propriété dépendante de la direction d'une grandeur physique, représente le rapport de la constante élastique au module de cisaillement. On l'exprime en fonction des constantes élastiques par la relation [36].

$$A = 2C_{44} / (C_{11} - C_{12}) \quad (2-46)$$

$A = 1$ pour les matériaux isotropes, et toute valeur autre que l'unité présente l'anisotropie, et l'écart reflète le degré d'anisotropie.

2.6 Les applications des matériaux semi-conducteurs II-VI

Jusqu'à présent, les applications des matériaux semi-conducteurs II-VI sont : Les détecteurs de rayonnement qui sont principalement concentrés dans les zones proches L' infrarouge, particulièrement intéressant car la plupart des émissions de

chaleur rayonnante dans la région sont répandues. Le semi-conducteur de ce matériau est le CdS, qui a de bonnes propriétés optoélectroniques.

Les matériaux II-VI luminescent tous dans le visible (à l'exception des semi métaux Hg Se et HgTe et ce, à cause de l'atome lourd de mercure ($Z = 80$) : du rouge avec le CdTe à l'infrarouge grâce à l'incorporation de mercure (en se servant du fait que le CdTe et le HgTe aient quasiment le même paramètre de maille, respectivement de 6, 480 Å et de 6, 460 Å).

C'est en particulier dans l'infrarouge que les tellures ont trouvé leurs principales applications (militaires). Quant au visible, les récentes diodes électroluminescentes LED vertes à base de ZnTe [37, 38] et les diodes lasers jaune-vertes à base de ZnSe [39] conquièrent un marché encore vierge puisqu'au contraire du rouge et du bleu il n'existe pas encore de diodes lasers commercialisées dans la gamme des 550 ~ 590 nm.)

Les semi-conducteurs II-VI sont également des matériaux très prometteurs pour la fabrication de cellules solaires telles que CdS et CdTe en raison de leur bonne adaptabilité à la bande interdite située au milieu du spectre solaire.

Efficacité en laboratoire [40, 41], les cellules CdS-CdTe sont couramment utilisées pour atteindre des conversions de 20,4 % à 21 %, qui sont compétitives avec d'autres matériaux prometteurs tels que CuInGaSe₂ (20,5 %) ou le silicium amorphe (13,4 %).

Le CdTe en couche mince d'une épaisseur d'environ 2 µm absorbera presque 100 % du rayonnement solaire incident [42].

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rassemblé quelques propriétés physiques des semiconducteurs. électronique, structureales et élasticitiques : déformation, contrainte et constantes élastiques, loi de Hooke et paramètres élastiques (modulée comparabilité, module de cisaillement, module de Young, coefficient de Poisson et facteur d'anisotropie).

Références bibliographiques du chapitre 2

- [1] bechiri. abderrachid. Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V, thèse doctorat. Université mentouri. Umc (Algerie).(2006).
- [2] P. Kiréev, « La Physique des semiconducteurs », édition Mir, Moscou (1975).
- [3] F. Aymerich, Phys. Rev. B26, 1968 (1982).
- [4] H. Abid, Thèse de doctorat d'état, Université de Sidi Bel-Abbes, (1997)
- [5] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [6]. S. Bounab, Thèse de magister, Univ. de Constantine, Algeria, (2002).
- [7]. K. Kassali, N. Bouarissa, Solid State Electronics 44 (2000) 501.
- [8]. S. Adachi, J, Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [9].C. Nordheim, Phys. K 9 (1931) 607.
- [10].R. Parmenter, Phys. Rev. 97 (1955) 587.
- [11] J. E. Bernard and A. Zunger, Phys. Rev. B36 (1987) 3199.
- [12] Francis Lévy, " physique et technologie des semiconducteurs ", édition première, 1995, lausanne.
- [13] H. Rachida, Magister, Université Ferhat Abbas de Setif (2011)
- [14] S. Bouras, Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas de Setif (2015).
- [15] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [16] M . Labidi, Thèse de Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011).
- [17] S. Adachi, J, Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [18]I. Vurgaftman and J. R. Meyer, Journal of applied physics. 89 (2001) 11.
- [19] D. Richardson, J. Phys.Solid Stat. Phys. 5 (1972) 27.
- [20]O. Madelung, «Phys of III-V compound », Ed Wiley, New-York (1964).
- [21] A. Baldereschi and K. Maschke, Solid Stat. Commun. 16 (1975) 99.
- [22] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, Phys. Rev. B 1 (1970) 3351.
- [23] Q.Tridoan, thèse de doctorat, Université de Reims, Champagne.Ardenne, (2011).
- [24] bechiri. abderrachid. Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V, thèse doctorat. Université mentouri. Umc (Algerie).(2006).

- [25] Bahi Wafa. Les semi-conducteurs binaires utilisés dans la composante optoélectronique.
- [26] S.Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur », Wiley, Chichester, (2009).
- [27] R. E. Newnham, Properties of Materials, Anisotropy, Symmetry, Structure, (Oxford University Press, 2005)
- [28] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th edition (John Wiley & Sons, New York, 2005).
- [29] V. Trinite, Thèse de Doctorat en physique, Ecole Polytechnique, France (2006)
- [30] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24, (1928) 89.
- [31] Nederveen, C.J. et van der Wal, C.W., A torsion pendulum for the determination of shear modulus and damping around 1 Hz, Rheol. Acta, 6 (4), p. 316 (1967).
- [32] Read, B.E. et Dean, G.D., The determination of dynamic properties of polymers and composites, 207 p., Adam Hilger, Bristol, (1978).
- [33] Read, B.E. et Dean, G.D., The determination of dynamic properties of polymers and composites, 207 p., Adam Hilger, Bristol, (1978).
- [34] Nederveen, C.J. et van der Wal, C.W., A torsion pendulum for the determination of shear modulus and damping around 1 Hz, Rheol. Acta, 6 (4), p. 316 (1967). and composites, 207 p., Adam Hilger, Bristol, (1978)
- [35] P. Germain, Mécanique des milieux continus, Cours à l'usage de la licence, (1962), Masson et Cie.
- [36] S. C. Stiros, P. A. Pirazzoli, J. Laborel, F. Laborel-Deguen, The 1953 earthquake in Cephalonia (western Hellenic Arc): coastal uplift and halotectonic faulting, Geophysical Journal International, Volume 117, Issue 3, (1994) 834–849.
- [37] Rolf Enderlein, NommJ. M. Horing, "Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices", World Scientific Publishing (1997) ISBN 981-02-2387-0.
- [38] J.H. Chang, J.S. Song, K. Godo, M.Y. Shen, T. Goto, T. Yao, Appl. Phys. Lett. 78 (2001) 566-568.
- [39] M. Klude, G. Alexe, C. Kruse, T. Passow, H. Heinke, D. Hommel, Phys. Stat. Sol. (b) 229 (2002) 935-942.
- [40] C. Walkons, B. Guralnick, B. M. Candless and R. Birkmire, IEEE, 1567 (2014).
- [41] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta and E. D. Dunlop, Prog. Photovolt: Res. Appl. 23, 1 (2015).

[42] C. S. Ferekides, U. Balasubramanian, R. Mamazza, V. Viswanathan, H. Zhao, D. L. Morel, *Solar Energy* 77, 823 (2004).

Chapitre 3: Résultats et discussion

Chapitre 3: Résultats et discussion

3.1 Introduction

Le progrès scientifique est étroitement lié au développement de la physique Les semi-conducteurs produisent certains dispositifs en exploitant leurs propriétés Électronique et Optoélectronique.

Les composés semi-conducteurs sont principalement connus pour leurs propriétés Electroniques, structurales et élastiques.

Les enquêtes sur les attributs ont été menées à l'aide de diverses méthodes Semi-conducteurs.

Dans notre travail actuel, nous avons choisi la méthode de pseudopotentiel empirique(EPM) utilisant l'Approximation du Crystal Virtual(VCA) pour l'étude des propriétés électroniques, les paramètres élastiques et mécaniques de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} étudié dans ce travail.

Il a été réalisé avec et sans tenir compte de l'influence du désordre compositionnel.

3.2 Etude des propriétés électroniques

3.2.1 Structure de bandes des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}

Les résultats obtenus de la structure de bande de l'alliage semi-conducteur étudié en utilisant les facteurs de forme pseudopotentiels locaux symétriques et antisymétriques et paramètres de réseau des composés semi-conducteurs binaires CdS et CdTe en phase zinc-blende sont indiqués dans le tableau (3.1).

Tableau (3.1) : Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs CdS et CdTe dans la phase zinc blende ainsi que les constantes du réseau a en (u.a).

Comp osés	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètr e du réseau a (en unité atomiqu e)
	V_S (3)	V_S (8)	V_S (11)	V_A (3)	V_A (4)	V_A (11)	
CdS	-0.23	0.01	0.06	0.134	0.096	0.019	11.0246
CdTe	-0.396388	0.198275	0.455948	0.1311	0.28	0.70814	12.2495

En utilisant ces facteurs de formes, le calcul des gaps d'énergies pour les composés binaires de notre alliage ternaire sont illustrés dans le tableau (3.2). Nos résultats sont en très bonne accord avec l'expérience.

Tableau (3.2) : Gaps énergétiques des composés zinc-blende CdS et CdTe

Composé	E_F^r (ev)	E_F^x (ev)	E_F^l (ev)
CdS	2.38 ^a	3.63 ^a	3.49 ^a
	2.36 ^b	3.64 ^b	3.50 ^b
	2.3900 ^c	3.64 ^c	3.50 ^c
CdTe	1.50 ^a	3.47 ^a	2.46 ^a
	1.50 ^b	3.48 ^b	2.47 ^b
	1.5045 ^c	3.48 ^c	2.47 ^c

^a Nos calcul

^b Ref. [1]

^c Ref. [2]

3.3 Structure de bandes de CdS et de CdTe

3.3.1 Le composé CdS

Le sulfure de cadmium CdS est un semi-conducteur à gap direct dont l'énergie est $E_g = 2.5$ eV formé d'un élément métallique, le Cadmium ($Z = 48, 4d^{10}5s^2$), et d'un élément semi-métallique, le Sulfure ($Z = 16, 3s^23p^4$)

3.3.2 Le composé CdTe

Le Tellure de cadmium CdTe est un composé binaire de masse molaire 240 g.mol^{-1} formé d'un élément métallique, le Cadmium ($Z = 48, 4d^{10}5s^2$), et d'un élément semi-métallique, le Tellure ($Z = 52, E_g = 0,33\text{eV}, 4d^{10}5s^25p^6$) [3].

Les structures de bandes de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ et ses composés binaires sont représentées dans les figures (3.1), (3.2) et (3.3) pour $x=0$, $x=1$, $x=0.6$ avec et sans tenir de l'effet du désordre respectivement.

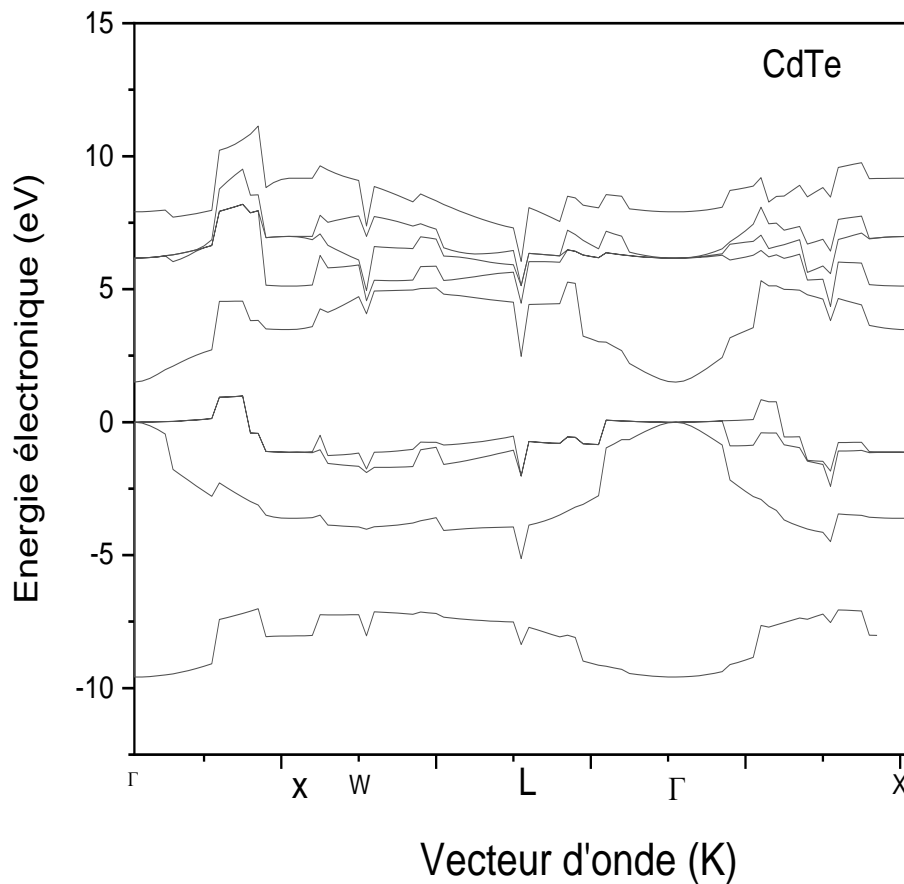


Figure (3.1) : La structure de bandes électronique de l'alliage pour $x=0$ (CdTe)

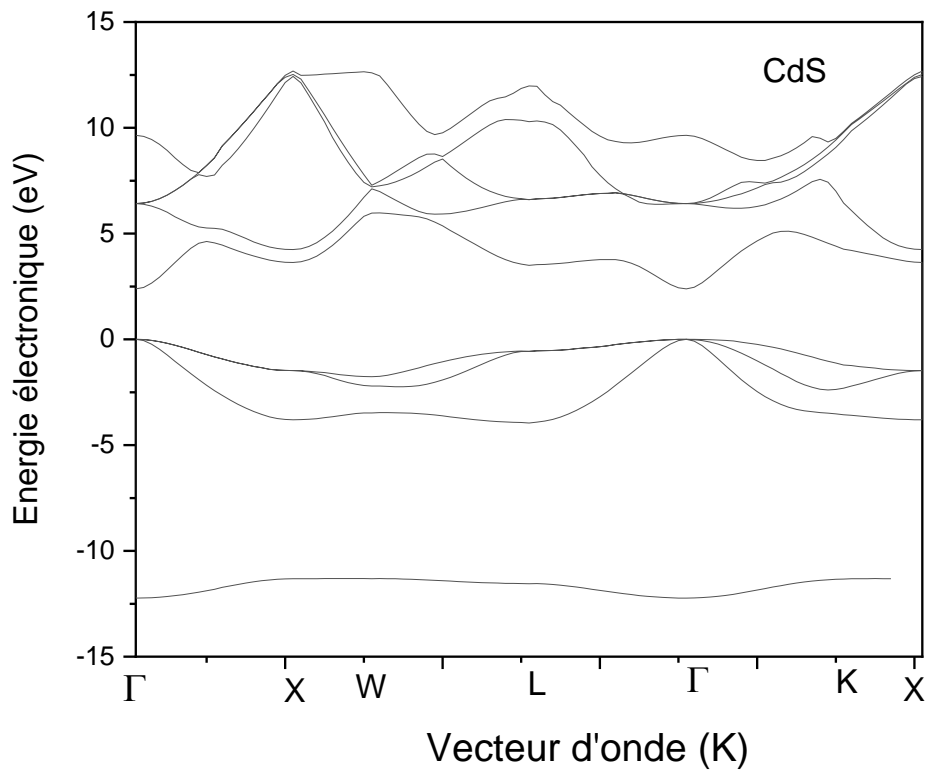


Figure (3.2) : La structure de bandes électroniques de l'alliage pour $x=1$ (CdS)

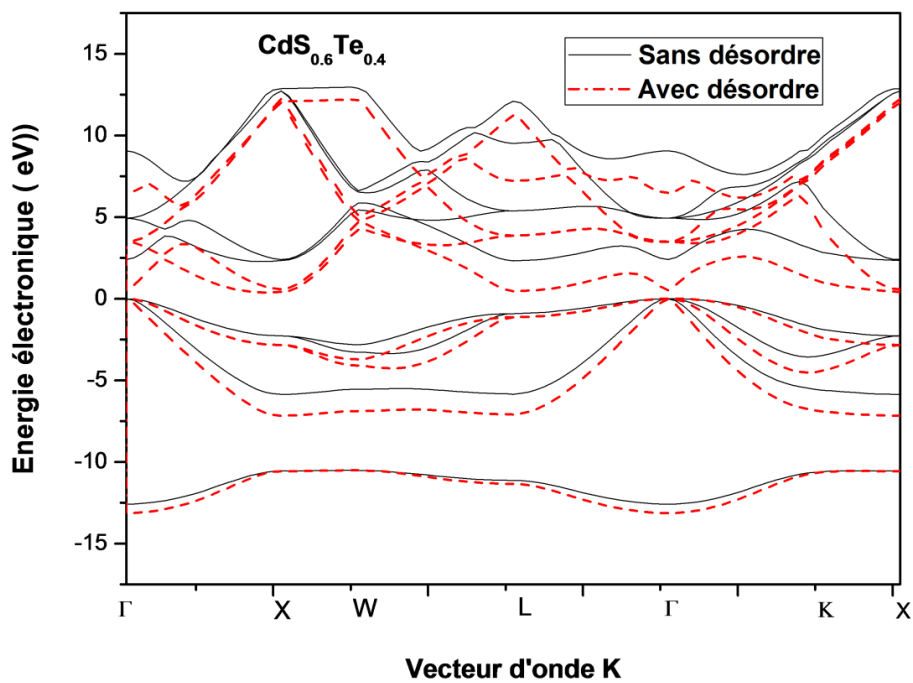


Figure (3.3) : La structure de bandes électronique de l'alliage pour $x=0.6$ a avec et sans désordre

Le sommet de bandes de valence pour tous les alliages semi-conducteurs et leurs parents est pris comme origine des énergies.

On remarque que le maximum de la bande de valence est au point Γ dans le centre de la zone de Brillouin et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ . L'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ est un semi-conducteur à gap direct E_{Γ}^F pour toutes les concentrations étudiées.

3.4 Gap énergétique des alliages ternaires $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$

Les variations directe E_{Γ}^F et indirectes E_{Γ}^X , E_{Γ}^L calculées de l'écart énergétique pour différentes compositions x de 0 à 1 de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ ternaire sont répertoriées dans le tableau (3.3). Les Valeurs pour nos composés parents par rapport aux données théoriques sont en bon accord.

Pour les alliages $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$, nos résultats sont des prédictions.

Tableau (3.3) : Les variations des gaps énergétique de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$

Composition x	E_{Γ}^F		E_{Γ}^X		E_{Γ}^L	
	sans désordre	Avec désordre	sans désordre	Avec désordre	sans désordre	Avec désordre
0	1.50 ^a	1.50 ^a	3.47 ^a	3.47 ^a	2.46 ^a	2.46 ^a
	1.50 ^b	1.50 ^b	3.48 ^b	3.48 ^b	2.47 ^b	2.47 ^b
	1.50 ^d	1.50 ^d	3.48 ^d	3.48 ^d	2.47 ^d	2.47 ^d
0.1	2.15	0.09	4.01	2.16	3.37	0.007
0.2	2.67	0.04	4.48	2.22	4.04	0.08
0.3	3.06	0.36	4.88	2.42	4.56	0.73
0.4	3.32	0.86	5.16	2.77	4.95	1.64
0.5	3.47	1.45	5.30	3.23	5.30	2.59
0.6	3.51	2.07	5.28	3.76	5.32	3.44
0.7	3.44	2.63	5.09	4.31	2.26	4.18
0.8	3.24	3.07	4.73	4.78	4.97	4.80
0.9	2.88	3.28	4.21	4.92	4.40	5.15
1	2.38 ^a	2.38 ^a	3.63 ^a	3.63 ^a	3.49 ^a	3.49 ^a
	2.36 ^c	2.36 ^c	3.64 ^c	3.64 ^c	3.50 ^c	3.50 ^c
	2.39 ^d	2.39 ^d	3.64 ^d	3.64 ^d	3.50 ^d	3.50 ^d

^a Nos calculs

^b Ref [4].

^c Ref [5].

^d Ref [2].

La variation des gaps énergétique E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X et E_{Γ}^L de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$, en fonction de la composition x avec et sans tenir de l'effet du désordre compositionnel est présentée sur les figures (3.4), (3.5) et (3.6) respectivement :

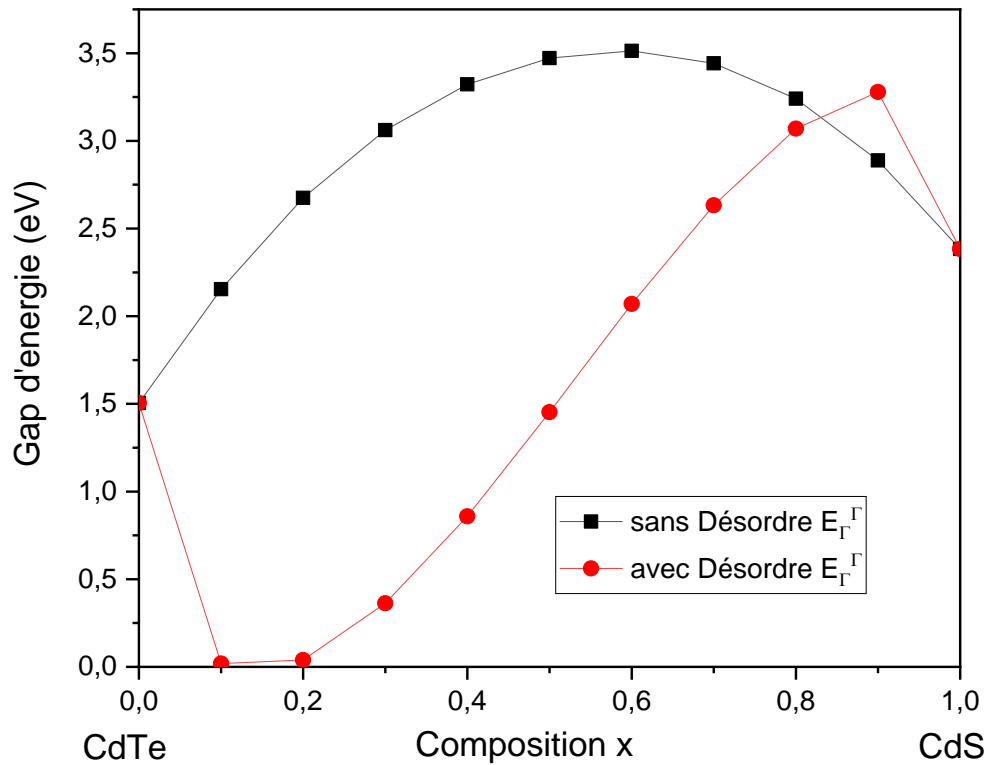


Figure (3.4): La variation du gap E_{Γ}^{Γ} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmentent avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (3.51 eV), puis diminue jusqu'à (2.38 eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire et que l'effet du désordre est important. L'équation du fit quadratique est :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 1.5048 + 7.03715x - 6.12972x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-1)$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 0.42167 + 1.05287x + 1.88143x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-2)$$

suggère un paramètre d'inclinaison de la bande interdite optique de $-6,12$ eV. La valeur obtenue n'est pas en accord avec la expérimental de $1,88$ eV rapporté dans Lane . Le désaccord est essentiellement attribué à la négligence de l'effet de désordre compositionnel par le VCA. En ajoutant une correction au VCA, c'est-à-dire en tenant compte de l'effet du désordre de l'alliage, les auteurs ont trouvé un paramètre de courbure de la bande interdite de $1,878$ eV. Les données sont en excellent accord avec celles de la expérience. L'accord est atteint pour la valeur de $P = 1.003$. Ceci montre l'importance du désordre de l'alliage CdS_xTe_{1-x} dans calculs de bande interdite, qui ne doivent pas être ignorés pour obtenir un accord significatif avec l'expérience .[6]

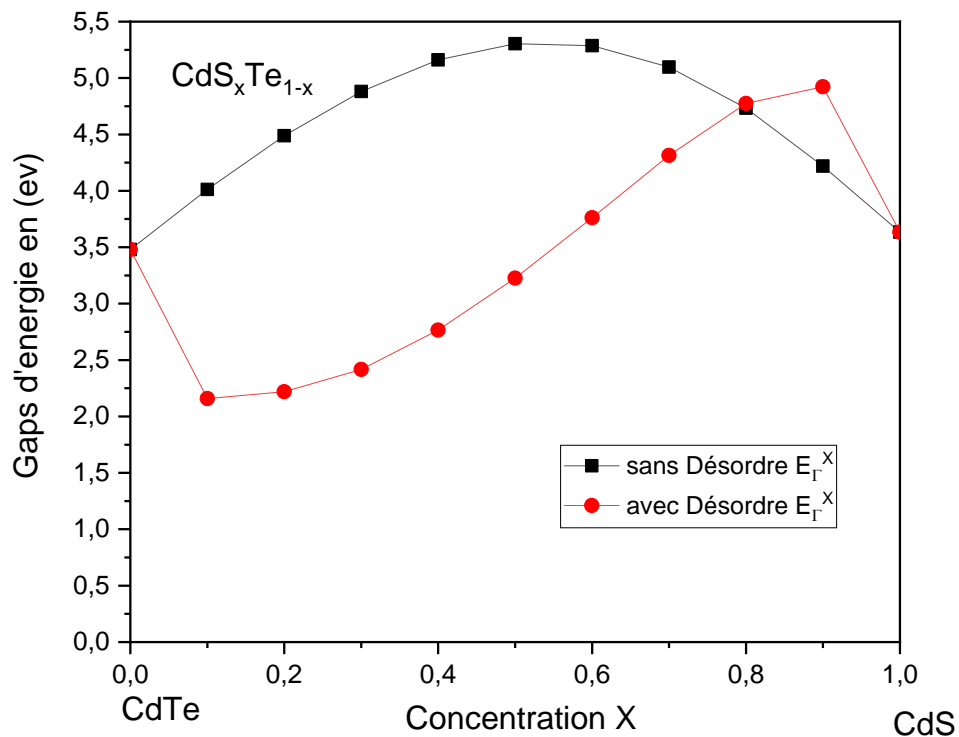


Figure (3.5): La variation du gap E_{Γ}^X en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec et sans tenir compte de l'effet du désordre

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à ($5,30$ eV), puis diminue jusqu'à ($3,63$ eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'équation du fit quadratique est :

$$E_F^X = 3.39044 + 7.26548x - 7.00244x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-3)$$

$$E_F^X = 2.50979 + 0.94889x + 1.25887x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-4)$$

La figure (3.6); représente le gap d'énergie indirect correspondant à la transition entre le minimum de la bandes de valence au point de haut symétrie Γ dans la zone de Brillouin et le maximum de la bandes conduction au point de haut symétrie L

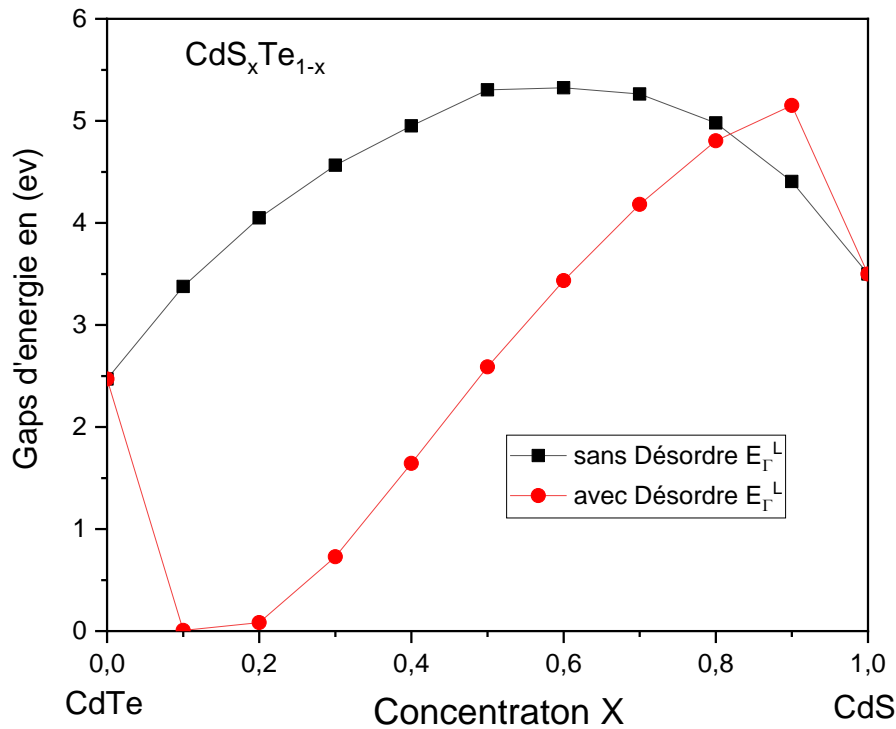


Figure (3.6): La variation du gap E_{Γ}^L en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (5.32 eV), puis diminuent jusqu'à (3.49 eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'équation du fit quadratique est :

$$E_{\Gamma}^L = 2.40108 + 10.26416x - 9.00717x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-5)$$

$$E_{\Gamma}^L = 0.64542 + 2.7207x + 1.69609x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-6)$$

Pour une éventuelle transition nous avons tracé les différentes courbes de variation des gaps énergétiques en fonction de la composition x sur la même figure (3.7).

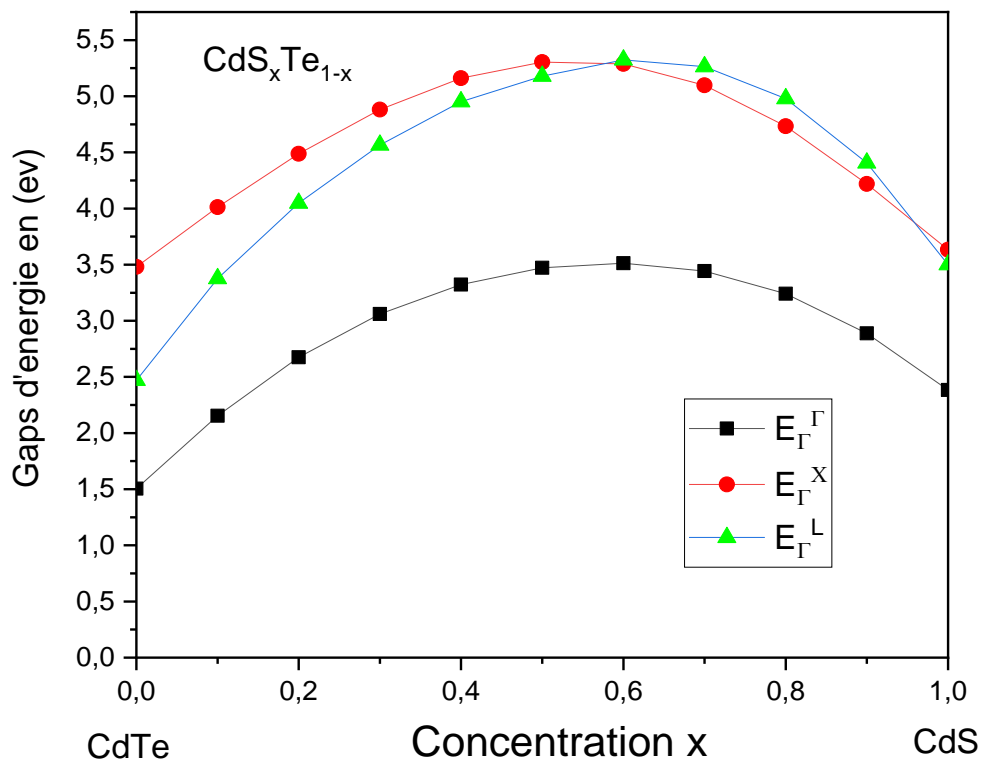


Figure (3.7): Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} sans désordre compositionnel.

Nous constatons qu'il n'y a pas de transition entre les gaps énergétiques. Ce qui confirme nos résultats précédents, que notre alliage à un gap direct en allant de $x=0$ vers $x=1$, ce résultat est identique à la nature de gap de ses composés parents qui sont tous les deux à gap direct.

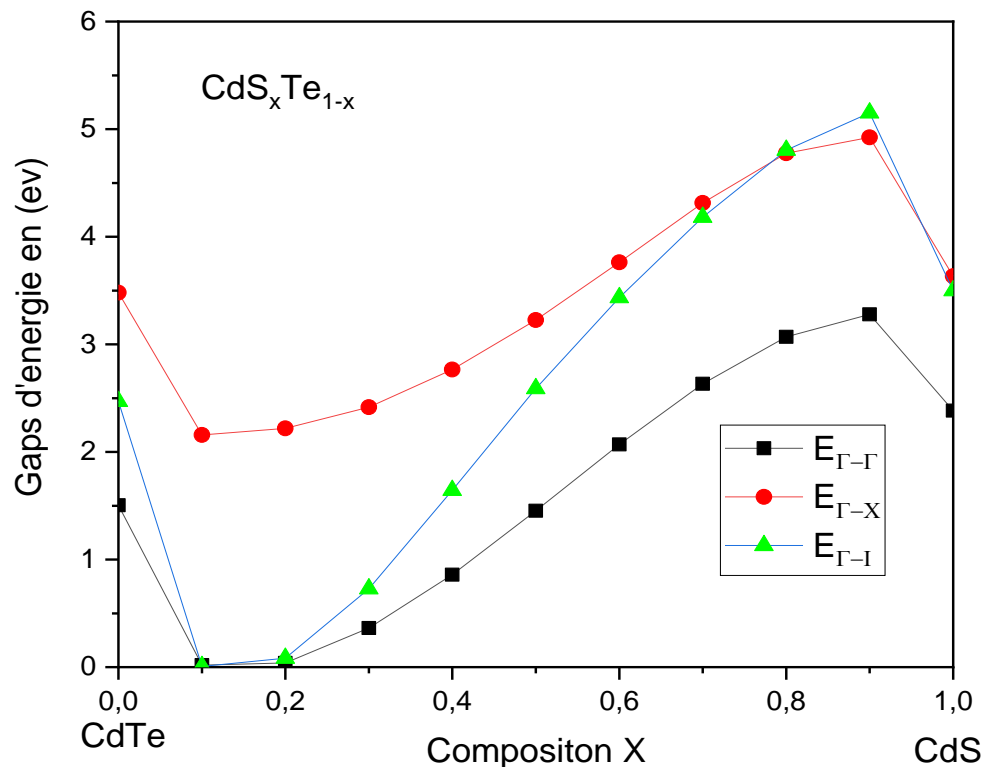


Figure (3.8) : Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec désordre compositionnel.

Nous constatons aussi même en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel qu'il n'y a pas de transition entre les gaps énergétiques. Ce qui confirme nos résultats précédents, que notre alliage à un gap direct en allant de $x=0$ vers $x=1$.

3-5 Les propriétés élastiques

Les propriétés élastiques des solides sont importantes pour comprendre des informations importantes sur les propriétés mécaniques et dynamiques des matériaux. Les propriétés élastiques sont également thermodynamiquement liées à la chaleur spécifique, à la température de Debye, au point de fusion, etc. Ils jouent un rôle très important dans la détermination de la résistance électrique des matériaux [7].

3.5.1 Les Constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44}

En raison de symétrie, dans les structures zinc-blende (cubique), il existe uniquement trois constantes élastiques indépendantes, à savoir : C_{11} , C_{12} et C_{44} , dans ce présent travail les constantes élastiques ont été calculé selon le modèle de Bouarissa [8], ou les constants élastique sont exprimée par :

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}h^2}{4d^5m} (1 - \alpha_p^2)^{1/2} [4.37(5 + \lambda)(1 - \alpha_p^2) - 0.6075] \quad (3-7)$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}h^2}{4d^2m} (1 - \alpha_p^2)^{1/2} [4.37(3 - \lambda)(1 - \alpha_p^2) + 0.6075] \quad (3-8)$$

Ou m est la masse de l'électron et d la distance entre les plus proches voisins, tel que:

$$d = \frac{\sqrt{3}a}{4}, \quad (3-9)$$

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (3-10)$$

λ est le paramètre sans dimension qui a une valeur de 0.738 [9].

La constante élastique C_{44} a été déterminée on utilisant la relation suivante, obtenue du modèle de champ de la force de valence [10] :

$$C_{44} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (3-11)$$

Les résultats obtenus sont représentés dans le tableau (3.4) comparés à des données théoriques.

Tableau (3.4): Constantes élastiques de CdS et CdTe dans la phase zinc-blende comparés à des données théoriques.

Composants	Constantes élastiques ($10^{11} \text{ dyn / cm}^2$)					
	C_{11}		C_{12}		C_{44}	
	The	Cal	The	cal	the	Cal
CdS	6.72 ^b	6.69 ^a	5.57 ^b	2.99 ^a	2.93 ^b	2.6 ^a
CdTe	6.23 ^c	6.23 ^a	2.70 ^c	2.70 ^a	2.51 ^c	2.51 ^a

^a Nos calculs

^b Ref [11].

^c Ref [12].

Afin de trouver une relation entre les constantes élastiques et la concentration x , nous avons tracé la variation de chaque constante élastique avec et sans désordre en fonction de la concentration $x = 0$ à 1 sur les figures (3.9), (3.10), (3.11).

Nous remarquons que toutes les constantes élastiques augmentent d'une manière non monotone et non linéaire avec l'augmentation de la concentration x . Qualitativement, ces constantes élastiques montrent un comportement similaire. Ces courbes sont interpolées par les équations avec désordre suivantes :

$$C_{11}(x) = 5.97808 + 7.57928x - 6.06282x^2 \quad (3-12)$$

$$C_{12}(x) = 2.59533 + 3.17205x - 2.44569x^2 \quad (3-13)$$

$$C_{44}(x) = 2.40936 + 3.1013x - 2.51667x^2 \quad (3-14)$$

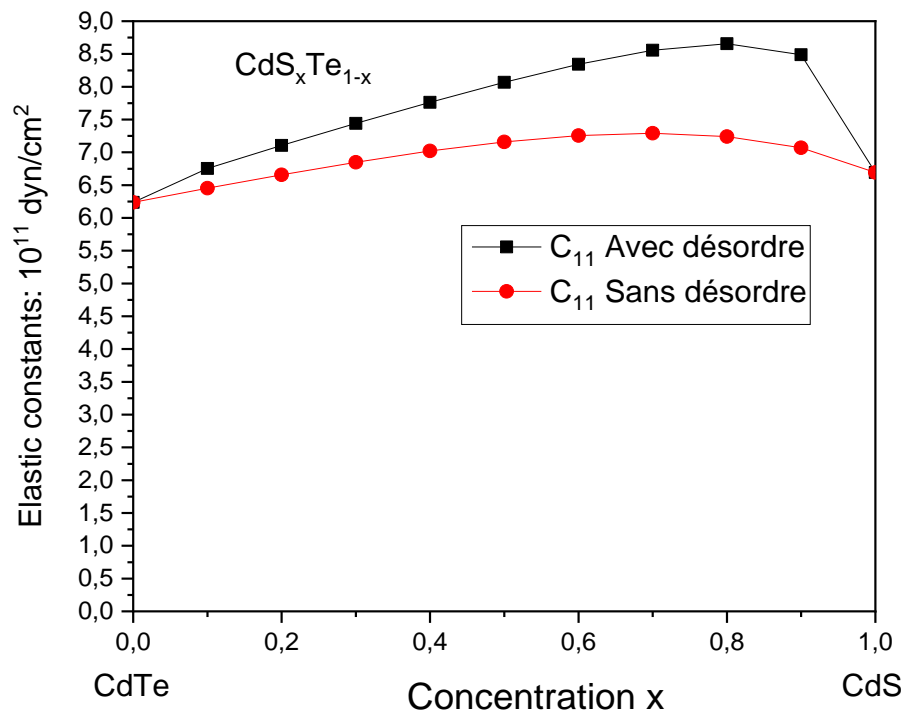


Figure (3.9) : La variation de la constante élastique C_{11} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans désordre compositionnel

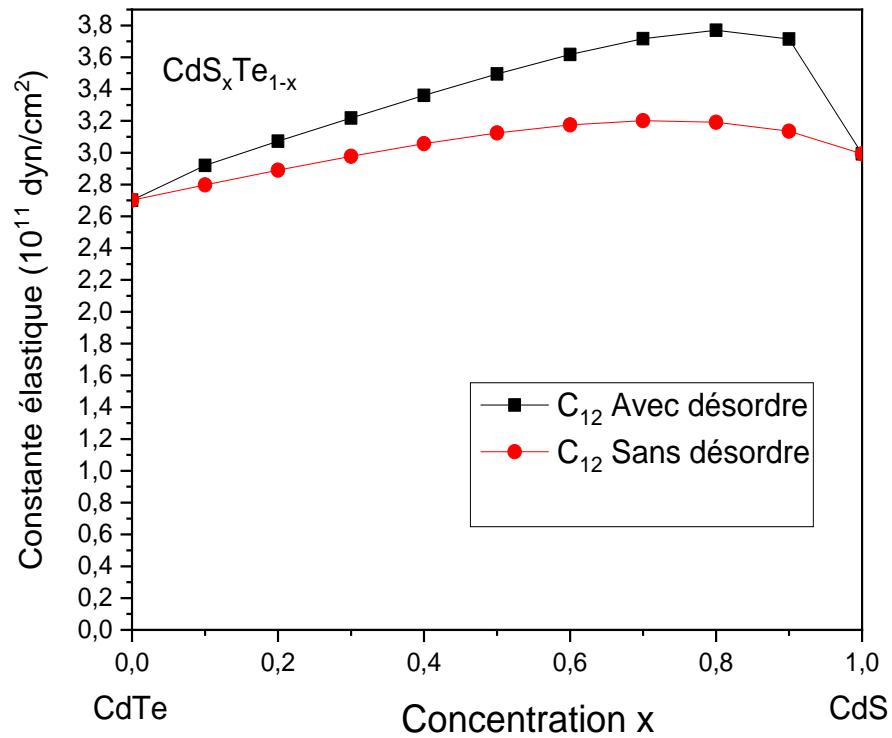


Figure (3.10) : La variation de la constante élastique C_{12} et en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans désordre compositionnel

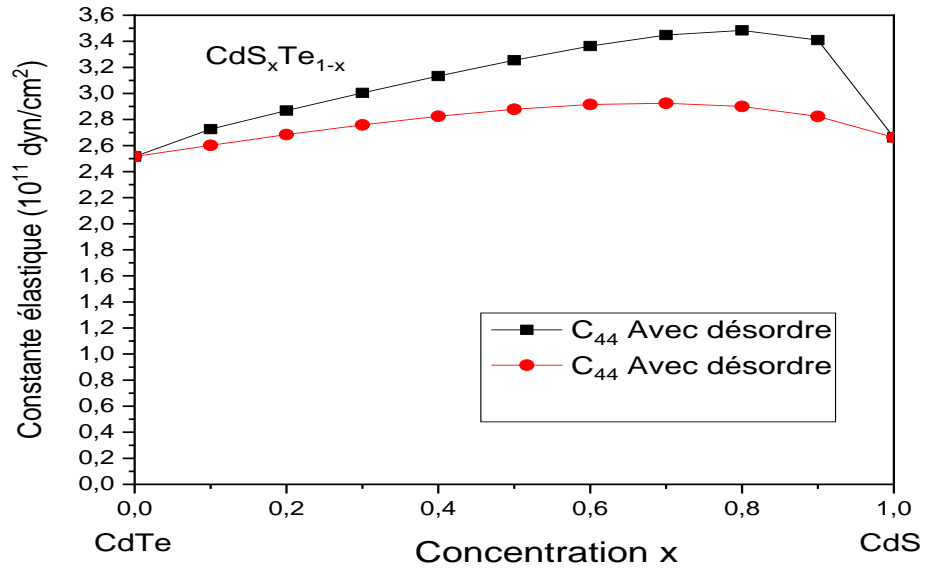


Figure (3.11) : La variation de la constante élastique C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec et sans désordre compositionnel

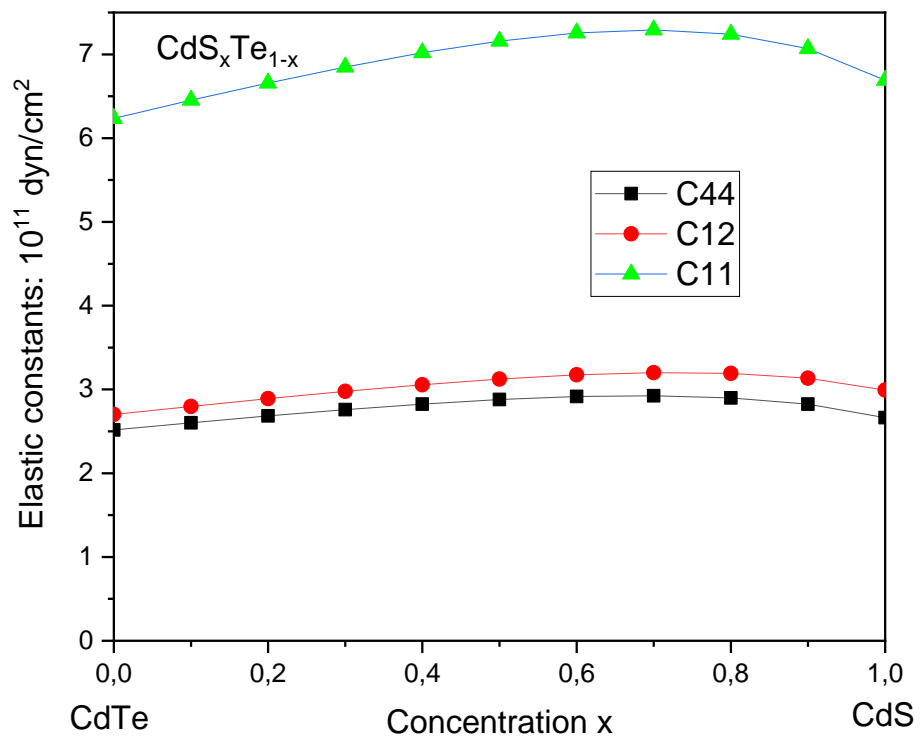


Figure (3.12) : La variation de la constante élastique C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec désordre

La figure(3.12) montre la variation des constantes élastiques C_{ij} en fonction de la concentration x , le comportement de tous les C_{ij} est non monotone. Néanmoins le taux de variation de la concentration dans C_{11} semble être plus important que ceux de C_{12} et C_{44} .

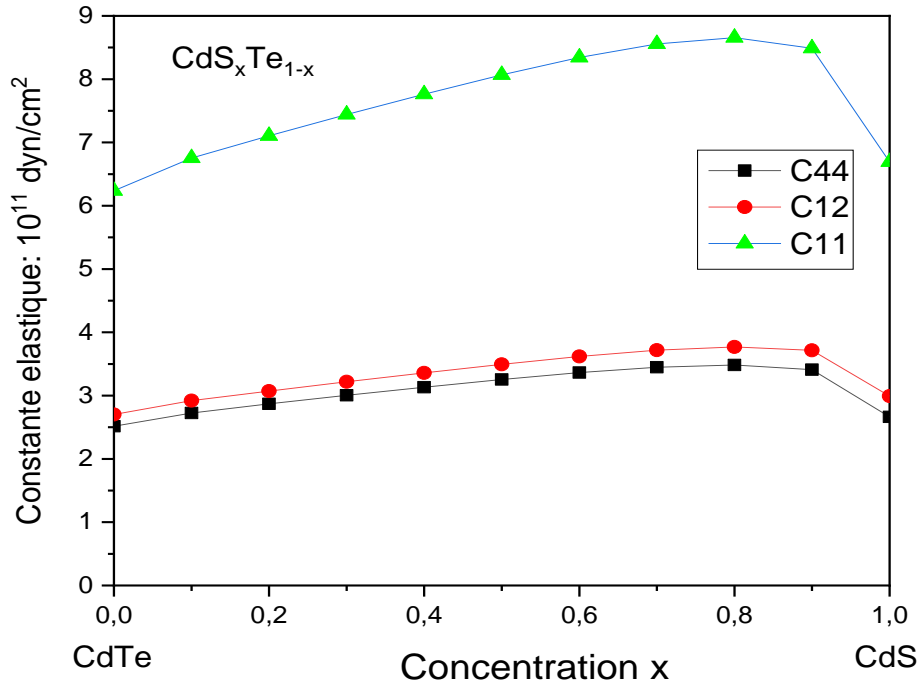


Figure (3.13) ; Constantes élastiques de en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{x-1} . sans désordre

3.5.2 Paramètres mécaniques

3.5.2.1 Module de compressibilité

Le module de compression est un paramètre important pour mesurer la dureté. Pour les cristaux cubiques, elle peut généralement être obtenue par l'expression [13].

$$B_s = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (3-15)$$

De la concentration $x=0$ à $x=1$, notre valeur calculée de B_s est ($3.87 * 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) à ($4.22 * 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) cette valeur est en bon accord avec celle de l'expérience qui est de $4.22 * 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ à $6.84 * 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ (voir tableau 3.5)

La variation du module de compressibilité (B_S) en fonction de la concentration x est présentée sur le figure (3.12). nous constatons que Le module de compressibilité B_S augmente jusqu'à ($5.39 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), avec l'augmentation de la composition x puis diminue jusqu'à ($4.22 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'interpolation quadratique de nos données donne la relation suivante :

$$B_S(x) = 3.72291 + 4.64113x - 3.6514x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-16)$$

$$B_S(x) = 3.82166 + 2.14897x - 1.65894x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-17)$$

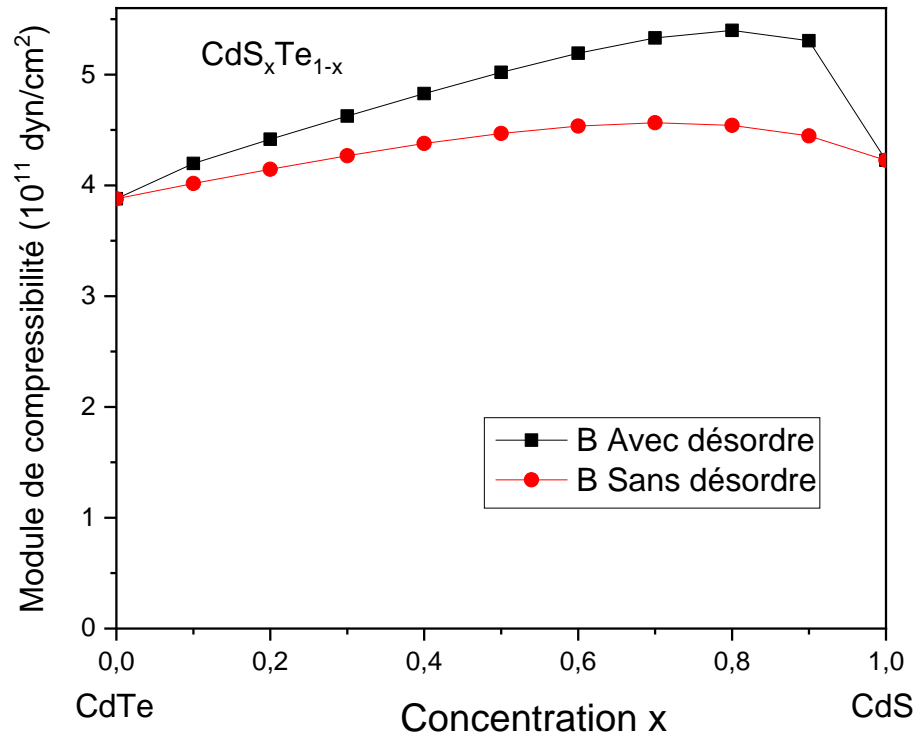


Figure (3.14) : Variation de module de compressibilité en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans désordre compositionnel

3.5.2.2 Module de cisaillement

Le module de cisaillement est une grande physique intrinsèque à chaque matériau et qui intervient dans la caractérisation des déformations causées par des efforts de cisaillement appelé C' , dans le présent document, ce dernier peut être obtenue

à partir de la connaissance des constantes élastiques et en utilisant de la relation suivante [14] :

$$C' = \frac{(C_{11}-C_{12})}{2} \quad (3-18)$$

De la concentration ($x = 0$ à $x=1$), notre valeur calculé de C' est ($1.76 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) à ($1.84 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) cette valeur est en raisonnable accord avec celle de l'expérience qui de ($0.84 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) à ($1.88 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) (voir tableau (3.5).

La variation du module de cisaillement (C') en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ est montré sur la figure (3.15), nous constatons que Le module de cisaillement C' augmente jusqu'à ($2.44 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), avec l'augmentation de la composition x puis diminue jusqu'à ($1.84 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$)) cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'interpolation quadratique de nos données donne la relation suivante :

$$C'(x) = 1.69137 + 2.20361x - 1.80857x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-19)$$

$$C'(x) = 1.73951 + 0.98422x - 0.83281x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-20)$$

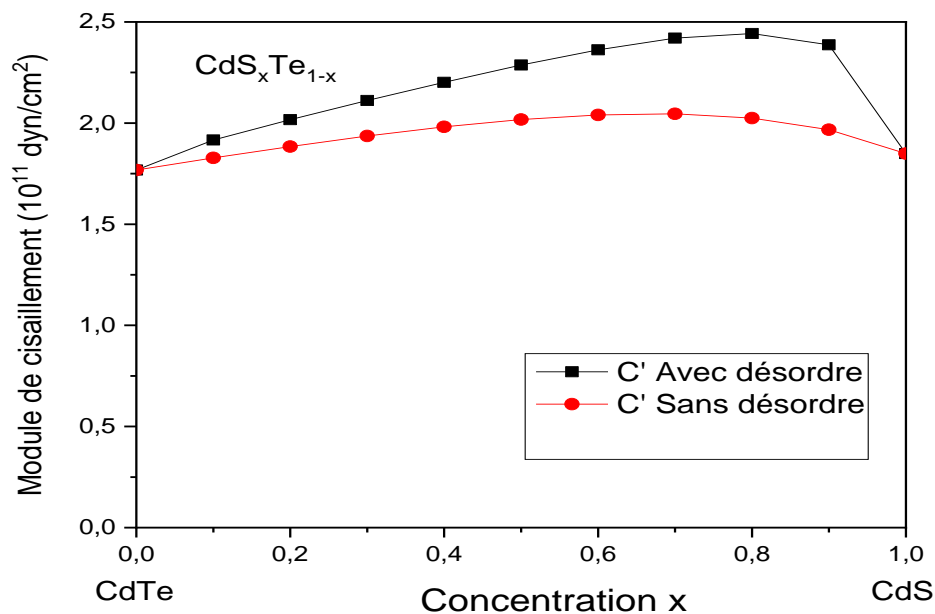


Figure (3.15) : Variation du module de cisaillement en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans désordre compositionnel

3.5.2.3 Module de Young

Le module de Young est la constante qui relie la contrainte de compression et le début de la déformation d'un matériau élastique isotrope. En utilisant la relation suivante [14] :

$$Y_0 = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (3-21)$$

La figure (3.16) présente la variation du module de Young (Y_0) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$, nous constatons que le module de Young (Y_0) augmente jusqu'à ($6.36 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), avec l'augmentation de la composition x puis diminue jusqu'à ($4.84 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'interpolation quadratique de nos données concernant (Y_0) est présentée par la relation suivante :

$$Y_0(x) = 4.40666 + 5.70981x - 4.6622x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-22)$$

$$Y_0(x) = 4.53099 + 2.56247x - 2.14416x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-23)$$

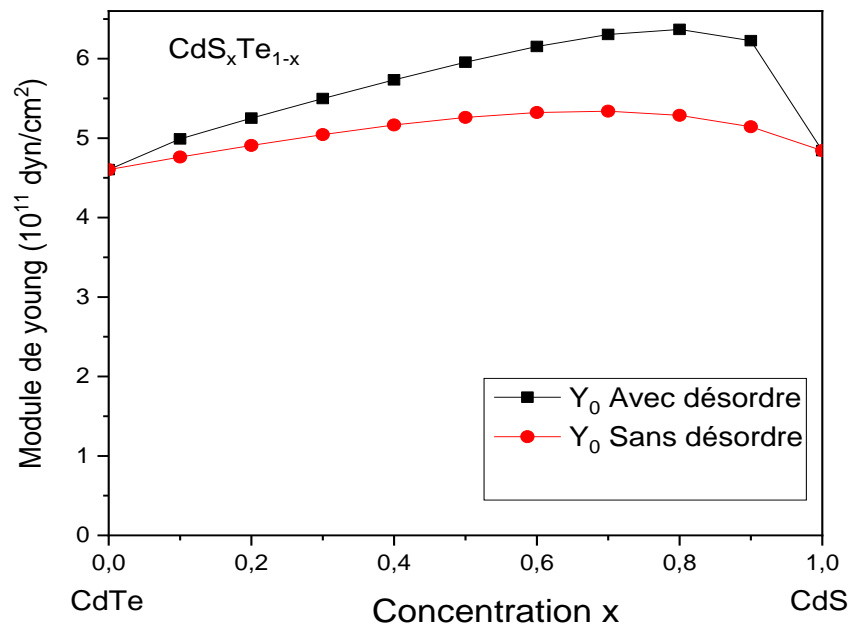


Figure (3.16): Variation du module de Young en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans désordre compositionnel

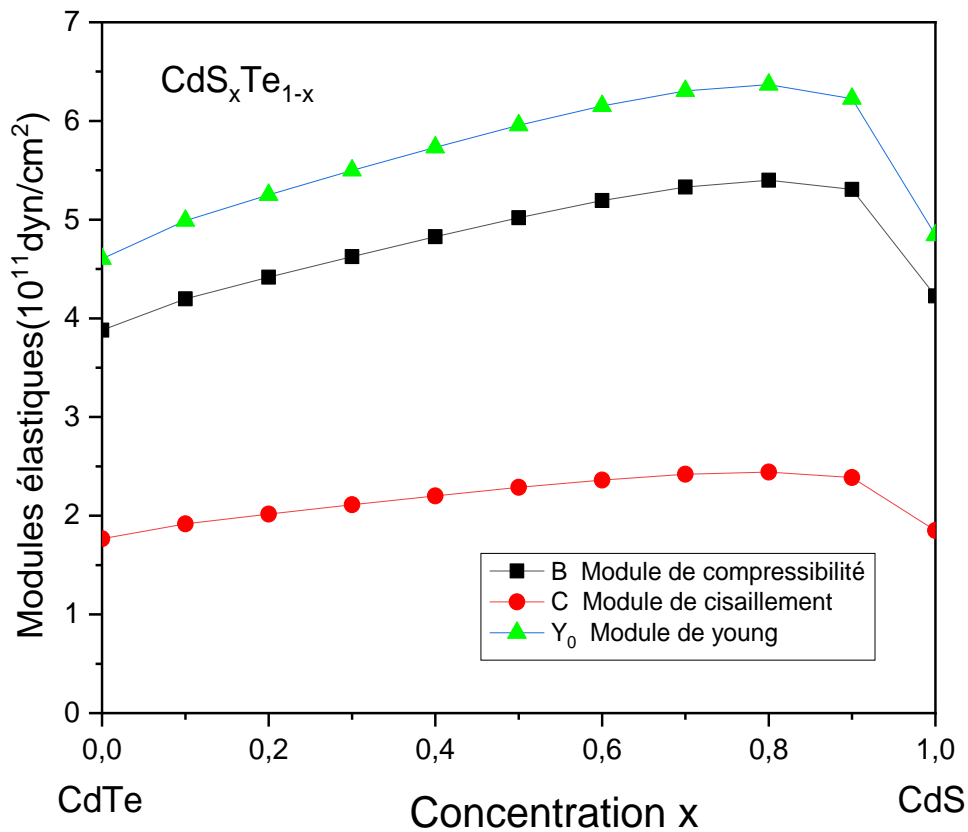


Figure (3.17) : Variation du module de Young module de cisaillement et module de compressibilités fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec désordre

Nos calculs concernant les paramètres mécaniques comparés à des données théoriques des composés parents sont illustrés dans le tableau (3.5).

Tableau (3.5) : Module de compressibilité (B_s), module de cisaillement (C'), module de Young (Y_0) pour les composés semi-conducteurs CdS et CdTe..

Composé	B_s ($10^{11} \text{ dyn / cm}^2$)	C' ($10^{11} \text{ dyn / cm}^2$)	Y_0 ($10^{11} \text{ dyn / cm}^2$)
CdS	4.22 ^a	1.84 ^a	4.84 ^a
	6.84 ^b	1.88 ^b	4.84 ^b
CdTe	3.87 ^a	1.76 ^a	4.60 ^a
	4.24 ^c	0.84 ^c	

^a Nos calcul

^b Ref [11]

^c Ref [13]

3.5.2.4 Rapport de Pugh

$$R_{B/K} = \text{rapport de Pugh} = B / K \quad (3-24)$$

où K est donné par :

$$K = \frac{(k_V + k_R)}{2} \quad (3-25)$$

k_V est donné par :

$$k_V = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (3-26)$$

k_R est donné par :

$$k_R = \frac{5[(C_{11} - C_{12})C_{44}]}{[4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})]} \quad (3-27)$$

Les résultats concernant $R_{B/K}$ par rapport à la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ sont illustré à la figure 19. Notez que $R_{B/K}$ diminue de 1,83 à 1,77 en passant de $x = 0$ à $x = 1$ Ainsi, pour toutes les compositions x allant de 0 à 1, la valeur de $R_{B/K}$ est supérieure à 1,75. D'après Pugh. Proposition mentionnée ci-dessus, on peut conclure $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ que le système d'alliage se comporte de manière ductile pour toute la concentration du sulfure continue dans l'intervalle 0–1 ($0 \leq x \leq 1$) et que l'effet du désordre n'est pas vraiment important sur le Rapport de Pugh.

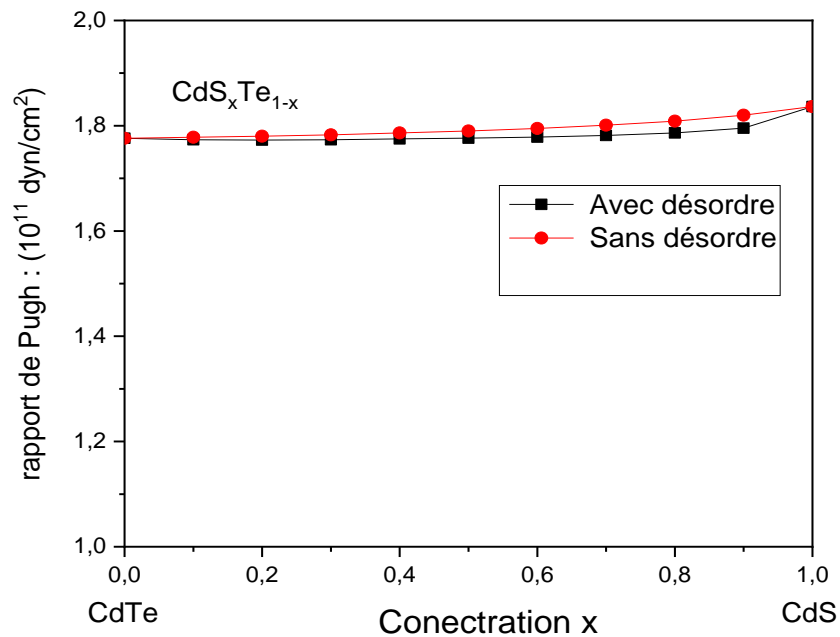


Figure (3.18): Variation du Rapport de Pugh en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans désordre compositionnel.

3.5.2.5 la pression de Cauchy

Un autre paramètre mécanique intéressant est la pression de Cauchy, qui est défini à pression nulle comme [15] :

$$C_P = (C_{12} - C_{44}) \quad (3-28)$$

Ce paramètre peut être utilisé pour décrire le caractère angulaire des liaisons atomiques dans les métaux et les composés [16]. Son signe négatif signifie que le matériau est non métallique avec une liaison directionnelle. Sinon, le matériau devrait être métallique. Dans le présent travail C_P est calculé à l'aide de la relation (3-20) et s'avère positif pour toutes les concentrations d'alliage x ($0 \leq x \leq 1$). Cela confirme la ductilité du matériau. L'évolution de C_P en fonction de la composition de l'alliage x est représentée dans figure3.19.

Nous observons que la C_P augmente de manière monotone de $0,18 \times 10^{11}$ à $0,33 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ en passant de CdS ($x = 0$) en CdTe ($x = 1$) et Que l'effet du désordre n'est pas vraiment important sur ce paramètre élastique.

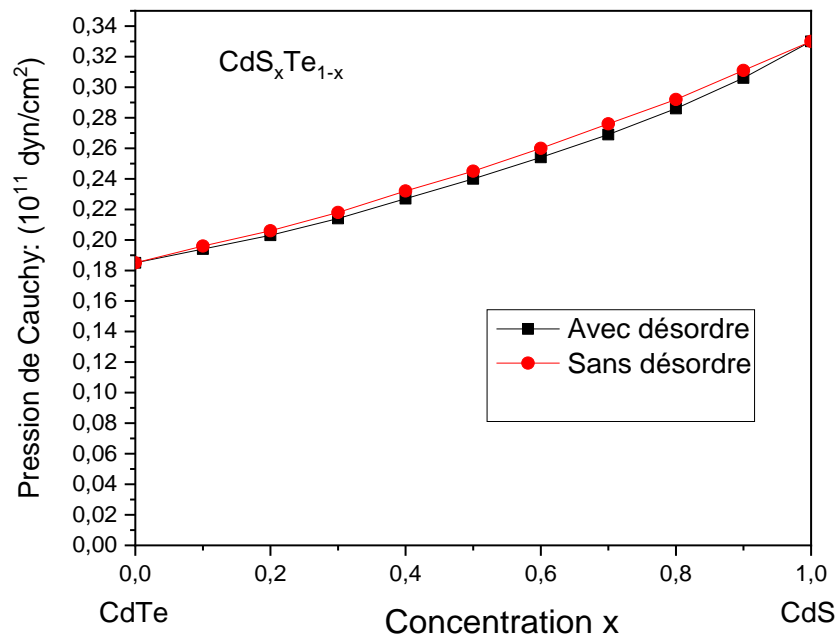


Figure (3.19): Variation de la pression de Cauchy en fonction de la concentration x de l’alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec et sans désordre compositional.

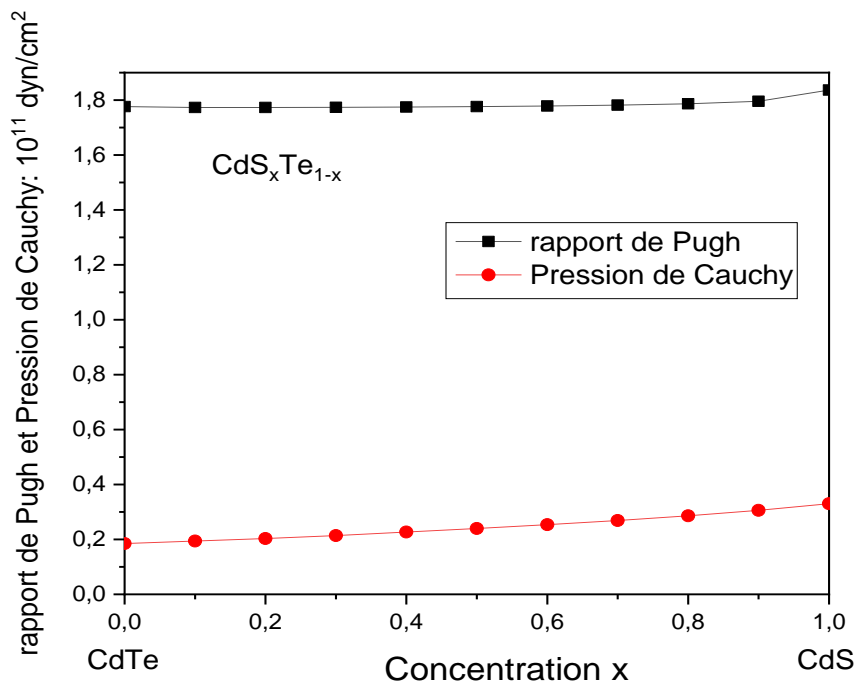


Figure (3.20) : Modules élastiques (rapport de Pugh et pression de Cauchy) fonction de la concentration x de l’alliage ternaire CdS_xTe_{x-1} avec désordre

3.5.2.6 Coefficient de Poisson

Le coefficient de Poisson peut caractériser le retrait d'un matériau perpendiculairement à la direction de la force appliquée.

il est représenté par la relation suivante [17] :

$$\sigma_0 = \frac{C_{12}}{C_{12} + C_{11}} \quad (3-29)$$

La figure (3.21) montre la variation du Coefficient de poisson (σ_0) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} . Il faut noter que lorsque la concentration augmente de (x=0 à x=1), le coefficient de poisson augmente d'une façon monotone et linéaire.

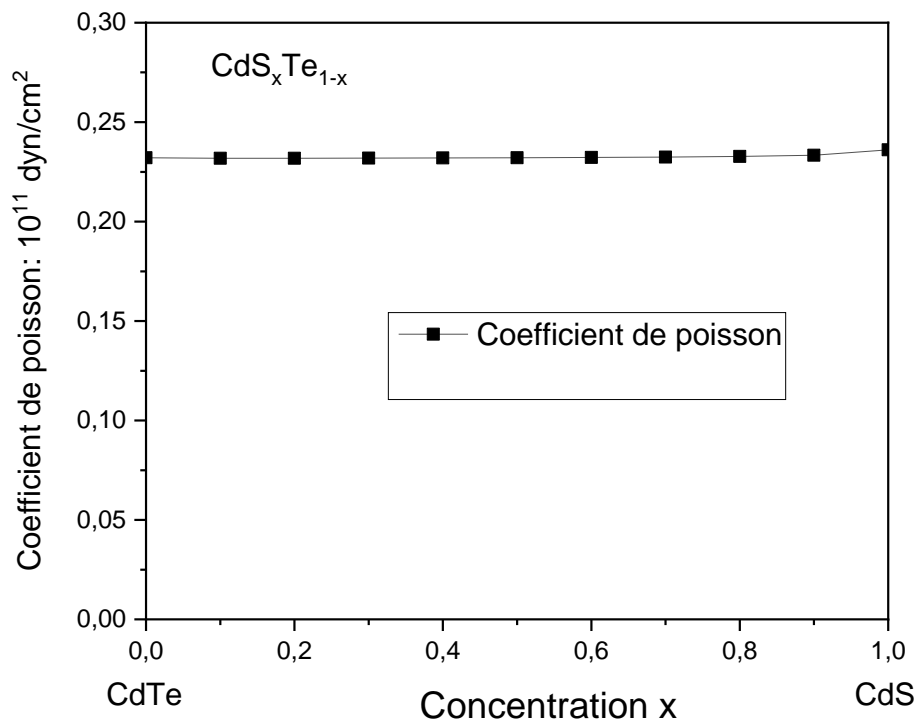


Figure (3.21) : Variation du coefficient de Poisson en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec désordre

Le coefficient de poisson a été utilisé par Farnstevich et al. [18], pour faire la distinction entre la ductilité et la fragilité des matériaux. La règle de farnstevich est : Si la valeur de est inférieure à 0.33, le matériau d'intérêt est considéré se comporter de manière fragile.

Si la valeur est supérieure à 0.33, le matériau d'intérêt est considéré se comporter de manière ductile, dans nos calculs on a trouve ; $0.30 < 0.33$.

Donc on peut conclure que les composés semi-conducteurs CdS et CdTe ainsi que les alliages d'intérêt se comportent de manière fragile. L'interpolation quadratique de nos données concernant σ_0 donne la relation suivante: avec désordre

$$\sigma_0 = 0.30271 - 0.0081x + 0.01276x^2 \quad (3-30)$$

Tableau (3.6) : Coefficient de poisson pour les composés semi-conducteur CdS et CdTe comparé à des données théoriques.

Composé	Coefficient de Poisson σ_0
CdS	0.309 ^a
CdTe	0.301 ^a 0.41 ^b

^a Nos calcul

^b Ref. [4]

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés électroniques (structure de bandes et gaps énergétiques, les constantes élastiques (C_{11}, C_{21}, C_{44}), les paramètres mécaniques (module de compressibilité (B_S), module de cisaillement (C'), module de Young (Y_0), rapport de Pugh, pression de Cauchy et coefficient de Poisson (σ_0), des alliages semi-conducteurs CdS_xTe_{1-x} , avec l'utilisation de la méthode empirique des pseudo potentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la composition x avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nos résultats de toutes les propriétés étudiées de l'alliage sont donc des prédictions.

Références bibliographiques du chapitre 3

- [1] S.Adachi, « Properties of Groups IV, III-V, and II-VI Semiconductors », Wiley, Chichester,(2005).
- [2] Mezrag, F., Bouarissa, N., & Fares, NEH (2020). La courbure de la bande interdite des alliages S_xTe_{x-1} au-delà de l'approximation du cristal virtuel. Recherche sur les matériaux émergents , 9 (4), 1056-1059.
- [3] P.Baranski, V. Klotchkov, I. Potykevich, Electronique des semi-conducteurs, Moscou, (1978).
- [4] N. Bouarissa, Microhardness and mechanical stability, (2019).
- [5] H.Algarni.N.Bouarissa,M.Ajmal khan,O.A Al-Hagan.,T.F .Alhuwayme,(2019).
- [6] Mezrag, F., Bouarissa, N., & Fares, NEH (2020). La courbure de la bande interdite des alliages CdS_xTe_{1-x} au-delà de l'approximation du cristal virtuel. Recherche sur les matériaux émergents , 9 (4), 1056-1059.
- [7] : S Aouadi ; thèse doctorat ; Université de Annaba ; calcul ab initio des Propriétés Structurales, Élastiques, Électroniques, Optiques et dynamiques des semi-conducteurs III-V à base de phosphore ; (2009).
- [8] N. Bouarissa, Master. Che.Phys. 100 (2006) 41.
- [9] J. M. Baranowski, J. Pys. C 17 (1984) 6287.
- [10] H.Algarni.N.Bouarissa,M.Ajmal khan,O.A Al-Hagan.,T.F .Alhuwayme,(2018)
- [11] M. Zafar, M. Shakil, Shabbir Ahmed, Muhammad Raza-ur-rehman Hashmi, M.A. Choudhary, Naeem-ur-Rehman, (2017).
- [12] S. Saib, S. Benyettou, N. Bouarissa,(2015)
- [13] N. Bouarissa, Microhardness and mechanical stability, (2019).
- [14] N. Bouarissa, S. Saib, (2013).
- [15] Liu Y, HuWC, Li DJ et al. (2012) First-principles investigation of structural and electronic properties of $MgCu_2$ Laves phase under pressure. Intermetallics 31: 257–263.
- [16] Pettifor DG (1992) Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics. Materials Science and Technology 8(4):345–349.
- [17] N. Bouarissa, S. Saib, M .Boucenna, F. Mezrag, (2018).
- [18] I.N. Frantsevich, F.F. Voronov, S.A. Bocuta, in:I.N. Frantsevich(Ed), Elastic constantsand Elastic Moduli of Metals and Insulators Handbook, Naukova Dumka, Kiev, 1938, pp. 60-180

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce travail a été réalisé dans le cadre de l'étude des propriétés électroniques, élastiques et des paramètres mécaniques des alliages semiconducteurs CdS_xTe_{1-x} dans la phase zinc-blende. La méthode de pseudopotential empirique local (EPM) dans ce travail avec l'approximation de cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Nos résultats ont montré que pour les alliages semiconducteurs ternaires CdS_xTe_{1-x} tous les gaps d'énergie direct (E_F^D) et indirects (E_F^I) et (E_F^L) étudiés varient de façon non monotone et non linéaire avec la composition x allant de 0 à 1. Les alliages en question ainsi que les composés parents sont tous à gap direct. Nos résultats des gaps d'énergie des alliages CdS_xTe_{1-x} sont des prédictions et que le désordre a un effet considérable sur les propriétés électroniques étudiées.

Nous avons calculé aussi les propriétés élastique à savoir les constantes élastiques (C_{11}, C_{12} et C_{44}), les paramètres mécaniques: Module de compressibilité (B_s), module de cisaillement (C') module de Young (Y_0), rapport de Pugh, pression de Cauchy) et enfin le coefficient de Poisson (σ_0), des alliages ternaires semiconducteurs CdS_xTe_{1-x} , cette fois ci l'effet du désordre sur ces propriétés élastiques est très important.

La comparaison de nos résultats concernant les composés parents CdS et CdTe avec les résultats théoriques et expérimentaux montre, en générale, un bon accord, ce qui confirme la fiabilité de notre méthode utilisée. Nos résultats pour les alliages CdS_xTe_{1-x} sont donc des prédictions.

Liste des figures

N°	Titre	Page
Figure 1.1	Silicium dopé au Phosphore. a) $k=0k$ et b) $k \neq 0k$	7
Figure 1.2	Silicium dopé au Bore. a) $k = 0k$ et b) $k \neq 0k$	8
Figure 1.3	Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs	9
Figure 1.4	Semi-conducteur a gap direct et indirect	9
Figure 1.5	Structure de Bande d'un semi-conducteur à gap directe	11
Figure 2.1	Structure cristalline Diamant et Zinc Blende	22
Figure 2.2	Réseau triclinique primitif d	22
Figure 2.3	Composantes normales et tangentielles d'un tenseur de contraintes.	24
Figure 2.4	Positions des axes de coordonnées : (a) état initial, (b) état déformé	25
Figure 2.5	Illustration de la contraction d'un matériau	29
Figure 2.6	Un essai de cisaillement	30
Figure. 3.1	La structure de bandes électronique pour $x=0$	37
Figure. 3.2	La structure de bandes électronique pour $x=1$	38

Figure. 3.3	Structure de bandes électroniques pour $x=0.6$ avec et sans désordre	38
Figure. 3.4	La variation du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire	40
Figure. 3.5	La variation du gap indirect (E_{Γ}^X) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire	41
Figure. 3.6	La variation du gap indirect (E_{Γ}^L) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire	42
Figure. 3.7	La variation du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) et des gaps indirects (E_{Γ}^X) et (E_{Γ}^L) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec désordre	43
Figure. 3.8	La variation du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) et des gaps indirects (E_{Γ}^X) et (E_{Γ}^L) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} sans désordre	44
Figure. 3.9	La variation du constant élastique C_{11} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	46
Figure.3.10	La variation de la constante élastique C_{12} et en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	47
Figure.3.11	La variation de la constante élastique C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	48
Figure.3.12	La variation de la constante élastique C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{x-1} avec désordre	48

Figure.3.13	Constantes élastiques de en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} sans désordre	49
Figure.3.14	Variation de module de compressibilité en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	50
Figure.3.15	Variation du module de cisaillement en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	51
Figure.3.16	Variation du module de Young en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	52
Figure.3.17	Variation du module de Young module de cisaillement et module de compressibilité en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	53
Figure.3.18	Variation du Rapport de Pugh en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	55
Figure.3.19	Variation du Pression de Cauchy en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	56
Figure.3.20	Variation du (rapport de Pugh et Pression de Cauchy) fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	56
Figure.3.21	Variation du coefficient de poisson en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	57

Liste des tableaux

N°	Titre	Page
Tableau. 1.1	Extrait de la classification périodique des éléments	5
Tableau 1.2	Propriétés des principaux composés de semi-conducteurs III-V à 300 K.	5
Tableau 1.3	Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-VI	6
Tableau 2.1	Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-VI	23
Tableau 2.2	Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V	23
Tableau. 3.1	Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs CdS et CdTe dans la phase zinc blende ainsi que les constantes du réseau a en (u.a).	36
Tableau. 3.2	Gaps énergétiques des composés zinc-blende CdS et CdTe	36
Tableau. 3.3	Les variations des gaps énergétique de l'alliage CdS_xTe_{1-x}	39
Tableau. 3.4	Constantes élastiques de CdS et CdTe dans la phase zinc-blende a concentration x	45
Tableau. 3.5	Module de compressibilité B_s .module de cisaillement (C'), module de young (Y_0) de zinc-blende pour les composés semi-conducteurs CdS et CdTe .	54

Tableau. 3.6	Coefficient de poisson pour les composés semi-conducteur CdS et CdTe comparé à des données théoriques.	58
--------------	--	----

)VCA(

)

(

)0-1(

 CdS_xTe_{1-x}

x

Résumé

L'approche pseudo-potential empirique avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) ont été utilisés pour l'étude des propriétés électroniques (structure de bande et gap énergétique), les constantes élastiques et les paramètres mécaniques des alliages semiconducteurs CdS_xTe_{1-x} dans la structure zinc blende et dans la plage de concentration (0–1) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Ces alliages ont un intérêt important pour la conception des dispositifs optoélectroniques. Nos résultats ont montré que toutes les propriétés d'intérêts varient avec la concentration x et que le désordre compositionnel a un effet sur toutes les propriétés étudiées. Cela va nous permettre d'avoir des nouveaux matériaux avec de nouvelles propriétés désirées.

Abstract

The empirical pseudo-potential approach with virtual crystal approximation (VCA) have been used for the study of electronic properties (band structure and energy gap), elastic constants and mechanical parameters of CdS_xTe_{1-x} semiconductor alloys in the zinc blende structure and in the concentration range (0–1) with and without taking into account the effect of compositional disorder. These alloys are of significant interest for the design of optoelectronic devices. Our results showed that all the properties of interest vary with the concentration x and that the compositional disorder has an effect on all the properties studied. This will allow us to have new materials with new desired properties.