



N° d'ordre :



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université de M'sila
Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de:

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Sciences des Matériaux**

Par

Djihad Zouaoui

THEME

**Etude des propriétés optiques et diélectriques des composés
binaires GaAs, InAs et leurs alliages ternaires $Ga_xIn_{1-x}As$**

Soutenu le : 19/06/2014

Devant le jury composé de:

Z.Charifi	Prof Univ. de M'sila	Président
M.Boucenna	MCA Univ. de M'sila	Rapporteur
H.Baaziz	Prof Univ. de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2014

Remerciements

*Avant tout, je remercie **ALLAH** le tout puissant de m'avoir donné la force, la volonté et le courage pour réussir un tel travail.*

*Je voudrais exprimer ici mes sincères remerciements et tout mon respect à ma professeur encadrant **Boucenna Mustapha** pour son soutien, ses précieux conseils, sa patience et sa compréhension. Qu' il accepte le fruit de mon effort comme expression de ma profonde gratitude.*

*Aussi, j'adresse mes remerciements les plus chaleureux à Mme **Charifi zoulikha** professeur à l'université de M'sila qui m'a honorée en acceptant d'être président de ce jury.*

*Je remercie aussi très vivement M. **Baaziz Hakim** professeur à l'université de M'sila, pour avoir accepté d'examiner mon travail, afin de l'enrichir de leurs précieux conseils.*

La compréhension et les encouragements constants de ma famille m'ont également soutenu et rassuré durant toutes ces années, si j'ai réalisé une telle étude, je le dois à chaque membre de ma famille.

Je teins à remercier particulièrement toutes personnes qui, de près ou de loin m'ont aidé à l'accomplissement de ce travail.



Table des matières

TABLE DES MATIERES

Table des matières	i
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	ix
Introduction générale	x

Chapitre I

Les matériaux semi-conducteurs III-V et méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs

I-1 Introduction	1
I-2 Définition des semi-conducteurs.....	1
I-3 Semi-conducteurs III/V.....	2
I-4 Les composés binaires, ternaires des S/C III-V.....	3
I-4-1 Les composés binaires.....	3
I-4-2 Les composés ternaires.....	3
I-5 Propriétés des matériaux S/C III-V.....	4
I-5-1 Propriétés cristallines	4
I-5-2 Propriétés électroniques	5
I-6 Zone de Brillouin.....	5
I-7 La première zone de Brillouin.....	5
I-7-1 Les point de haute symétrie.....	6
I-7-2 Les lignes de haute symétrie.....	7

I-8 Bande d'énergie	7
I-8-1 Nature de gap d'énergie	8
I-9 Méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs.....	9
I-9-1 Les approximations de base. L'hamiltonien total du cristal.....	9
I-9-2 L'approximation adiabatique.....	10
I-9-3 L'approximation de Hartree-Fock.....	11
I-9-4 Les méthodes de calcul de la structure de bande.....	11
I-9-4-1 La méthode de liaisons fortes.....	11
I-9-4-2 La méthode cellulaire.....	12
I-9-4-3 La méthode des ondes planes augmentée (A.P.W).....	12
I-9-4-4 La méthode des ondes planes orthogonalisés (O.P.W).....	12
I-9-5 L'approximation du pseudopotentiel.....	13
I-9-5-1 La méthode empirique des pseudopotentiels (E.PM).....	14

Chapitre II

Etude des propriétés optiques et diélectriques des alliages ternaires semi-conducteurs

II -1 Introduction	15
II-2 Propriétés Optiques.....	15
II-2-1 Absorption fondamentale.....	15
II-2-2 Emission spontanée.....	15

II-2-3 Emission stimulée.....	16
II-3 Interaction rayonnement matière.....	16
II-3-1 Photons et électrons.....	16
II-3-2 La réflexion des ondes planes.....	17
II-4 Indice de refraction.....	19
II-5 Interaction électron-photon.....	19
II-5-1-a Absorption.....	20
II-5-1-b Émission spontanée et émission stimulée.....	20
II- 6 Calcul de l'indice de réfraction.....	22
II-7 Propriétés diélectriques.....	23
II-7-1 Quelques milieux diélectriques solides usuels.....	23
II-7-2 Création d'une polarisation.....	24
II-7-3 Susceptibilité électrique.....	25
II-7-4 Calcul de la susceptibilité électrique.....	25
II-7-5 Constante diélectrique.....	26
II-7-5-1 Définition.....	26
II-7-5-2 Interprétation physique.....	27
II-8 La constante diélectrique statique ϵ_0 et de hautes fréquences ϵ_∞	27
II-8-1 calcul de la constante diélectrique statique $\epsilon_0(\omega)$	28

Chapitre III :
Résultats et discussions

III-1 Introduction.....	30
III-2 Structure de bande de GaAs	30
III-2-1 Le composé GaAs.....	30
III-2-2 1 Le composé InAs.....	31
III-2-3 Structure de bande des alliages ternaires $Ga_xIn_{1-x}As$	33
III-3 Variation du gap de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la composition.....	39
III-4 Indice de réfraction.....	40
III-4-1 Indices de réfraction des composés GaAs et InAs.....	41
III-4-2 Indices de réfraction des l'alliages ternaires $Ga_xIn_{1-x}As$	41
III-5 Constante diélectrique de haute fréquence.....	48
III-6 Constante diélectrique statique.....	52
Conclusion générale.....	56

Bibliographie.

LISTE DES FIGURES

Figure I-1 : Schéma illustrant la situation décrite.....	2
Figure I-2 : La structure de zinc blende	4
Figure I-3 : a) Un réseau de bravais bidimensionnel,b)Un réseau de bravais tridimensionnel	6
Figure I-4 : Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries.....	7
Figure I-5 : diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.....	8
Figure I-6 : Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b).....	9
Figure II-1 : Schéma de niveaux.....	20
Figure II-2 : absorption , émission spontanée, émission stimulée.....	21
Figure II-3 : Illustration de la polarisation d'un diélectrique.....	24
Figure III-1 : Structure de bande du composé GaAs.....	32
Figure III-2 : Structure de bande du composé InAs.....	32
Figure III-3 :Structure de bande du composé $Ga_{0.1}In_{0.9}As$	34
Figure III-4 :Structure de bande du composé $Ga_{0.2}In_{0.8}As$	34
Figure III-5 :Structure de bande du composé $Ga_{0.3}In_{0.7}As$	35
Figure III-6 :Structure de bande du composé $Ga_{0.4}In_{0.6}As$	35
Figure III-7 :Structure de bande du composé $Ga_{0.5}In_{0.5}As$	36
Figure III-8 : Structure de bande du composé $Ga_{0.6}In_{0.4}As$	36
Figure III-9 : Structure de bande du composé $Ga_{0.7}In_{0.3}As$	37
Figure III-10 : Structure de bande du composé $Ga_{0.8}In_{0.2}As$	37

Figure III-11 : Structure de bande du composé $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$38

Figure III-12 : La variation du gap d'énergie E_g en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$39

Calcul a partir de la theorie des alliages (loi de vegard)

Figure III-13: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (modèle atomique).....43

Figure III-14: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (modèle Ravindra).....43

Figure III-15: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (modèle Hervé et Vandamme).....44

Figure III-16 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (La relation de Reddy et Anjaneyulu).....44

Figure III-17 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (La relation de Ravindra).....45

Calcul direct a partir de la valeur de l'énergie du gap du composé ternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$

Figure III-18: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (modèle atomique).....45

Figure III-19: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (modèle Ravindra).....46

Figure III-20: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (modèle Hervé et Vandamme).....46

Figure III-21 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (La relation de Reddy et Anjaneyulu).....47

Figure III-22: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x (La relation de Ravindra).....47

Figure III-23 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x (modèle atomique).....49

Figure III-24 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x (modèle Ravindra).....	49
Figure III-25 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x (modèle Hervé et Vandamme)	50
Figure III-26 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x (La relation de Reddy et Anjaneyulu).....	50
Figure III-27 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x (La relation de Ravindra).....	51
Figure III-28 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x (modèle atomique).....	53
Figure III-29 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x (modèle Ravindra).....	53
Figure III-30 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x (modèle Hervé et Vandamme).....	54
Figure III-31 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x(La relation de Reddy et Anjaneyulu).....	54
Figure III-32 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x(La relation de Ravindra)	55

LISTE DES TABLEAUX

Tableau I-1 : Largeur de la bande interdite. i correspond à un "gap" indirect et d à un "gap" direct [4].....	1
Tableau I-2 : Extrait de la classification périodique des éléments.....	2
Tableau I-3 : Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K [7,8].....	3
Tableau III-1 : Facteurs de formes (R_y) du GaAs et InAs avec la constante de maille $a(\text{Å})$	33
Tableau III-2 : Indice de réfraction n de GaAs et InAs.....	41



Introduction générale

Introduction générale

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-conducteurs.

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques [1]. Le développement de nouvelles technologies pour les applications de télécommunications, de radionavigations et radars sont aujourd'hui d'un intérêt stratégique et commercial majeur. Plusieurs défis sont actuellement à relever dans ces domaines, le développement de réseaux hauts débits pour la numérisation des réseaux terrestres, télévision et radio à grande échelle, la mise au point de systèmes de radiocommunication mobiles, le développement de systèmes électroniques à hautes fréquences embarqués dans le secteur automobile ou encore les systèmes radars modernes. Ces marchés offrent aujourd'hui des perspectives commerciales importantes. Le développement de nouvelles filières de composants prend un formidable essor dans ces nouvelles technologies, la demande et la production de circuits intégrés à base de transistors à effet de champ par exemple est très élevée. La plus grande partie des composants sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique ont atteint des niveaux inégalés. En électronique rapide et en optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Dans de telles applications, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

Les semi-conducteurs III-V sont presque tous à gap direct. L'arséniure de gallium GaAs est le représentant le plus connu, de gap 1.42 eV. InAs en est un autre, de gap 0.36 eV. Leur grande force réside dans le nombre quasi illimité d'alliages possibles entre Ga, As, Al, In, et

P. Cette particularité essentielle a donné aux semi-conducteurs III-V la première place pour l'optoélectronique et notamment pour les lasers à semi-conducteurs .

Le travail présenté porte sur l'étude des propriétés électroniques, optique et diélectrique des composés semi-conducteurs $Ga_xIn_{1-x}As$. Notre étude utilise la méthode du pseudopotentiel empirique local couplée avec l'approximation du cristal virtuel VCA.

Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électronique, diélectrique et optique des solides. [2-3].

Pour pouvoir expliquer les propriétés du composé $Ga_xIn_{1-x}As$ nous avons, après avoir résolu l'équation de Schrödinger, déterminé les énergies et les fonctions d'ondes.

Les valeurs des énergies ont été utilisées pour la détermination de la structure de bandes des composés semi-conducteurs ainsi que les propriétés diélectrique et optique.

Ce mémoire comprend trois chapitres, après une introduction générale ,le premier chapitre nous allons aborder les matériaux semi-conducteurs III-V.

Le deuxième chapitre englobe un rappel des principales propriétés optiques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs.

Nous présentons dans le troisième et dernier chapitre les résultats obtenus dans notre étude.

Enfin, notre travail est achevé par une conclusion générale.

Chapitre :I

Les matériaux semi-conducteurs III-V et méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs.

I-1 Introduction :

Les semi-conducteurs ont fait depuis ces dernières décennies l'objet de très importantes recherches à cause des intérêts propres qu'ils représentent et surtout à cause des applications de plus en plus nombreuses dans lesquelles ils sont utilisés.

Les semi-conducteurs sont des isolants dont la bande interdite est suffisamment faible pour que l'excitation thermique permette à un nombre d'électrons de peupler la bande de conduction.

Le progrès qui a été réalisé en physique des semi-conducteurs dépend principalement des matériaux semi-conducteur III-V.

I-2 Définition des semi-conducteurs:

Un semi-conducteur est intermédiaire entre un métal et 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 (figure I-1-C) 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 1.52eV pour l' GaAs.

Les semi-conducteurs simples proviennent de la colonne IV du tableau périodique, Si, Ge étant les deux éléments les plus importants. Le carbone, sous forme diamant, est un isolant. Une classe importante de semi-conducteurs sont les composés formés d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V, les III-V, le plus important du point de vue technologique.

Cristal	Gap	E_g , eV		Cristal	Gap	E_g , eV	
		0 K	300 K			0 K	300 K
Diamant	i	5.4		HgTe ^{a)}	d	-0.30	
Si	i	1.17	1.11	PbS	d	0.286	0.34-0.37
Ge	i	0.744	0.66	PbSe	i	0.165	0.27
α Sn	d	0.00	0.00	PbTe	i	0.190	0.29
InSb	d	0.23	0.17	CdS	d	2.582	2.42
InAs	d	0.43	0.36	CdSe	d	1.840	1.74
InP	d	1.42	1.27	CdTe	d	1.607	1.44
GaP	i	2.32	2.25	ZnO		3.436	3.2
GaAs	d	1.52	1.43	ZnS		3.91	3.6
GaSb	d	0.81	0.68	SnTe	d	0.03	0.18
AlSb	i	1.65	1.6	ACl		—	3.2
SiC(hex)	i	3.0	—	AgI		—	2.8
Te	d	0.33	—	Cu ₂ O	d	2.172	—
ZnSb		0.56	0.56	TiO ₂		3.03	—

Tableau I-1 : Largeur de la bande interdite. i correspond à un "gap" indirect et d à un "gap" direct [4].

Chapitre I : Les matériaux semi-conducteurs III-V et méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs

À $T = 0K$, la bande permise occupée la plus haute est complètement remplie : c'est la bande de valence. La bande permise 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 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 semi-conducteur, 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.

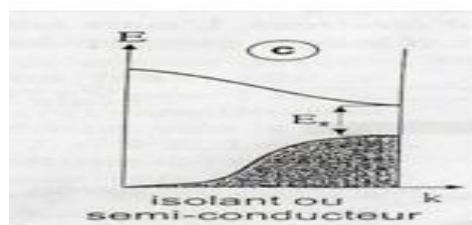


Figure (I-1) : Schéma illustrant la situation décrite

I-3 Semi-conducteurs III-V:

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V de la classification périodique de Mendeleïev.

Le tableau I.2 regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique), ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

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

Tableau I-2 : Extrait de la classification périodique des éléments.

Les atomes III-V ne possèdent que III électrons de valence sur leurs dernières orbitales s et p (ex :Ga de structure électronique $[Ar] 3d^{10} 4s^2 p^1$) contre V sur les orbitales s et p (ex :As de structure électronique $[Ar] 3d^{10} 4s^2 p^2$). La liaison III-V résulte donc de l'hybridation sp^3 des orbitales atomiques (liaison covalente) [5].

I-4 Les composés binaires et ternaires des S/C III/V :

I-4-1 Les composés binaires :

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés de bande interdite large et indirecte, ainsi que la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [6], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [4]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thalium ou le bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I-3) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Composé III-V	Eg (ev)	m^*/m_0	μ (cm ² /VS)	a (Å)
BN	7.5			3.6150
AlP	2.45			5.4510
AlAs	2.16			5.6605
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
BP	2.0			4.5380
GaN	3.36	0.19	380	3.189
GaP	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Tableau I-3 : Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K [7,8]

I-4-2 Les composés ternaires:

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

Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit, $A_xA'_{(1-x)}B$ Exemple : $Ga_xIn_{(1-x)}As$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInAs.

I-5 Propriétés des matériaux S/C III-V :

I-5-1 Propriétés cristallines :

Les matériaux semi-conducteurs sont exclusivement des solides cristallins. Leurs propriétés électroniques, optiques, mécaniques et thermiques sont donc liées à la géométrie particulière qui représente l'arrangement des atomes au sein du matériau : le réseau cristallin.

Les semi-conducteurs III-V tels que GaAs (arséniure de gallium), AlAs, AlSb, etc... ont une structure cristallographique de type zinc blend. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (Si, Ge, etc...), est constituée de deux sous-réseaux cubique à faces centrées, l'un d'éléments III, l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale (voir la figure I-2(a), l'atome en rouge représente un élément III par exemple, l'atome en jaune représente un élément V.). La maille élémentaire comporte deux atomes, le premier (Ga) à l'origine et l'autre (As) à $(\mathbf{a}/4, \mathbf{a}/4, \mathbf{a}/4)$, où \mathbf{a} représente le paramètre de maille du matériau.

Du fait que les deux sous-réseaux cubiques à faces centrées sont décalés, le cristal n'est pas centrosymétrique. Il en découle des propriétés physiques différentes suivant les directions cristallographiques considérées.

De ce fait, les liaisons atomiques dans les matériaux III-V ne sont pas simplement covalentes comme dans le cas du silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V (As) sur ceux du groupe III (Ga). Dans un cristal composé de l'arséniure de gallium, chaque atome d'arséniure est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'arséniure. Il se produit alors un échange d'électrons, le cristal se construit avec les ions Ga^+ et As^- , qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons (semi-conducteurs polaires) qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier. Cette propriété est en particulier responsable de l'anisotropie optique dans les hétérostructures semi-conductrices III-V qui a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisin [9,10]

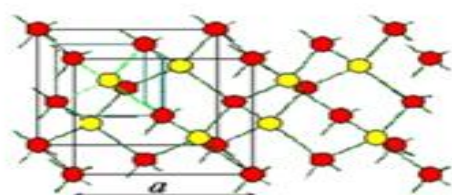


Figure I-2 : La structure de zinc blende .

Le réseau réciproque du réseau de Bravais correspondant à la structure zinc blende est un réseau cubique centré. La première zone de Brillouin du réseau réciproque a la forme octaèdre tronqué par les six faces d'un cube. Elle présente un centre de symétrie à l'origine noté Γ et les axes de symétrie Δ , λ , et Σ . Les points de croisement de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin sont les points de haute symétrie, et ils jouent un rôle primordial dans la structure de bande.

I-5-2 Propriétés électroniques :

Les matériaux de 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 de gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As, et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type **sp³**: 4 orbitales liantes et 4 orbitales antiliantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence. Cette bande est pleinement occupée par des électrons à $T = 0K$, pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antiliantes donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur E_g (band gap en anglais). Pour les semi-conducteurs à gap direct, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point Γ [1].

I-6 La zone de Brillouin :

Les zones de Brillouin d'ordre supérieur sont simplement des régions limitées par les plans de Bragg, définis comme suit :

La première zone de Brillouin est l'ensemble des points de l'espace de K qui peuvent être atteints à partir de la première zone en traversant un seul plan de Bragg.

La $(n + 1)^e$ zone Brillouin est l'ensemble des points qui ne sont pas dans la $(n - 1)^e$ zone et qui peuvent être atteints à partir de la n^e zone en traversant un seul plan de Bragg.

Autrement dit, la n^{ieme} zone de Brillouin peut être définie comme étant l'ensemble des points pouvant être atteints à partir de l'origine en traversant $n-1$ plans de Bragg, mais pas moins.

I-7 La première zone de Brillouin :

La maille primitive de Wigner-Seitz du réseau réciproque est appelée Première zone de Brillouin. Comme le suggère le nom, on définit des zones de Brillouin d'ordre plus élevé,

constituant des mailles primitives d'un type différent et qui apparaissent dans la théorie des niveaux électroniques dans un potentiel périodique.

Bien que les termes de « maille de Wigner-Seitz » et de « première zone de Brillouin » se réfèrent à des constructions géométriques identiques. En pratique, le dernier terme n'est appliqué qu'à la maille de l'espace des k .

En particulier, lorsqu'on fait référence à la première zone de Brillouin d'un réseau de Bravais particulier de l'espace réel (associé à une structure cristalline particulière), il faut toujours comprendre la maille de Wigner-Seitz du réseau réciproque associé. Ainsi, puisque le réseau réciproque du réseau cubique centré et cubique à faces centrées, la première zone de Brillouin du réseau CC (figure I-3-a) est simplement la maille de Wigner-Seitz CFC, Inversement, la première zone de Brillouin du réseau CFC (figure I-3-b) est simplement la maille de Wigner-Seitz CC. la première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende d'un tronqué (figure I-4).

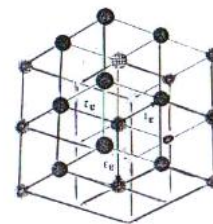
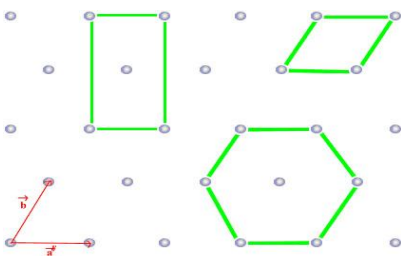


Figure I-3 : a) Un réseau de Bravais bidimensionnel

Figure I-3 : b) Un réseau de Bravais tridimensionnel

I-7-1 Les points de haute symétrie :

Γ : ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $k_{\Gamma} (0,0,0)$.

X : ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'un des axes

k_x, k_y ou k_z avec l'une des faces carrées. Nous avons donc :

$$k_x = \frac{2\pi}{a} (\pm 1, 0, 0)$$

$$k_y = \frac{2\pi}{a} (0, \pm 1, 0)$$

$$k_z = \frac{2\pi}{a} (0, 0, \pm 1)$$

L : ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont les coordonnées sont :

$$k_L = \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1)$$

W : ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées Les coordonnées sont :

$$k_W = \frac{2\pi}{a} (0, \frac{1}{2}, 1)$$

Z : ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre avec les coordonnées :

$$k_Z = \frac{2\pi}{a} (1, \frac{1}{2}, 1)$$

I-7-2 Les lignes de haute symétrie :

Δ : cette ligne représente la direction $\langle 100 \rangle$. Elle relie le centre Γ au point X

Σ : c'est un point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$.

Λ : cette ligne est la direction $\langle 100 \rangle$ Elle relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre [11] .

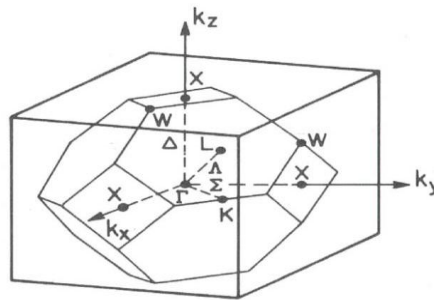


Figure I-4 : Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries.

I-8 Bande d'énergie :

Les électrons d'un atome isolé ont des niveaux d'énergie permis bien définis, mais son comportement dans un réseau cristallin périodique est totalement différent. Si la distance entre les atomes voisins génère une sorte d'interférence entre les niveaux permis d'atome, cela entraîne une multitude quasi continu d'états autour de chaque niveau permis de l'atome individuel, cet ensemble d'états, très proche entre eux, est plutôt considéré alors comme une bande d'énergie permise, avec une densité d'états associée. Les niveaux d'énergie des électrons de valence et le niveau d'énergie d'ionisation génèrent ainsi deux bandes d'énergies permises particulièrement intéressantes. La bande de valence et la bande de conduction, séparées par une bande dépourvue de niveau permis, nommé bande interdite (figure I-5) la particularité de ces bandes permises de conduction tient au fait que les électrons peuvent circuler librement dans toute la maille cristalline et ainsi génère des courant de conduction électrique [12] .

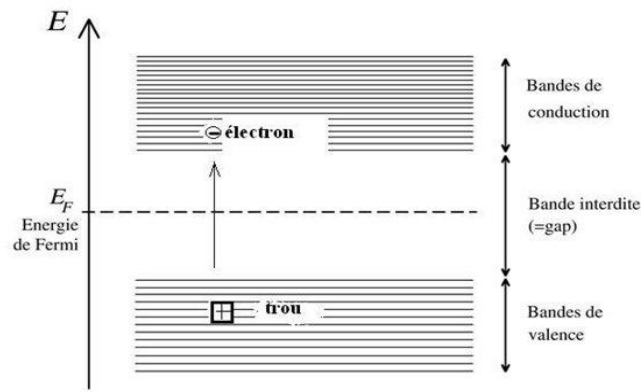


Figure I-5 : diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.

I-8-1 Nature de gap d'énergie :

Pour un cristal semi-conducteur tridimensionnel, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde \vec{k} . Si, dans l'espace réciproque, ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} (cas de InAs, GaAs), on dit que le semi-conducteur est à gap direct. Pour un autre cristaux, le silicium en particulier, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{k} différentes et le semi-conducteur est dit à gap indirect.

La nature du gap est importante pour les applications optroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons. En effet, lors de la transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction donc avec création d'un trou dans la bande de valence et d'un électron dans la bande de conduction ou lors de la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence, il faut conserver l'énergie et l'impulsion. Lorsqu'un semi-conducteur est à gap direct, la transition d'un électron de la bande valence vers la bande de conduction se fait à quantité de mouvement $\hbar\vec{k}$ constante puisque l'impulsion d'un photon est négligeable devant celle de l'électron. La conservation de l'impulsion est donc automatiquement assurée. Cette transition s'observe, par exemple, lorsque le semi-conducteur absorbe un photon de longueur d'onde $\lambda(nm) = 1.24/E_g$. De même, un électron de la bande de conduction peut facilement se recombiner avec un trou en émettant un photon d'énergie λ ; c'est ce que l'on appelle une transition radiative. Ce phénomène est utilisé dans les diodes électroluminescentes et les diode laser. Le mécanisme de transition directe est schématisé dans la partie gauche de la figure I-5.

Pour un semi-conducteur à gap indirect, comme le silicium, les choses sont plus complexes. Pour qu'un électron de conduction, d'impulsion $\hbar\vec{k}$, se recombine avec un trou d'impulsion nulle de la bande de valence, il faut, pour conserver l'impulsion, faire intervenir les phonons du réseau (l'énergie du phonon crée est typiquement de l'ordre de 0.01 à 0.03eV).Un phonon participe au

processus de recombinaison pour assurer la conservation de l'impulsion (grâce à l'impulsion du réseau cristallin). Ce rend la combinaison radiative beaucoup moins probable que dans le cas des semi-conducteurs à gap direct. Par conséquent, le silicium, tout comme le germanium qui est aussi un semi-conducteur à gap indirect, est un très mauvais émetteur de lumière. Tout ce s'applique aussi à l'excitation d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction. Ainsi, dans le cas d'un gap indirect, on ne peut exciter optiquement le semi-conducteur, à $T = 0K^{\circ}$, que s'il intervient un phonon de vecteur d'onde \vec{k} .

Le mécanisme de transition indirecte a donc une faible probabilité de se produire que le processus direct, car il met en jeu 3 particules (l'électron, le photon, et le phonon) au lieu de deux (l'électron et le photon). Ceci explique en particulier pourquoi l' GaAs est un bon matériau pour les applications optoélectroniques (i.e. mettant en jeu des photon et des électrons) alors que le silicium est moins bon. Lorsque la température augmente, depuis $0K^{\circ}$, le nombre d phonons augmente fortement et la probabilité d'excitation optique croit aussi .

Il ya deux types de gap d'énergie :

- **Le gap direct :** le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés au même point de l'espace k.
- **Le gap indirect :** le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace k.

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique et par suit fontionnement de composants optoélectronique .

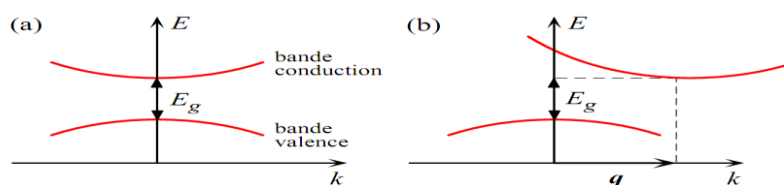


Figure I-6 : Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b).

I-9 Méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs :

I-9-1 Les approximations de base. L'hamiltonien total du cristal:

Un cristal est constitué d'un très grand nombre de particules en interaction les électrons et les noyaux atomiques, de sorte que le calcul des états d'énergie du système passe nécessairement par un certain nombre d'hypothèses simplificatrices.

L'hamiltonien total d'un cristal s'écrit :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn}$$

Où T_e et T_n représentent les énergies symétrique des électrons et des noyaux et V_{ee} , V_{en} et V_{nn} les énergies d'interaction électron-électron, électron-noyau et noyau-noyau respectivement.

La première approximation consiste à limiter les interactions entre particules au terme le plus important que constitue l'interaction coulombienne. L'hamiltonien du système s'écrit alors [7].

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_j^2 + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,j} \frac{Z_i e^2}{|R_i - r_i|} + \sum_{i < j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|} \quad (I - 1)$$

Où les indices i, j et I, J se rapportent respectivement aux électrons et aux noyaux, et Z représente la charge nucléaire. Les états d'énergie et les fonctions d'onde du système sont donnés par les solutions de l'équation de Schrödinger :

$$H \Psi (R, r) = E \Psi (R, r) \quad (I - 2)$$

Où R représente les coordonnées des noyaux et r celle des électrons. Mais avec les connaissances mathématiques actuelles, la solution générale exacte de l'équation (I-1) est impossible, même les solutions numériques sont des solutions approchées et non exactes.

Dans la plupart des cas on introduit d'autres approximations.

1-9-2 L'approximation adiabatique :

Les électrons et les noyaux atomiques ont des masses très différentes de sorte que l'on peut utiliser l'approximation de Born-Oppenheimer (dite adiabatique) pour séparer l'équation aux valeurs propres des noyaux et celle des électrons, par conséquent l'hamiltonien distincts, l'un se rapporte aux électrons et l'autre aux noyaux. Le problème de la structure de bandes ne s'intéresse qu'au comportement des électrons dans le cristal qu'est décrit par l'hamiltonien de la partie électronique, c'est pourquoi elle ignore les vibrations des noyaux qui sont considérés immobiles. Donc on peut écrire l'hamiltonien des électrons H_e comme :

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (I - 3)$$

$$H_e = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_{i,j} \frac{-Z_i e^2}{|R_i - r_j|} \quad (I - 4)$$

Dans ce qui suit on pose $H=H_e$

Et l'équation de Schrödinger devient :

$$H \Psi_e(r_i, R_l^\circ) = E \Psi_e(r, R_l^\circ) \quad (I - 5)$$

Où $\Psi_e(r_i, R_l^\circ)$ dépendent des coordonnées des électrons r_i et celle des noyaux immobiles qui décrit le mouvement des électrons dans un champ de noyau au repos.

Cette nouvelle équation (I-5) représente un problème à N corps, dont la solution rigoureuse ne peut être obtenue avec les outils mathématiques actuels. Pour simplifier la résolution on utilise une seconde approximation celle de Hartree-Fock

1-9-3 L'approximation de Hartree-Fock :

Elle consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment dans un champ noyau créée par les autres électrons et noyaux. Donc cette approximation ramène le problème à N corps au problème à un seul électron.

L'hamiltonien peut être écrit comme une somme des hamiltonien décrivant un seul électron.

$$H = H_e = \sum_i H_i \quad (I - 6)$$

Avec :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(r) \quad (I - 7)$$

Où :

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

L'équation de Schrodinger devient alors :

$$H \Psi_n(r) = E_n \Psi_n(r) \quad (I - 8)$$

Ψ_n et E_n représentent les fonction d'onde et les énergies propres du cristal. Pour obtenir les états électroniques du cristal, il existe différentes méthodes de résolution de l'équation (I-8).

I-9-4 Les méthodes de calcul de la structure de bande:

I-9-4-1 La méthode de liaisons fortes :

La méthode de liaisons fortes procède de l'idée que les états électroniques dans le cristal sont essentiellement des états atomique plus au moins perturbés par la nature périodique du cristal, dont les niveaux d'énergie électroniques et les fonctions d'onde, ainsi que le potentiel du solide sont de nature atomique avec des corrections exigées par le cristal.

Cette méthode consiste à développer les fonctions d'onde du cristal sous forme de combinaisons linéaires d'orbitales atomiques, en tenant compte du théorème de Bloch auquel doivent satisfaire les fonctions d'onde du cristal.

La fonction d'onde est écrite sous formes d'une somme de Bloch d'orbitales atomiques. Cette méthode donne de bon résultats lorsqu'il s'agit d'orbitales atomiques très localisées autour des noyaux. Donc cette approche est mieux adaptée pour le calcul des états de cœur.

I-9-4-2 La méthode cellulaire :

La méthode cellulaire est la première tentative de calcul de la structure de bandes introduites par Wigner et Seitz. Elle consiste à diviser la maille élémentaire en cellules contenant un seul atome. Le potentiel dans chaque cellule a alors une symétrie sphérique, ce qui permet de calculer simplement les fonctions de base en séparant la partie radiale des harmoniques sphériques.

La difficulté de la méthode réside essentiellement dans la maîtrise des conditions aux limites [7,13].

I-9-4-3 La méthode des ondes planes augmentée (A.P.W) :

Cette méthode a été imaginée pour pallier au problème des conditions aux limites inhérentes à la méthode cellulaire. Le potentiel cristallin est supposé sphérique à l'intérieur de sphère de rayon r_s entourant les atomes, et constant à l'intérieur de ces sphères.

Les fonctions d'onde sont développées en ondes sphériques dans les régions où le potentiel est de type atomique et en ondes planes dans les régions où le potentiel est constant. Les fonctions d'onde sont appelées ondes planes augmentées elles sont continues en $r = r_s$ et ne présentent de ce fait aucun problème de conditions aux limites [7,13].

I-9-4-4 La méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W) :

La méthode O.P.W a été proposée par Herring, qui note que le fait d'approximer les fonctions d'ondes par des fonctions d'ondes planes n'est pas une bonne solution puisqu'elle ne tient pas compte des oscillations rapides du cœur, d'où le nom d'ondes planes orthogonalisées.

La fonction d'onde O.P.W est donnée alors par:

$$\Psi_k(r) = \exp(ikr) + \sum_c \mu_c \phi_k^c(r) \quad (I - 9)$$

Où

c : définit le cœur atomique.

\sum est portée sur tous les niveaux du cœur c .

ϕ_k^c : généralement est une fonction atomique. La constante μ_c est calculée par la condition d'orthogonalité de $\Psi_k(r)$ avec chaque niveau du cœur.

$$\int \phi_k^c \exp(ikr) d^3r = 0 \quad (I - 10)$$

$$\mu_c = - \int \phi_k^{c*} \exp(ikr) d^3r \quad (I - 11)$$

On choisit la solution de l'équation de Schrodinger comme combinaison linéaire d'ondes planes orthogonalisées.

$$\Psi_k(r) = \sum_k C_k \Psi_k + K(r) \quad (I - 12)$$

Les coefficients μ_c sont calculés à partir des conditions de Bloch, et les énergies $E(K)$ sont obtenues en utilisant la méthode variationnelle .

La méthode O.P.W a beaucoup utilisé pour calculer les bandes de valence et de conduction des semi-conducteurs de type IV-IV et III-V. La principale difficulté dans cette méthode réside dans le fait qu'elle nécessite la séparation entre les états du cœur d'une part, et les états de valence et de conduction de l'autre. Ceci propose que les fonctions d'ondes du cœur sont très localisées à l'intérieur de la cellule élémentaire et que leur niveaux d'énergie sont très séparés de ceux de la bande de valence.

I-9-5 L'approximation du pseudopotentiel :

Il est bien connu que la plupart des propriétés physiques des solides dépendent des électrons de valence beaucoup plus que ceux du cœur, car les premiers sont les seuls à intervenir dans l'établissement des liaisons chimiques. Les fonctions d'onde de valence oscillent rapidement dans la région occupée par les électrons du cœur et ceci est dû au potentiel ionique fort dans cette région. Ces oscillations permettent de conserver l'orthogonalité entre les fonctions d'onde du cœur et celles de valence, "condition oblige" du principe d'exclusion. L'idée fondamentale du "pseudopotentiel" est de remplacer un problème par un autre. L'application primordiale dans la structure électronique, consiste à remplacer le potentiel fort de Coulomb, provenant des noyaux et des effets des électrons du cœur étroitement liés, par un potentiel ionique effectif agissant sur un ensemble de pseudo fonctions d'onde, plutôt que sur les vraies fonctions d'onde de valence.

Le pseudo potentiel est idéalement construit, de ce fait les propriétés de diffusion ou les déphasages pour la pseudo-fonction d'onde sont identiques aux propriétés de diffusion de l'ion et des électrons du cœur pour les fonctions d'onde de valence. Ceci de façon à ce que les pseudo-fonctions d'onde n'aient pas de nœuds radiaux dans la région du cœur. Pour chaque nœud que les fonctions de valence possèdent dans la région du cœur, le déphasage total produit par l'ion et les électrons du cœur sera plus grand de π que celui produit par l'ion et les électrons de valence dans la même région. A l'extérieur de la région du cœur les deux potentiels sont identiques[14].

I-9-5-1 La méthode empirique des pseudopotentiels (E.PM) :

La méthode empirique des pseudopotentiels (EPM) n'est pas utilisée extensivement pour étudier tous les métaux mais appliquée avec succès à une douzaine de semi-conducteurs de structure diamant et zinc blende. La première application de succès est le germanium et le silicium . Elle utilise pour déterminer les facteurs de forme, les données expérimentales telles que celles obtenues par le spectre de réflexion ou le spectre de la partie imaginaire de la constante diélectrique que l'on calcule en partant du spectre de réflexion.

Le procédé de calcul de L' E.P.M comme le montre le diagramme suivant [15] est : choisi $V(G)$. La structure est incluse par le facteur de structure et l'équation de Schrodinger est résolu pour les valeurs propres $E(k)$ d'énergie et les pseudofonctions d'ondes $\Psi_{n,k}(r)$. Ces énergies sont comparées avec l'expérience et $V(G)$ est altéré si on obtient pas un bon accord entre l'expérience et la theorie.

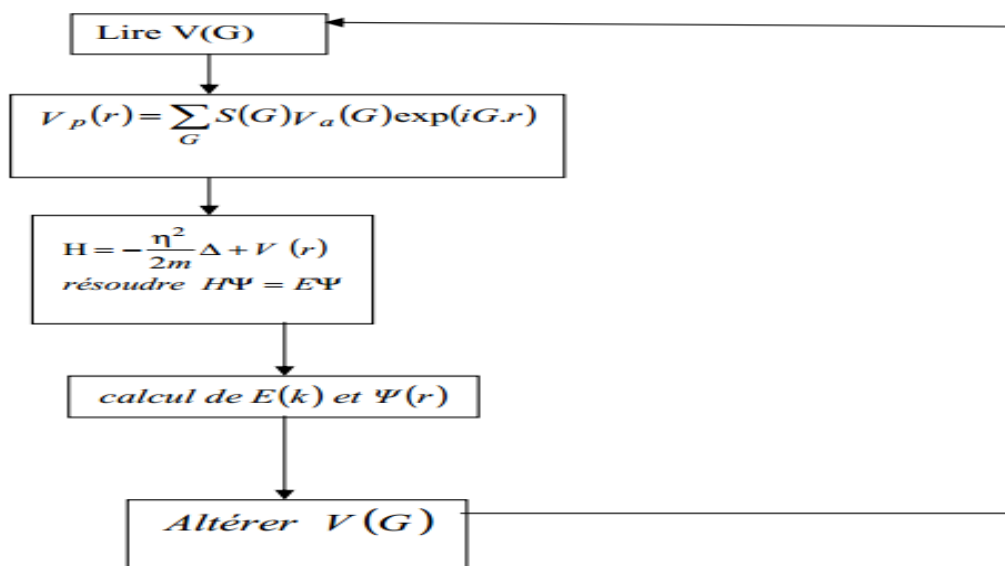


Diagramme block de la méthode E.P.M locale.

Chapitre :II

***Etude des propriétés optiques et diélectriques
des alliages ternaires semi-conducteurs.***

II -1 Introduction :

Comme nous l'avons vu, pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux, nous devons tenir compte des différents rôles joués par l'électron dans la structure des solides.

Dans ce chapitre, nous verrons que notre connaissance du comportement des électrons va jusqu' à nous expliquer la réflexion de la lumière par certains solides, alors que quelques-uns l'absorbent et que d'autres sont transparents. Elle nous apporte aussi l'explication, pour certains solides de pouvoir sous certaines conditions, émettre de la lumière [16].

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission.....) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux. [17]

Les alliages ternaires semi-conducteurs III-V sont considérés comme une classe des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leurs paramètres physiques. L'étude de leur propriétés optiques et diélectriques et leur variation en fonction de la concentration est étudiée par la méthode de l'approximation du cristal virtuel (VCA) .

II-2 Propriétés Optiques :

Les propriétés Optiques des semi conducteurs se manifestent sous forme d'interaction du rayonnement avec les électrons qui sont interprétés selon trois processus [18]:

II-2-1 Absorption fondamentale :

Lorsque le photon absorbé provoque un saut d'électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état vide de la bande de conduction, on dit qu'il y a absorption.

II-2-2 Emission spontanée :

Lorsqu'un électron de la bande de conduction retombe spontanément sur un état vide de la bande de valence, il y a émission spontanée.

II-2-3 Emission stimulée :

Si le photon absorbé induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de bande de valence avec émission d'un photon, l'émission est dite stimulée.

II-3- Interaction rayonnement matière :

II-3-1 Photons et électrons :

La nature ondulatoire du rayonnement électromagnétique est représentée par la combinaison d'un champ électrique \vec{E} et champ magnétique \vec{H} satisfaisant aux équations de maxwell qui s'écrivent dans un milieu non magnétique, isotrope et non chargé :

$$\overrightarrow{rot}\vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (II - 1 - a)$$

$$\overrightarrow{rot}\vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (II - 1 - b)$$

$$div \vec{E} = 0 \quad (II - 1 - c)$$

$$div \vec{H} = 0 \quad (II - 1 - d)$$

Où $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ est la constante diélectrique du milieu. Les champs électrique et magnétique vibrent perpendiculairement l'un par rapport à l'autre et à la direction de propagation. La similarité de leurs comportement permet de ramener la représentation de rayonnement à la seule expression du champ électrique qui s'écrit :

$$E^\rho = E_0^\rho e^{(j\omega - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (II - 2)$$

Avec $\omega = 2\pi\nu$ la pulsation et \vec{k} le vecteur d'onde.

L'expression (II-2) est solution de l'équation (II-1).

L'onde réelle est constituée de paquets d'ondes qui se propagent avec une vitesse $V_g = \frac{d\omega}{dk}$ que l'on appelle vitesse de groupe.

La représentation ondulatoire du rayonnement que nous venons de rappeler est bien adaptée à l'étude des interactions rayonnement –rayonnement.

Dans le cas des interactions rayonnement – matière, et plus particulièrement lorsqu’il y a échange d’énergie, comme c’est le cas dans les composants optoélectroniques, la représentation corpusculaire du rayonnement est mieux adaptée.

Pour Einstein, tout se passe comme si le rayonnement électromagnétique était constitué de particules - rejoignant ainsi les idées de Newton sur la lumière - dont les caractéristiques mécaniques, l’impulsion \vec{P} et l’énergie E sont reliées aux grandeurs ondulatoires, la longueur d’onde λ et la fréquence ν par les formules :

$$E = \hbar\omega, \vec{P} = \hbar\vec{k} \quad (\text{II} - 3)$$

Où

$\omega = 2\pi\nu$ désigne la pulsation.

\vec{k} le vecteur d’onde ($|k| = 2\pi/\lambda$)

$\hbar = h/2\pi = 1.0546 \cdot 10^{-34}$ joule second.

Pour la première fois dans l’histoire de la physique, étaient associés dans un même concept –*le photon*– des grandeurs simultanément d’essence “mécanique” (énergie et impulsion) et d’essence “ondulatoire” (fréquence et pulsation). Cette dualité primordiale entre onde et corpuscule constitue le point de départ de la théorie quantique.

II-3-2 La réflexion des ondes planes :

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constantes diélectriques différentes, elle sera divisé en deux, une onde réfléchi et une onde réfractée, leurs amplitudes seront déterminées par les conditions aux limites qu’ exigent que la composante tangentielle du champ \vec{E} doit être la même dans les deux milieux ainsi que la composante tangentielle du champ \vec{H} .

- **Paramètres optiques :**

Les plus importantes propriétés optiques du semi-conducteur sont le bord d’absorption ou l’énergie de gap optique et l’indice de réfraction [19].

L’indice de réfraction complexe est défini comme suit :

$$n_c = n - ik \tag{II - 4}$$

Avec n l'indice de réfraction et k le coefficient d'extinction. Puisque le coefficient d'absorption dépend sur ces paramètres, il est important de connaître leurs dépendances sur la longueur d'onde. Deux méthodes générales pour déterminer ces constantes optiques sont :

- ✓ La transmission et la réflexion à une incidence normale.
- ✓ La technique d' ellipsométrie.

Les conditions aux limites mènent à la formule de Frenel :

$$r_n = \frac{\cos \Phi - (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}}{\cos \Phi + (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}} \tag{II - 5}$$

$$r_p = \frac{N^2 \cos \Phi - (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}}{N^2 \cos \Phi + (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}} \tag{II - 6}$$

Les quantités r_n et r_p sont les amplitudes des coefficients de réflexion pour les composantes normale et parallèle de l'onde incidente, respectivement, définies par :

$$E_{rn} = r_n E_n$$

$$E_{rp} = r_p E_p$$

Les intensités des coefficients de réflexion R_n et R_p sont souvent appelés coefficients de réflexion déterminés par le rapport entre l'onde incidente et celle réfléchié alors :

$$R_n = |r_n|^2 \text{ et } R_p = |r_p|^2$$

Pour une incidence normale ($\Phi = 0$) les équations (II-5) et (II-6) mènent au résultat suivant [17] :

$$R_n = R_p = R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \tag{II - 7}$$

Pour $k = 0$ n est réel le coefficient de réflexion devient :

$$R = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (\text{II} - 8)$$

La mesure de la réflexion de la lumière fournit l'information la plus complète sur les systèmes électroniques [20].

II-4 Indice de réfraction :

Dans un semi-conducteur, la constante diélectrique s'écrit en fonction de la fréquence sous la forme :

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m^*(-\omega^2 - j\Gamma\omega)} \quad (\text{II} - 9)$$

Avec $\omega = 2\pi\nu$

Où Γ caractérise l'absorption du milieu. ε est une grandeur complexe.

En haute fréquence, l'indice de réfraction est lié à la constante diélectrique par la relation :

$$n = \sqrt{\varepsilon} \quad (\text{II} - 10)$$

Il faut remarquer que dans les alliages ternaires du type GaInAs, l'indice de réfraction dépend de la composition, c'est-à-dire de la concentration en Gallium, et ceci est utilisé dans la réalisation des diodes laser en particulier

II-5-Interaction électron-photon :

Entre deux niveaux E_n et E_m trois types d'interactions différentes peuvent se produire :

Où

E_n : Un niveau supérieur

E_m : Un niveau inférieur

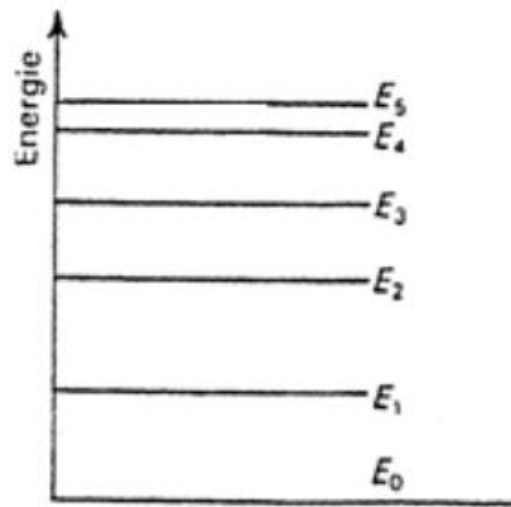


Figure II-1 : Schéma de niveaux.

II-5-1-a Absorption :

Un électron du niveau inférieur E_m absorbe un photon d'énergie $h\nu = (E_n - E_m)$ et passe au niveau supérieur E_n . L'énergie du photon doit être comprise dans l'intervalle d'énergie donné par la largeur de la ligne d'absorption considérée [21].

II-5-1-b Émission spontanée et émission stimulée:

Un électron du niveau supérieur E_n passe spontanément au niveau inférieur E_m en émettant un photon d'énergie $h\nu = (E_n - E_m)$, c'est l'émission spontanée.

Dans le cas de l'émission stimulée, la lumière incidente de fréquence ν située à l'intérieur de la largeur de la transition force le passage d'un électron du niveau supérieur au niveau inférieur et l'émission d'un photon d'énergie $h\nu = (E_n - E_m)$ [21].

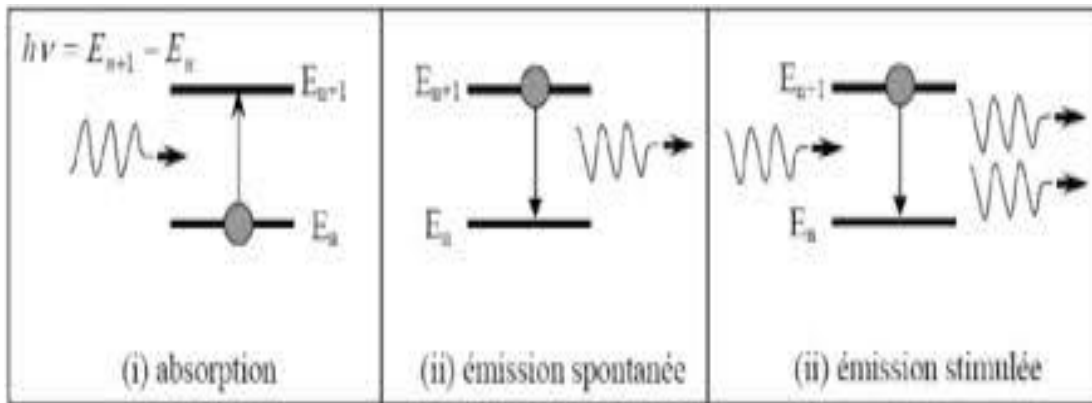


Figure II-2 : absorption , émission spontanée, émission stimulée.

L'absorption et l'émission stimulées sont des interactions cohérentes, en effet, pour les deux phénomènes l'échange d'énergie correspond à une onde partielle en relation de phase bien déterminée avec l'onde primaire.

L'émission spontanée, par contre, est un processus incohérent car indépendant du champ de radiation environnant et statistiquement indépendant d'un atome à l'autre. Dans les sources de lumière thermique (lampes à incandescence, lampes à arc, etc.), c'est l'émission spontanée qui livre la partie prépondérante de l'émission qui est donc incohérente.

Ces différents types sont conditionnés par les règles de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement $\vec{P} = \hbar \vec{k}$.

Si on repère par les indices i et f , les états initial et final de l'électron, et par p l'état du photon, les règles de conservation :

$$E_f - E_i = \pm E_p \tag{II - 11 - a}$$

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \pm \vec{k}_p \tag{II - 11 - b}$$

Où le signe + correspond à l'absorption et le signe - à l'émission.

Notant en outre que si le rayonnement est communément caractérisé par sa longueur d'onde dans le vide mesurée en μm , le semiconducteur est quant à lui communément caractérisé par son gap d'énergie mesuré en électron- Volt.

Dans l'étude des composants optoélectroniques, il est utile d'avoir en permanence à l'esprit, la relation énergie-longueur d'onde, pour traduire en eV la caractéristique d'un rayonnement définie en μm [22].

$$E = h\nu = \frac{h}{T} = \frac{hc}{\lambda}$$

Soit

$$E(\text{eV}) = \frac{1.24}{\lambda(\mu)} \quad (\text{II} - 12)$$

II- 6 Calcul de l'indice de réfraction :

Plusieurs approches ont été envisagées pour corréler le gap énergétique des semi-conducteurs à leur indice de réfraction.

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes laser à hétérojonction, les amplificateurs optiques, les fibres optiques.... [23].

Moss était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction n et le gap d'énergie E_g basée sur le modèle atomique [24].

$$E_g n^4 = k \quad (\text{II} - 13)$$

Où

E_g est le gap d'énergie et k une constante trouvée égale à 180eV.

Ravindra et al proposeront une relation linéaire entre n et E_g donnée par [25] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{II} - 14)$$

Où

$$\alpha = 4.084 \text{ et } \beta = -0.62 \text{eV}^{-1}$$

Hervé et Vandamme proposeront un modèle basé sur la théorie des oscillation classiques pour $\omega \ll \omega_0$ [26].

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_{g+B}}\right)^2} \quad (\text{II} - 15)$$

Où

$$A = 13.6eV, B = 3.4eV$$

La relation de Reddy et Anjaneyulu [27] :

$$E_g e^n = 36.3 \quad (\text{II} - 16)$$

La relation de Ravindra [28] :

$$n = 4.16 - 0.85 E_g \quad (\text{II} - 17)$$

II-7 Propriétés diélectriques :

Un isolant possède peu de charges libres, elles y sont piégées, contrairement à un matériau conducteur où les charges sont nombreuses et libres de se déplacer sous l'action d'un champ électromagnétique.

La faculté d'un matériau à être isolant peut aussi être expliquée par la notion de bandes d'énergie. L'isolation électrique est rattachée à une grandeur physique mesurable, la résistance, qui s'exprime en ohms (symbole : Ω).

Un matériau est diélectrique s'il ne contient pas de charges électriques susceptibles de se déplacer de façon macroscopique. Autrement dit, c'est un milieu qui ne peut pas conduire le courant électrique. A ce titre, on l'appelle parfois isolant électrique. On compte parmi ces milieux le verre et de nombreux plastiques [29].

II-7-1 Quelques milieux diélectriques solides usuels :

Le verre, utilisé pour faire des isolateurs de lignes haute tension,

La céramique.

La plupart des plastiques.

Le Polypropylène, utilisé en particulier dans les condensateurs.

Malgré l'impossibilité des milieux diélectriques de conduire le courant, ils présentent de nombreuses caractéristiques électriques. En effet les atomes qui constituent le matériau peuvent présenter des dipôles électrostatiques qui sont susceptibles d'interagir avec un champ électrique. Cette interaction se traduit par la création d'une polarisation reliée à ce champ électrique, au niveau microscopique, par une polarisabilité, et au niveau macroscopique, par la susceptibilité électrique, comme il est montré sur la figure (II-3) [29].

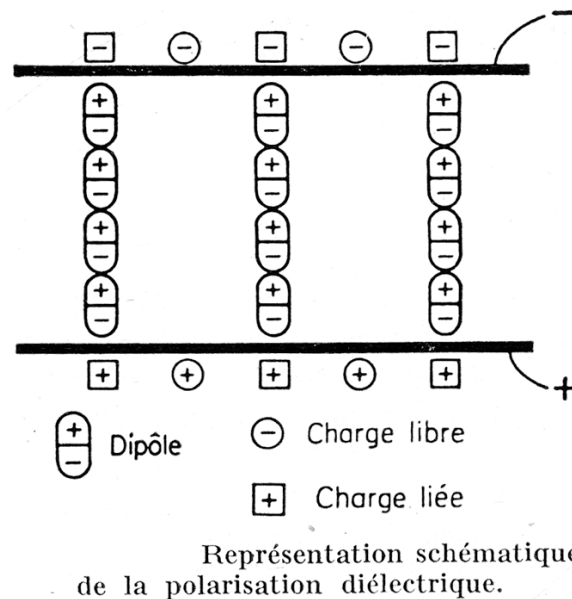


Figure II-3 : Illustration de la polarisation d'un diélectrique [30]

II-7-2 Création d'une polarisation :

En soumettant le matériau à un champ électrique de tels dipôles peuvent être créés. S'ils existaient déjà, cela peut avoir comme effet de tous les aligner dans le même sens.

D'un point de vue microscopique, on peut relier l'amplitude de l'onde au dipôle créé via la notion de polarisabilité, qui est une caractéristique propre à chaque atome. Il est cependant impossible de mesurer de telles grandeurs microscopiques. On préfère utiliser une grandeur macroscopique, la polarisation, qui vaut la somme de tous les dipôles du matériau. Cette polarisation vient donc de différents effets physiques [29] :

- la polarisation électronique, toujours présente, est due au déplacement et à la déformation de chaque nuage électronique,

- la polarisation atomique est due aux déplacements des atomes,
- la polarisation d'orientation existe lorsque des dipôles déjà présents sont tous alignés entre eux.

La polarisation \vec{P} est souvent proportionnelle au champ électrique \vec{E} qui l'a créée (ce cas est dit linéaire) :

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \cdot \chi \cdot \vec{E} \quad (\text{II} - 18)$$

avec ε_0 la constante diélectrique et χ la susceptibilité électrique du matériau, qui est un nombre complexe. Dans le cas d'un diélectrique anisotrope, est χ un tenseur de rang 2.

II-7-3 Susceptibilité électrique :

En électromagnétisme, la susceptibilité électrique χ est une grandeur caractérisant la polarisation créée par un champ électrique. Ce phénomène se produit uniquement par l'intermédiaire d'un milieu matériel (souvent un matériau diélectrique), et dans de nombreux cas, l'intensité du champ électrique utilisé est suffisamment faible pour que la polarisation vérifie la relation (II-18) .

où ε_0 est la constante diélectrique, et où la susceptibilité électrique χ est un nombre complexe sans dimension.

Ce cas est dit linéaire car il s'agit d'une relation de proportionnalité. Il permet d'interpréter le phénomène de réfraction : en effet, la susceptibilité est liée, d'après les équations de Maxwell, à l'indice de réfraction n par la relation :

$$n = \sqrt{1 + \text{Re}(\chi)} \quad (\text{II} - 19)$$

où $\text{Re}(\chi)$ désigne la partie réelle de la susceptibilité électrique.

II-7-4 Calcul de la susceptibilité électrique :

Pour calculer la susceptibilité électrique, plusieurs approches sont possibles. Il faut dans tous les cas être capable de décrire l'effet d'un champ électrique sur les constituants la matière. Les différents mécanismes possibles sont à l'origine de plusieurs types de polarisation :

- la polarisation électronique, toujours présente, due au déplacement et à la déformation du nuage électronique,
- la polarisation atomique ou ionique due aux déplacements des atomes ou des ions dans la structure du matériau,
- la polarisation d'orientation, pour les matériaux qui sont initialement déjà polarisés de façon microscopique, mais dont les éléments n'ont pas forcément la même orientation,
- la polarisation macroscopique due à des déplacements de charges dans l'ensemble du matériau.

Dans la plupart des cas, plusieurs de ces phénomènes sont présents et se cumulent. La principale difficulté du calcul réside dans le fait que le champ électrique macroscopique dans lequel est plongé le matériau est souvent différent du champ électrique local qui agit réellement sur les constituants microscopiques et donc crée la polarisation. C'est pourquoi il faut distinguer susceptibilité (grandeur macroscopique) de polarisabilité (grandeur microscopique) [29].

II-7-5 Constante diélectrique :

La constante diélectrique ou constante électrique, également nommée permittivité du vide ou encore permittivité diélectrique du vide, est une constante physique. Elle est notée par ϵ_0 .

II-7-5-1 Définition :

La constante diélectrique se définit comme le rapport entre la permittivité ϵ du matériau considéré et la permittivité du vide.

$$\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2 \quad (\text{II} - 20)$$

où :

- μ_0 est la constante magnétique
- c est la vitesse de la lumière dans le vide.

La constante diélectrique décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle intervient dans de nombreux domaines, en particulier en optique, via l'indice de réfraction. Les lois gérant la réfraction et la réflexion de la lumière y font appel.

Au niveau microscopique, la constante diélectrique est liée à la polarisabilité électrique des molécules ou atomes constituant le milieu.

La constante diélectrique est une grandeur tensorielle (la réponse du matériau peut dépendre de l'orientation des axes cristallographiques du matériau), qui se réduit à un scalaire dans les milieux isotropes. Elle est très généralement complexe, la partie imaginaire étant liée au phénomène d'absorption ou d'émission du champ électromagnétique par le matériau.

La constante diélectrique est également notée k dans le domaine des circuits intégrés et des semi-conducteurs. Les matériaux dits low- k sont des diélectriques à faible permittivité. Ils sont utilisés comme isolants entre les interconnexions métalliques pour diminuer le couplage entre celles-ci.

II-7-5-2 Interprétation physique :

La permittivité d'un matériau est définie comme le rapport entre la norme du champ de déplacement électrique et celle du champ électrique appliqué au matériau. Pour des champs suffisamment grands, ce rapport n'est pas constant et tend vers ϵ_0 .

ϵ_0 peut être vue comme la permittivité intrinsèque du vide.

Pour un matériau donné de permittivité ϵ , il est possible de définir la permittivité relative, normalisée par rapport à celle du vide

$$\epsilon_r = \epsilon / \epsilon_0 \quad (\text{II} - 21)$$

Cette valeur ne possède pas d'unité et est toujours supérieure à 1.

II-8 La constante diélectrique statique ϵ_0 et de hautes fréquences ϵ_∞ :

La constante diélectrique appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle a des conséquences importantes sur les propriétés physiques du solide. Elle intervient dans de nombreux domaines, notamment, dans l'étude de

la propagation des ondes électromagnétique, en particulier en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière.

Autrement dit, les excitations propres d'un matériau sont décrites par la fonction diélectrique $\epsilon(\omega, \vec{k})$, cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur d'onde \vec{k} [31].

Pour les petites valeurs de \vec{k} , cette fonction sera seulement fonction de la fréquence, on parlera ainsi de la constante diélectrique statique qui correspond à l'équilibre thermodynamique et la constante diélectrique $\epsilon(\infty)$ correspondant à sa limite pour les hautes fréquences ; appelée aussi constante diélectrique optique .

II-8-1 calcul de la constante diélectrique statique $\epsilon_0(\omega)$:

Pour les cinq premiers modèles, relations (II-13, II-14, II-15, II-16, II-17) on considère que la constante diélectrique en haute fréquence

$$\epsilon_\infty = n^2 \tag{II - 22}$$

Le modèle de Harisson « bond- orbital model » [32] est utilisé pour investir la dépendance en composition de la constante diélectrique statique (ϵ_0) en utilisant la relation qui lie $\epsilon_0(\omega)$ à la constante diélectrique en haute fréquence (ϵ_∞) donnée par :

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty + 1} = 1 + \vartheta \tag{II - 23}$$

Où ϑ est donné par [32]

$$\vartheta = \alpha_p^2(1 + 2\alpha_c^2)/2\alpha_c^4 \tag{II - 24}$$

α_p est la polarité, et déterminée en utilisant la définition de Volg [33]

$$\alpha_p = \frac{-V_A(3)}{V_s(3)} \tag{II - 25}$$

Où

$V_A(3)$ et $V_S(3)$ sont les facteurs de formes symétriques et antisymétriques de l' alliage ternaire semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As$ pour une composition x donnée, à G(111) respectivement.

α_c est la covalence du matériau définie comme,

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (\text{II} - 26)$$

Notant que, la constante diélectrique haute fréquence (ϵ_∞) est estimée en utilisant la relation [34],

L'étude de la dépendance en composition de la constante diélectrique statique est montrée dans notre travail.



Chapitre :III

Résultats et discussions

III-1 Introduction

Des méthodes diverses ont été adoptées pour l'investigation des propriétés optoélectronique des matériaux semi-conducteurs.

Dans ce présent travail, nous avons opté pour l'utilisation de la méthode empirique des pseudo potentiels (EPM) couplée a l'approximation du cristal virtuel (VCA).

III-2 Structure de bande de GaAs et InAs :**III-2-1 Le composé GaAs :**

Comme tous les semi-conducteurs composés III-V, le GaAs cristallise dans une structure de type zinc-blende. Il est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes de gallium Ga , l'autre les atomes de l'arsenic As. Le décalage entre les deux réseaux est d'un quart de la diagonale principale du cube. On a donc quatre paires d'atomes par cellule conventionnelle. Les liaisons tétraédriques covalentes telles que les liaisons Si-Si par exemple ou partiellement ioniques et partiellement covalentes telles que les liaisons Ga-As dans le cas qui nous concerne sont la base de la structure zinc-blende. En effet, chaque atome est l'origine de quatre liaisons orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier.

Une autre propriété chimique importante du GaAs est que si l'on clive (coupe) le cristal selon la direction [001], on aura une succession de plans cristallins comportant des atomes de l'élément de type III, puis les atomes de l'élément de type V, et ainsi de suite.

Cela permet une croissance couche à couche du semi-conducteur.

D'un point de vue énergétique, la relation de dispersion $E(k)$, présentant l'énergie en fonction du vecteur d'onde, montre que contrairement au silicium et au germanium où la transition est indirecte, le GaAs est un matériau à transition directe (Figure III-1)

avec un gap $E_g = 1,42$ eV à 300 K [10,35,36,37,38].

III-2-2 Le composé InAs :

Comme tous les semi-conducteurs composés III-V, le InAs cristallise dans une structure de type zinc-blende. Il est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes d'indium In, l'autre les atomes de l'arsenic As.

D'un point de vue énergétique, la relation de dispersion $E(k)$, présentant l'énergie en fonction du vecteur d'onde, montre que contrairement au silicium et au germanium où la transition est indirecte, le InAs est un matériau à transition directe (Figure III-2).

avec un gap $E_g = 0.36$ eV à 300 K.

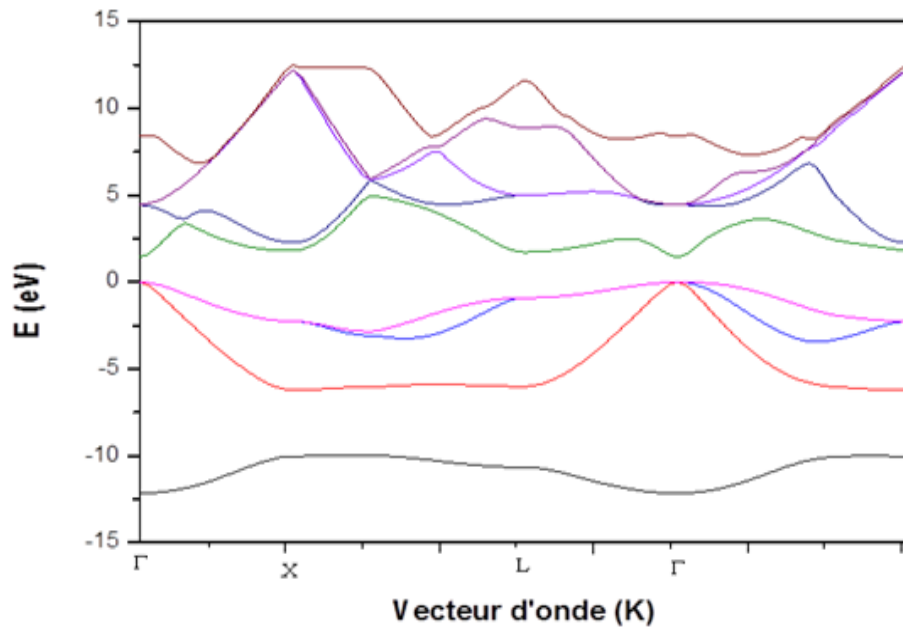


Figure III-1 : Structure de bande du composé GaAs

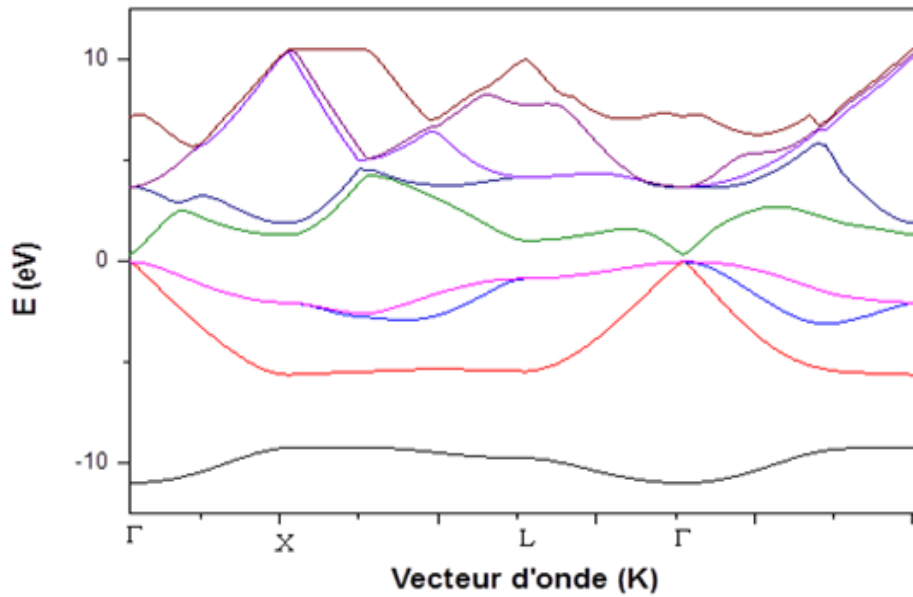


Figure III-2 : Structure de bande du composé InAs

III-2-3 Structure de bande des alliages ternaires Ga_xIn_{1-x}As :

La structure de bandes d'énergie des semi conducteurs étudiés ainsi que leurs alliages ternaire, dans la structure Zinc blende, a été calculé.

Les facteurs de formes ajustés des semi-conducteurs parents GaAs et InAs sont illustrés dans le tableau III-1.

Composé	Facteur de forme (Ry)						a(A°)
	V _S (3)	V _S (8)	V _S (11)	V _A (3)	V _A (4)	V _A (11)	
GaAs	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01	5.6533
InAs	-0.217669	0.011	0.041633	0.054731	0.039485	0.024	6.0584

Tableau III-1: Facteurs de formes (Ry) du GaAs et InAs avec la constante de maille a(A°)

Les spectres d'énergies obtenus pour Ga_xIn_{1-x}As a différentes valeurs de x sont représentés sur les figures : III-3, III-4, III-5, III-6, III-7, III-8, III-9, III-10 et III-11.

Le sommet de bande de valence pour tous les alliages semi-conducteurs et leurs parents est pris comme origine des énergies. On remarque que le minimum de la bande de valence est au point Γ dans la zone de Brillouin et que le maximum de la bande de conduction est aussi au point Γ . Ce résultat est remarqué pour tous les alliages ternaires étudiés.

On peut conclure donc que tous ces métaux sont des semi-conducteurs à gaps directs (la transmission se fait du point Γ au point Γ). On note aussi la présence de quatre bandes de valences distinctes. La plus basse des bandes de valence présente la forme habituelle attendue pour les semi-conducteurs qui cristallisent dans la structure Zinc blende.

On remarque que les bandes de valences sont moins dispersives que les bandes de conduction. Cela est dû au fait que les électrons des bandes de conduction sont délocalisés.

La première bande de conduction est surtout à caractère ionique.

Qualitativement, la structure des bandes électroniques des alliages étudiés sont presque similaires à ceux des composés binaires GaAs et InAs. Du point de vue qualitatif la principale différence réside dans le changement de la valeur du gap énergétique fondamental.

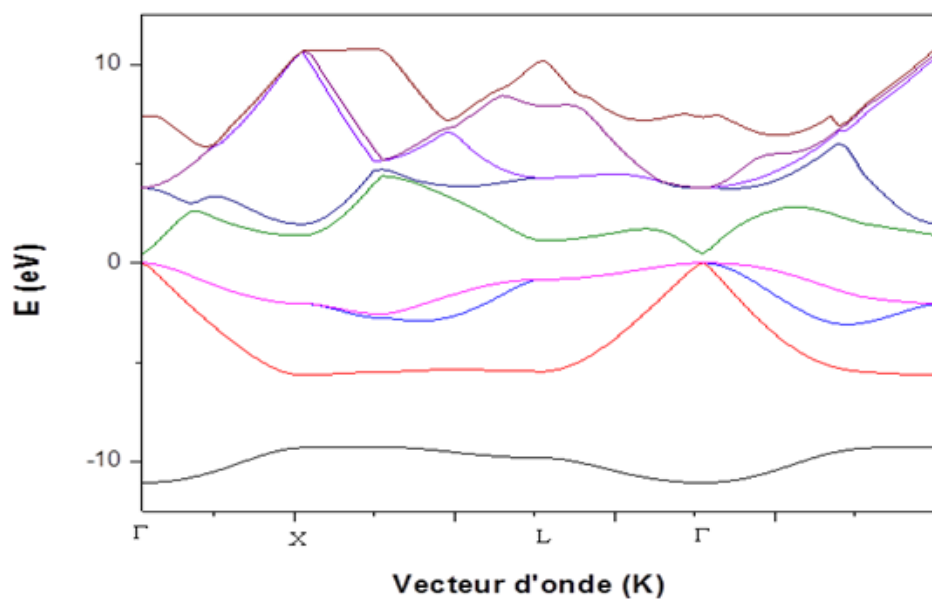


Figure III-3 :Structure de bande du composé Ga_{0.1}In_{0.9}As

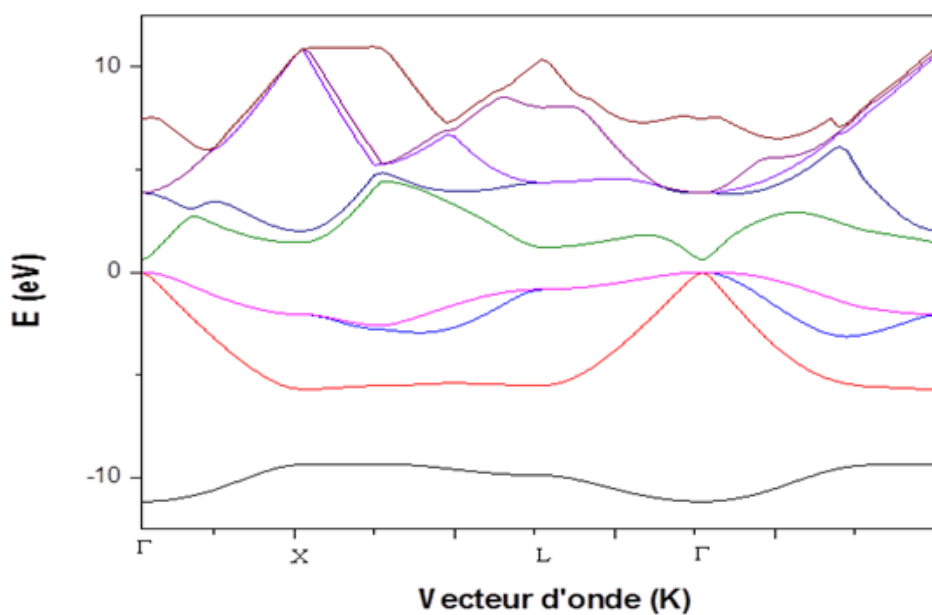


Figure III-4 :Structure de bande du composé Ga_{0.2}In_{0.8}As

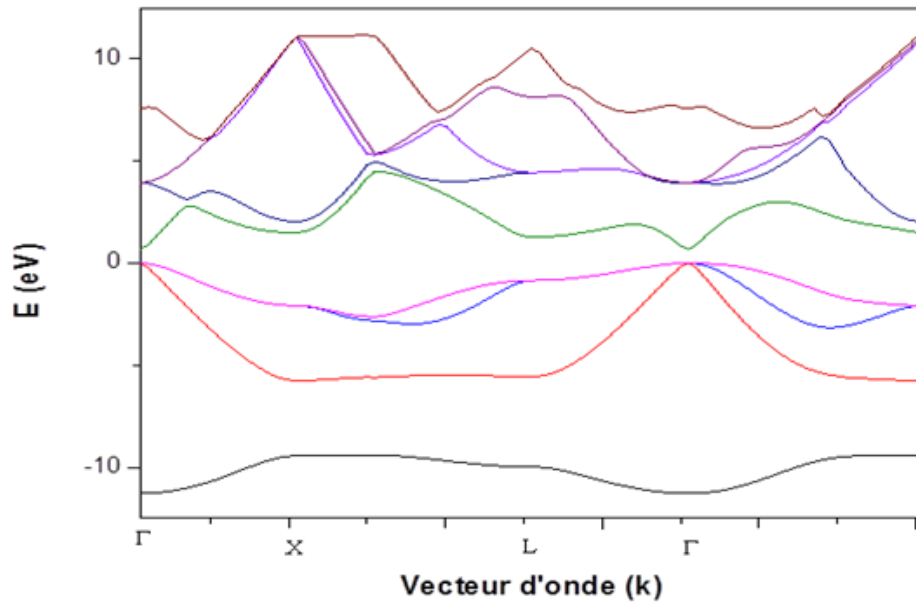


Figure III-5 :Structure de bande du composé Ga_{0.3}In_{0.7}As

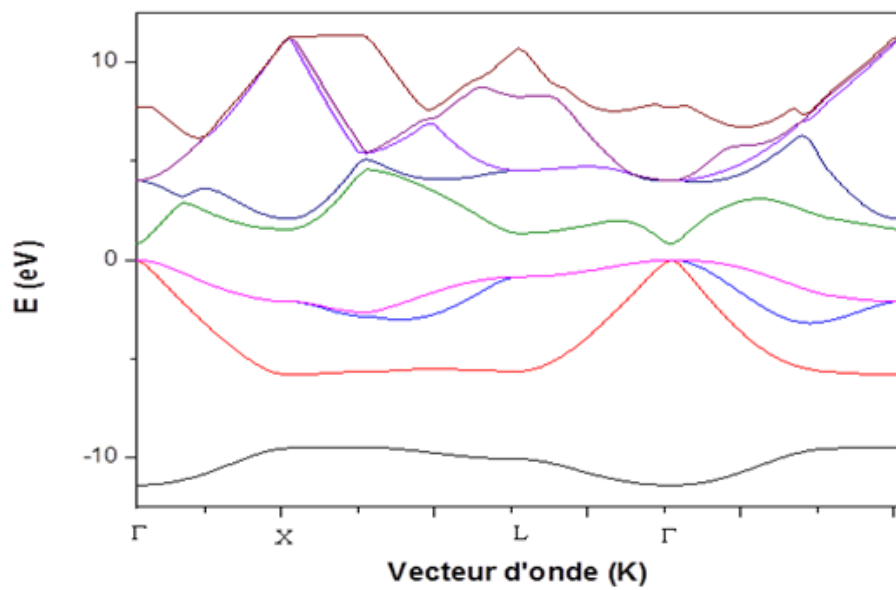


Figure III-6 :Structure de bande du composé Ga_{0.4}In_{0.6}As

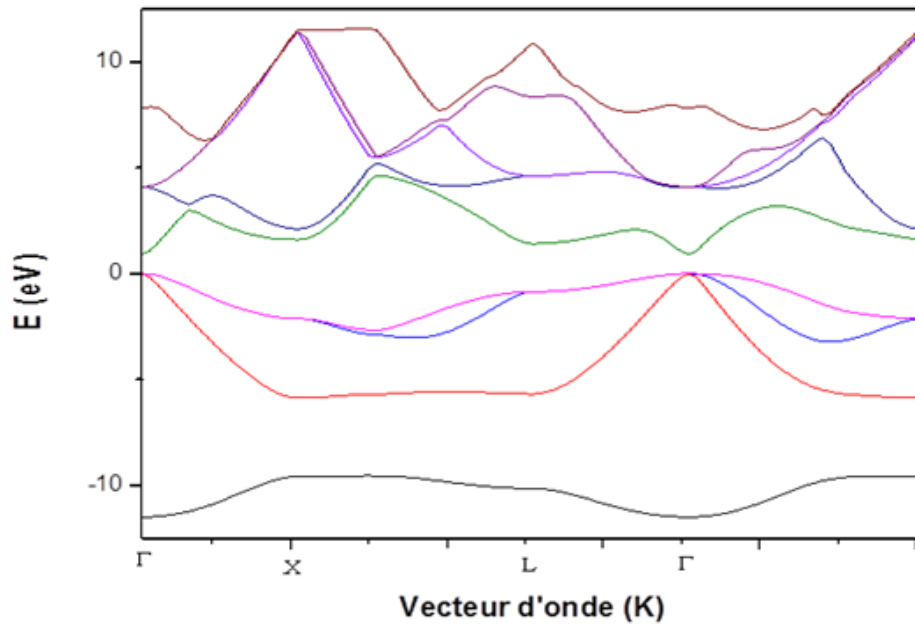


Figure III-7 :Structure de bande du composé Ga_{0.5}In_{0.5}As

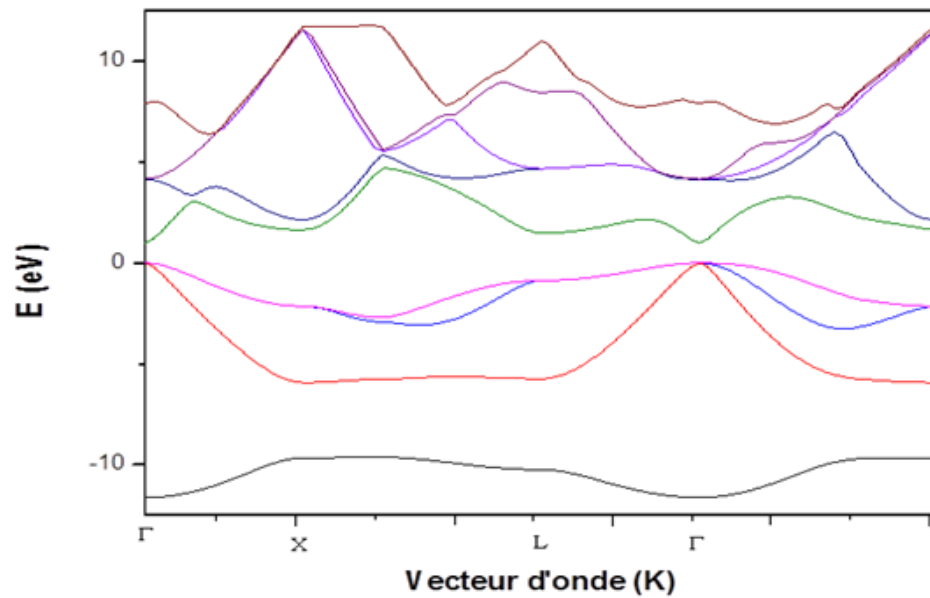


Figure III-8 : Structure de bande du composé Ga_{0.6}In_{0.4}As

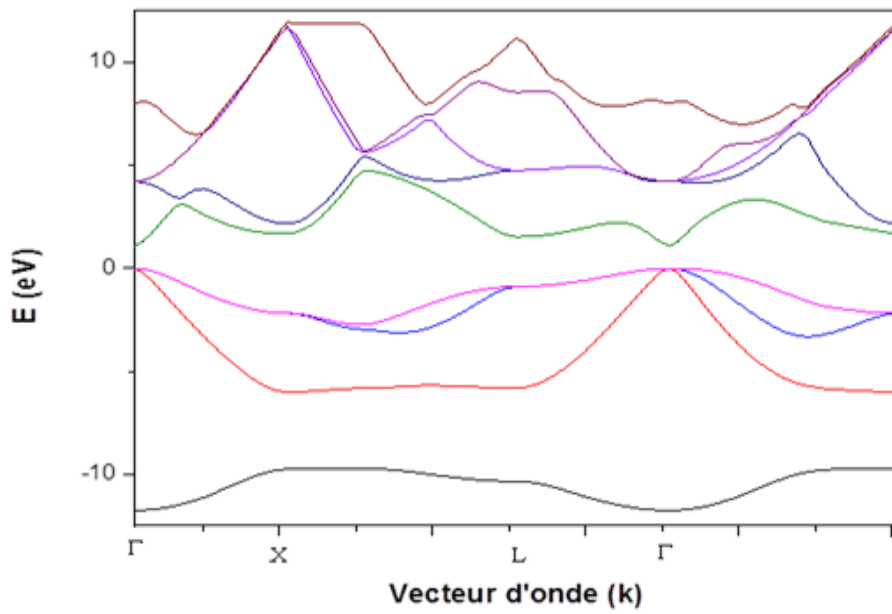


Figure III-9 : Structure de bande du composé Ga_{0.7}In_{0.3}As

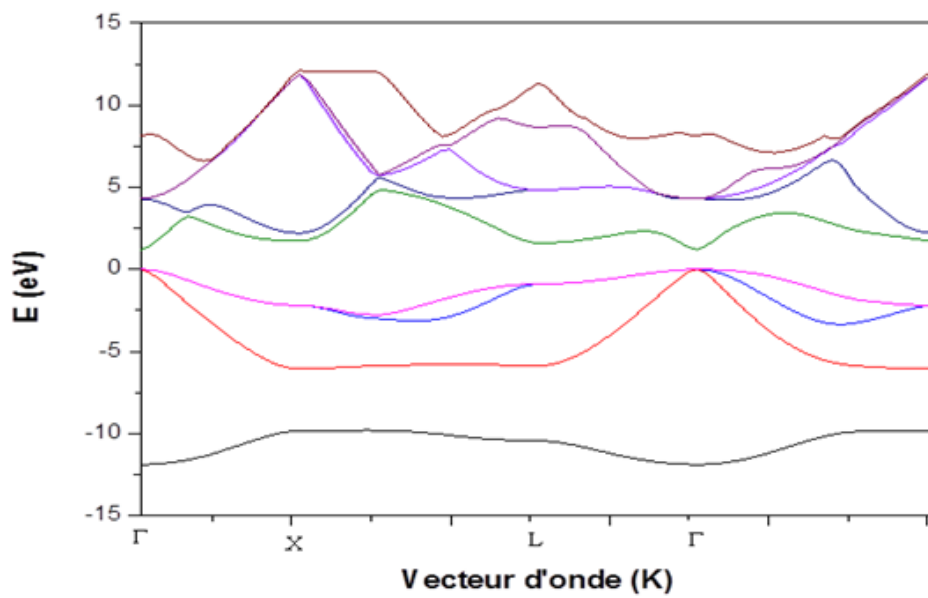


Figure III-10 : Structure de bande du composé Ga_{0.8}In_{0.2}As

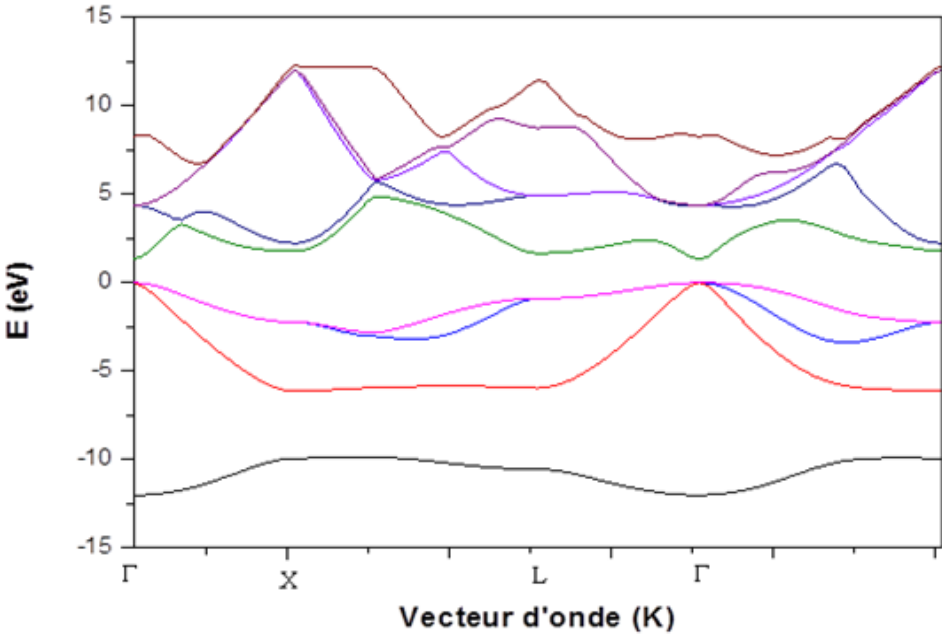


Figure III-11 : Structure de bande du composé Ga_{0.9}In_{0.1}As

III-3 Variation du gap de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la composition :

La variation de l'énergie de la bande interdite directe ($\Gamma - \Gamma$) calculée en fonction de la composition x des alliages ternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ est représentée sur la figure III-12.

Lorsque la composition x varie en allant de $x=0,1$ à $x=0,9$ on note que le gap énergétique varie d'une façon monotone avec une faible paramètre de courbure (la variation est presque linéaire).

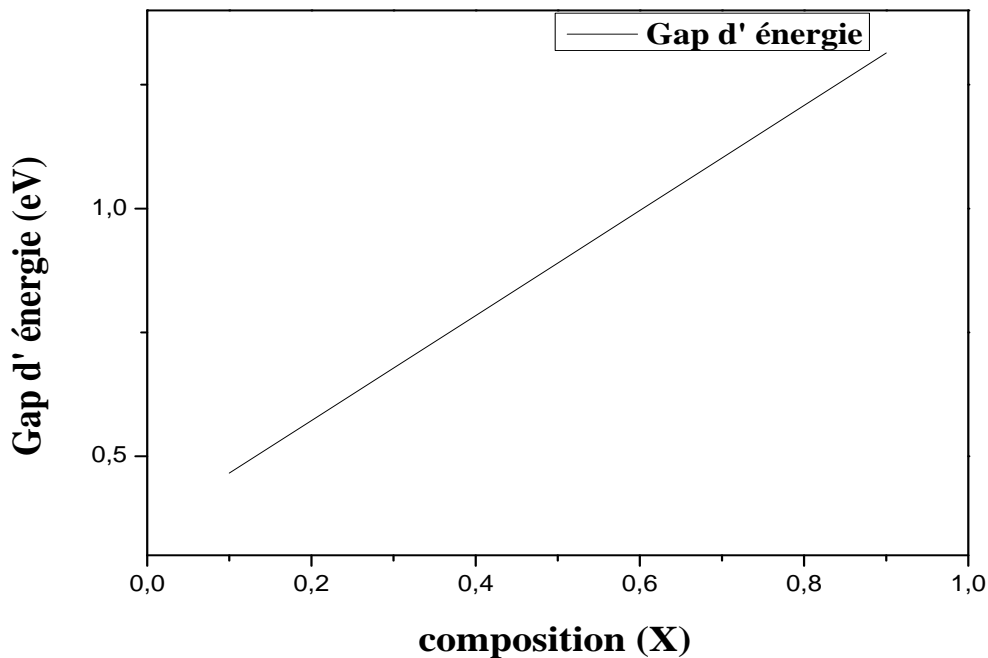


Figure III-12 : La variation du gap d'énergie E_g en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$.

III-4 Indice de réfraction :

L'indice de réfraction n d'un milieu à une longueur d'onde donnée mesure le facteur de réduction de la vitesse de la lumière (ou autres ondes) dans ce milieu. En effet, les rayons de la lumière changent de direction lorsque ils passent d'un matériau à un autre mettant en jeu le rapport des indices de réfraction. La connaissance de l'indice de réfraction est d'une grande importance dans la conception des lasers à hétérostructures ainsi que d'autres dispositifs à guide d'ondes.

Dans ce présent travail, cet indice a été calculé en utilisant cinq modèles différents, qui sont tous directement lié au gap énergétique fondamental.

a- la formule de Moss basé sur le modèle atomique [24]

$$E_g n^4 = k \quad (\text{II-13})$$

$$n^4 = \frac{k}{E_g}$$

Où k est une constante de valeur de 108 eV.

b- La relation de Ravindra et ses collaborateurs [25]

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{II-14})$$

Avec:

$$\alpha = 4.084 \quad \text{et} \quad \beta = -0.62 \text{ eV}^{-1}.$$

c- l'expression empirique de Herve et Vandamme [26]

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{II-15})$$

Avec A et B constantes numériques de valeur 13,6 et 3,4 eV, respectivement.

d- la relation de Reddy et Aujaneyulu [27]

$$E_g e^n = 36.3 \quad (\text{II-16})$$

e- la relation de Ravindra [28]

$$n = 4.16 - 0.85 E_g \quad (\text{II-17})$$

III-4-1 Indices de réfraction des composés GaAs et InAs :

Nos résultats concernant l'indice de réfraction de GaAs et InAs sont présente dans le tableau III-2

Composé	n calcule à partir différents models					Indice Expt.
	Model (1)	Model (2)	Model (3)	Model (4)	Model (5)	
GaAs	2,95	3,20	2,99	3,24	2,95	3,3
InAs	4,16	3,86	3,75	4,61	3,85	3,51

Tableau III-2 : Indice de réfraction n de GaAs et InAs

Le meilleur accord entre nos résultats et les données expérimentales est obtenu lorsque le modèle (2) de Ravindra et ses collaborateurs est utilisé.

III-4-2 Indices de réfraction des l'alliages ternaires Ga_xIn_{1-x}As :

Pour les alliages ternaires Ga_xIn_{1-x}As, nous avons utilise deux méthodes, a saisir :

a- La loi de Vegard, ou l'indice de réfraction n est calcule selon la relation :

$$n_{\text{alliage}} = x.n_{\text{GaAs}} + (1-x).n_{\text{InAs}}$$

La variation de l'indice de réfraction n de l'alliage ternaire Ga_xIn_{1-x}As, calculé en utilisant les différents models en fonction de la composition x est présenté sur les figures III-13, III-14, III-15, III-16, III-17,

b- l'indice de réfraction n est calcule a partir des models cité ci-dessus, en utilisons la valeur de la bande interdite E_g de l'alliage ternaire.

Nos résultats sont montrés sur les figures III-18, III-19, III-20, III-21, III-22.

On note que a l'exception du model de Moss et celui de Ravindra les autres models donnent des valeurs différentes l'une de l'autre pour les n des alliages calculés par les deux méthodes.

Notons que la variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x présente un comportement monotone pour tous les modèles utilisés. Bien que du point de vue qualitatif, des valeurs de n obtenu a partir des cinq modèles utilisées sont différentes les un des autres, mais présente la même tendance. La diminution de l'indice de réfraction est directement lié a la augmentation du gap en fonction de composition x.

Calcul a partir de la theorie des alliages (loi de vegard)

Modèle atomique:

$$E_g n^4 = k \quad \text{et} \quad k=108 \text{ eV}$$

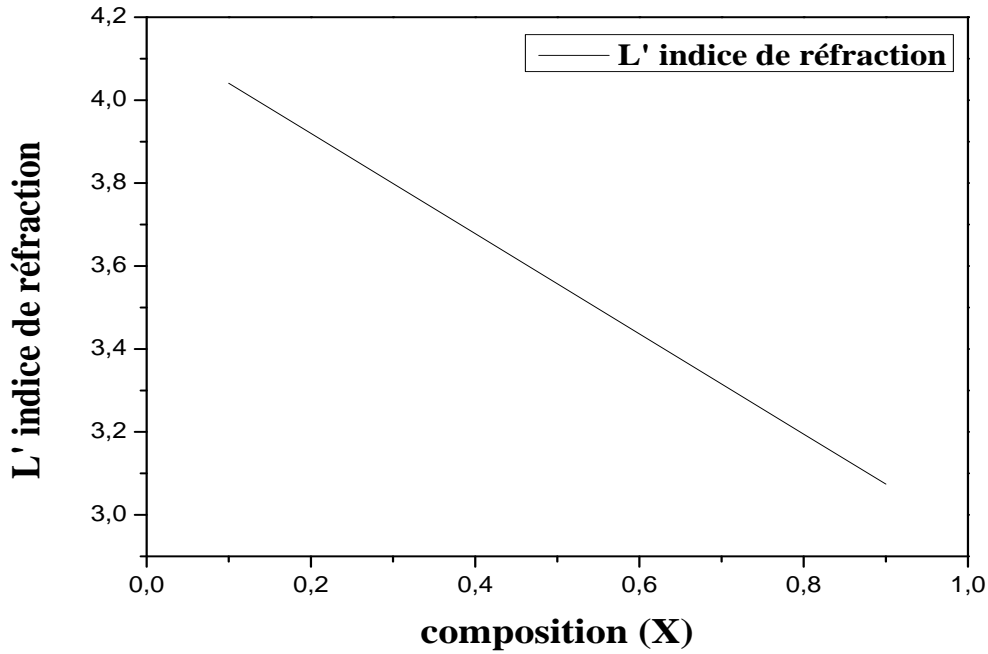


Figure III-13 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x .

Ravindra :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad \alpha=4.084 \text{ et } \beta = -0.62 \text{ eV}^{-1}$$

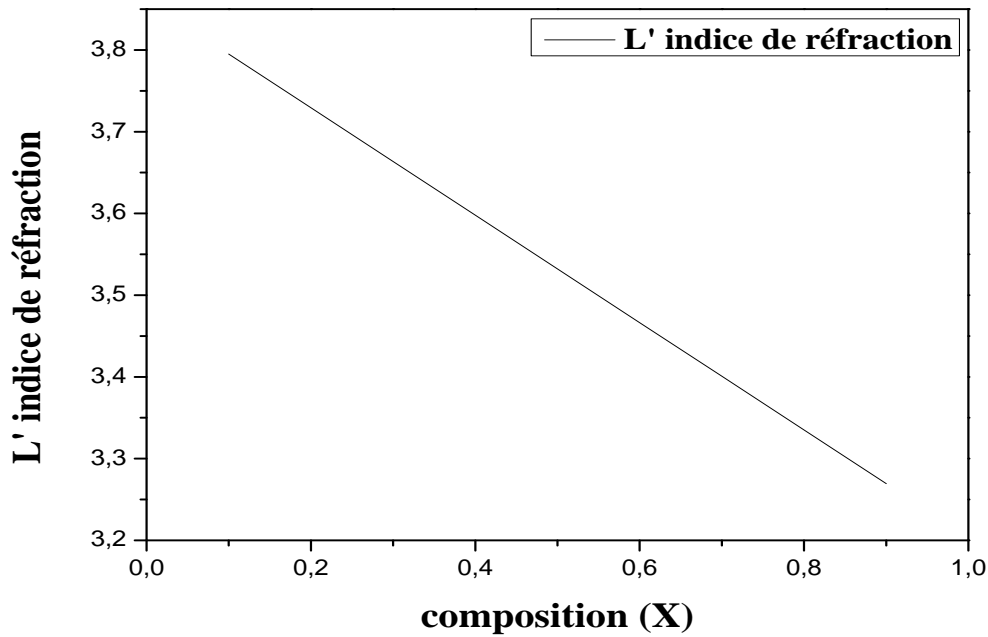


Figure III-14 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x .

Hervé et Vandamme :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_{g+B}}\right)^2}$$

$$A = 13.6eV, B = 3.4eV$$

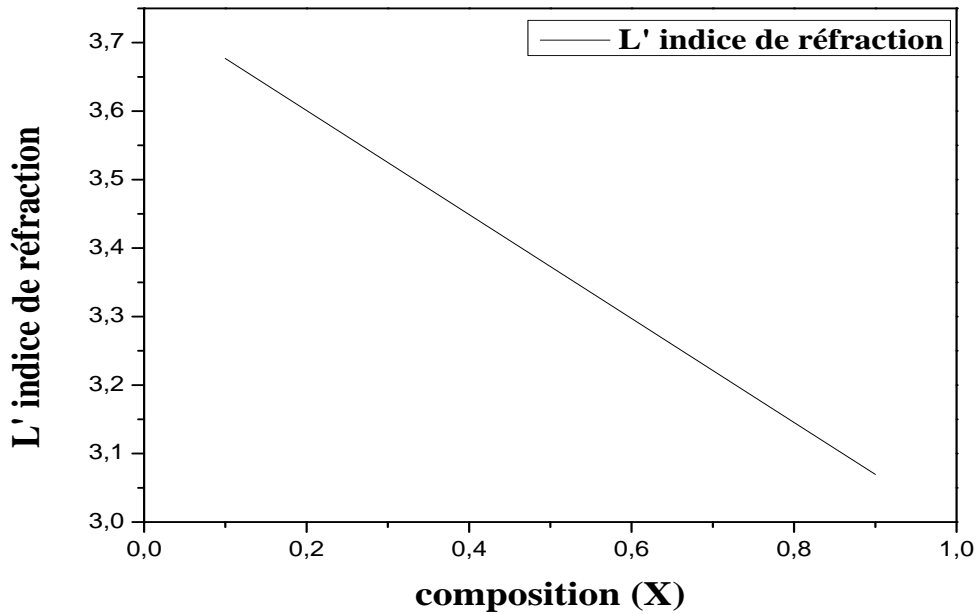


Figure III-15 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x .

La relation de Reddy et Anjaneyulu:

$$E_g e^n = 36.3$$

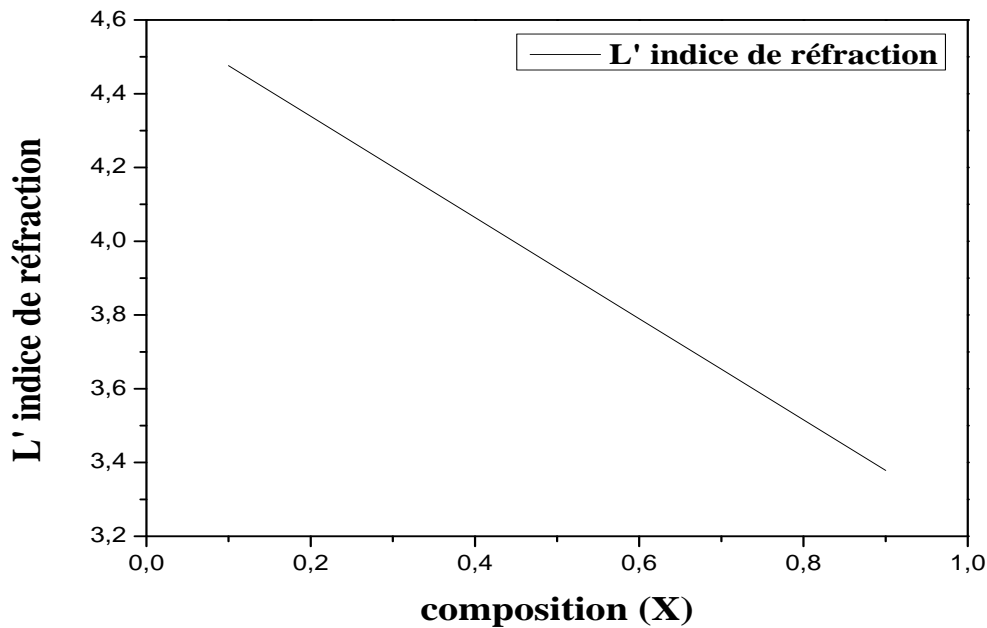


Figure III-16 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x .

La relation de Ravindra :

$$n = 4.16 - 0.85 E_g$$

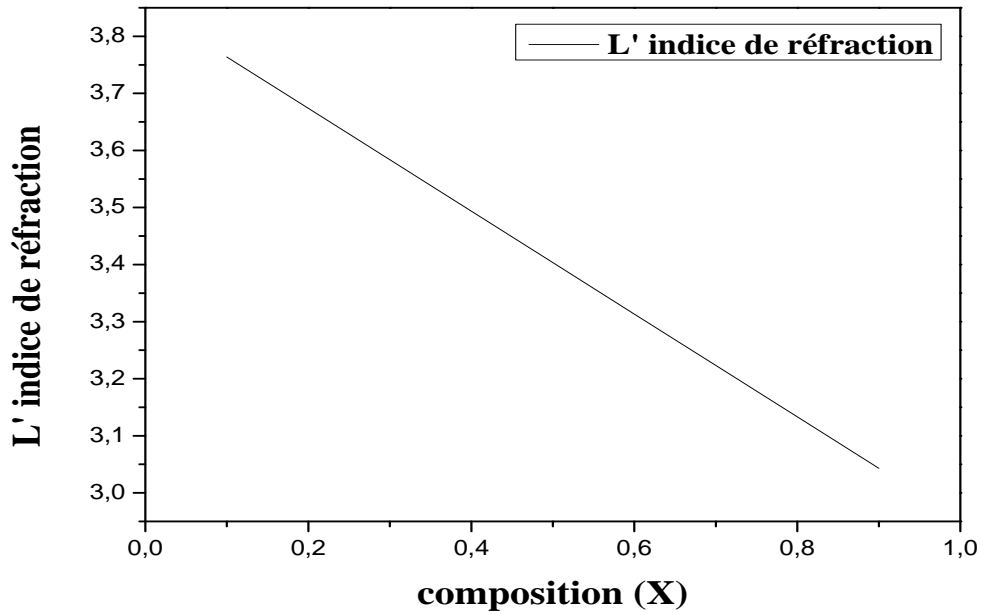


Figure III-17 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x .

Calcul direct a partir de la valeur de l'énergie du gap du composé ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$

Modèle atomique:

$$E_g n^4 = k \quad \text{et} \quad k=108 \text{ eV}$$

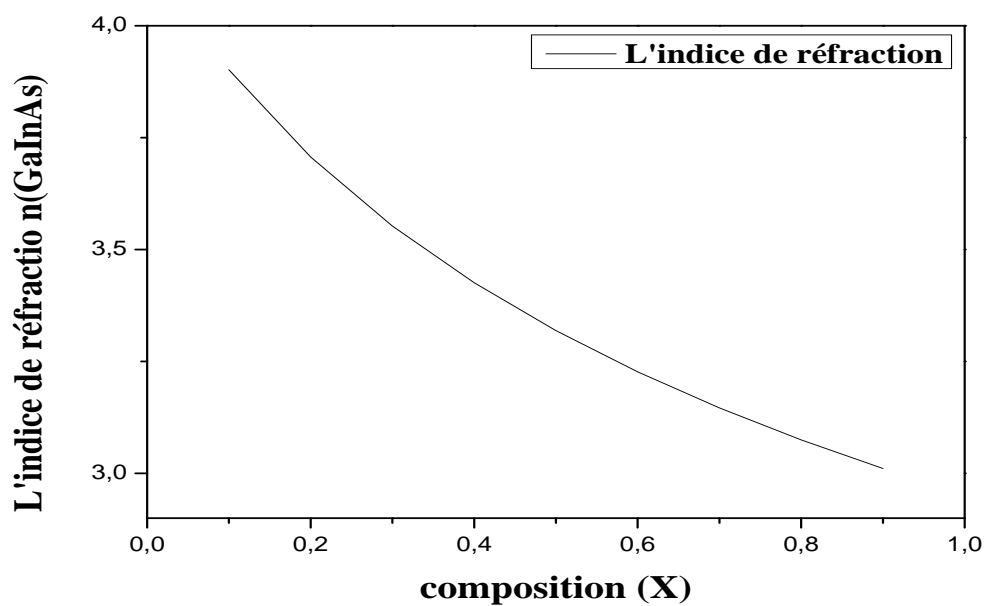


Figure III-18 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x.

Ravindra :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad \alpha=4.084 \text{ et } \beta = -0.62eV^{-1}$$

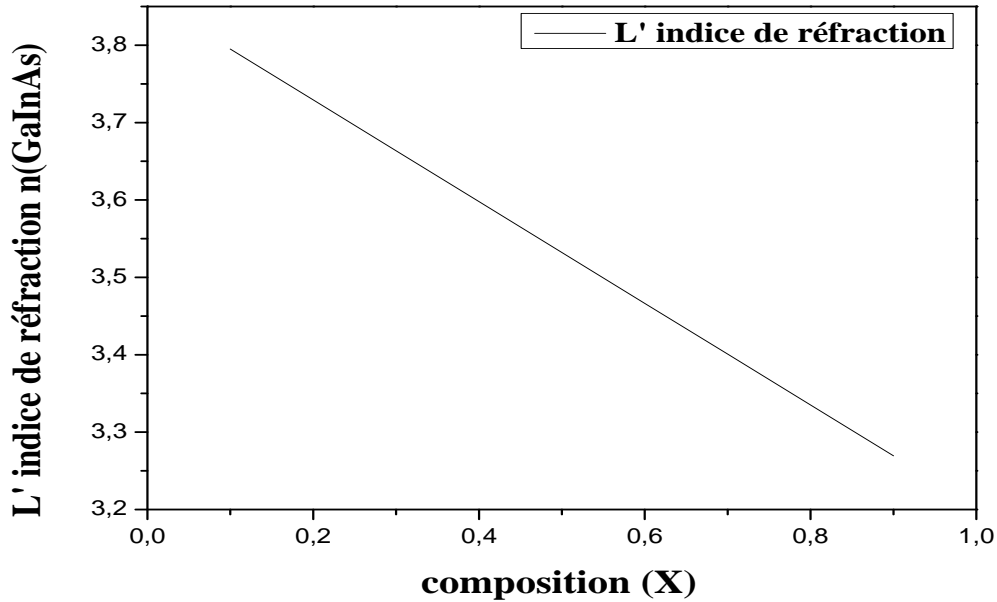


Figure III-19 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x.

Hervé et Vandamme :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_{g+B}}\right)^2}$$

$A = 13.6eV, B = 3.4eV$

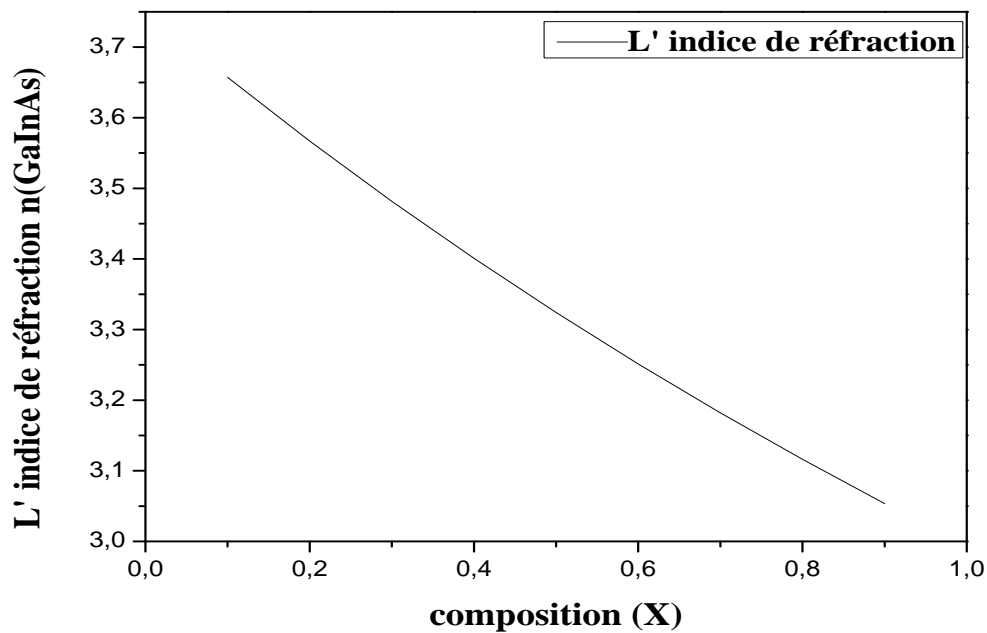


Figure III-20 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x.

La relation de Reddy et Anjaneyulu:

$$E_g e^n = 36.3$$

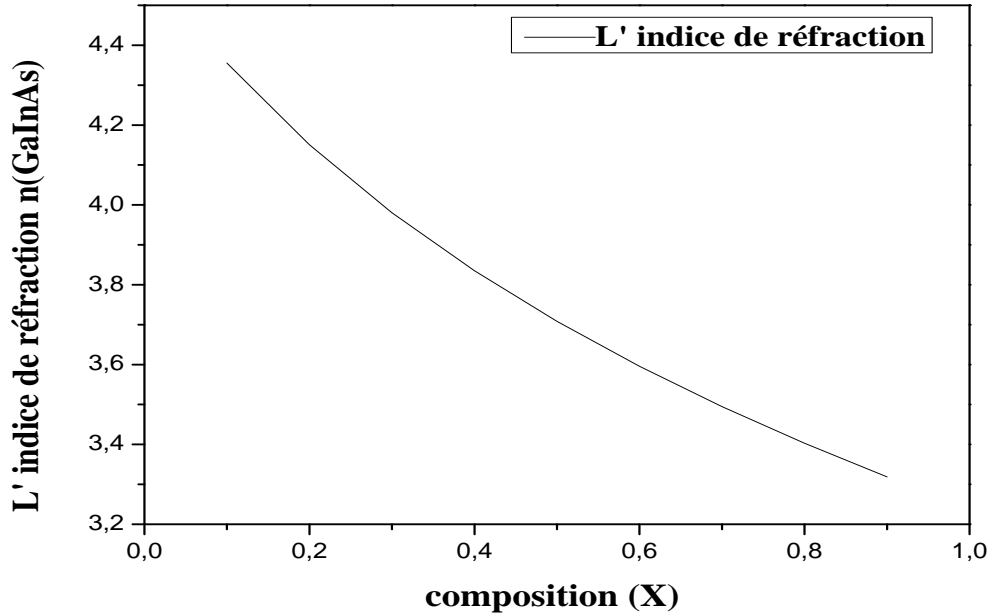


Figure III-21 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x.

La relation de Ravindra :

$$n = 4.16 - 0.85 E_g$$

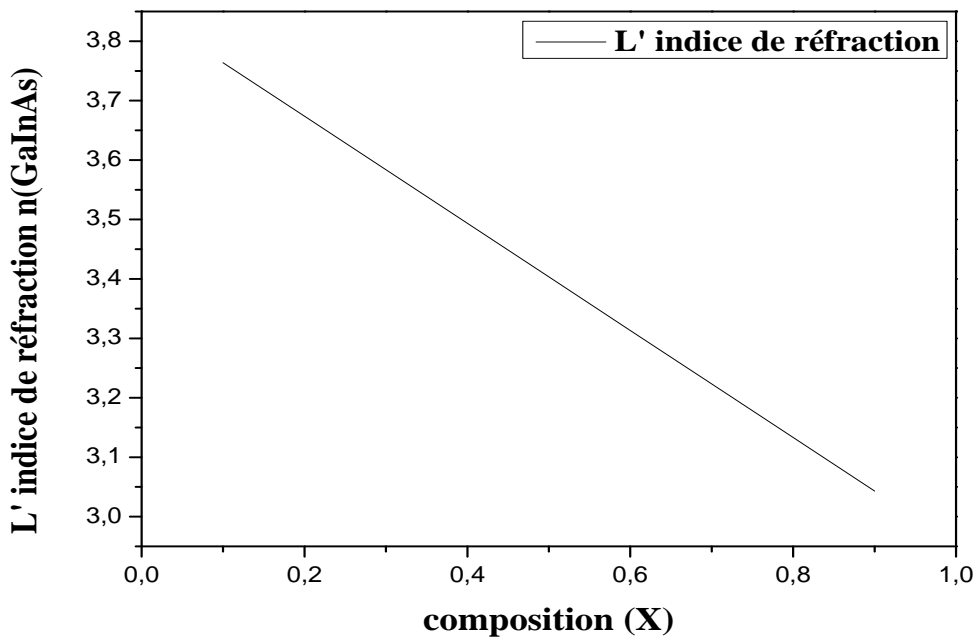


Figure III-22 : La variation de l' indice de réfraction en fonction de la composition x.

III-5 Constante diélectrique de haute fréquence :

Basé sur les valeurs calculées de l'indice de réfraction n obtenu à partir différentes modèles utilisés, la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} a été estimée en utilisant l'expression suivante :

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \quad (\text{II-22})$$

La variation de la constante ϵ_{∞} pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la composition n , calculées à partir de différents modèles, est présentée dans les figures : III-23, III-24, III-25, III-26, III-27.

Nous observons que ϵ_{∞} varie de façon monotone et diminue en allant de la composition $x=0$ à $x=1$. Ce comportement est qualitativement semblable à celui de l'indice de réfraction en fonction de la composition x . cela n'est pas surprenant, étant donné que ϵ_{∞} est obtenu à partir de la relation (II-22).

La diminution de la constante diélectrique de haute fréquence lorsque on augmente la composition x indique que le matériau étudié $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ devient un bon isolant.

Modèle atomique:

$$E_g n^4 = k \quad \text{et} \quad k=108 \text{ eV}$$

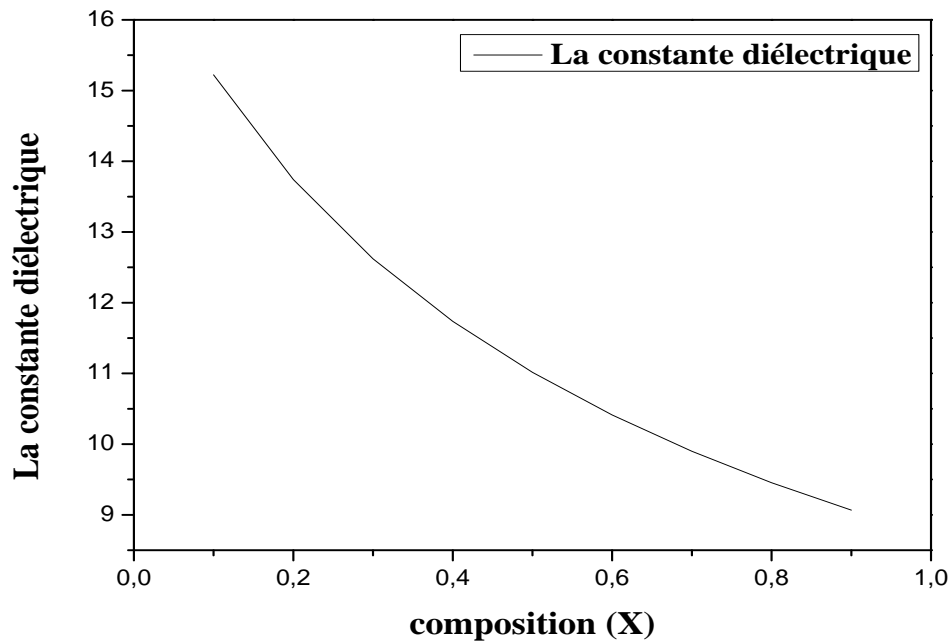


Figure III-23 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x.

Ravindra :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad \alpha=4.084 \quad \text{et} \quad \beta = -0.62 \text{ eV}^{-1}$$

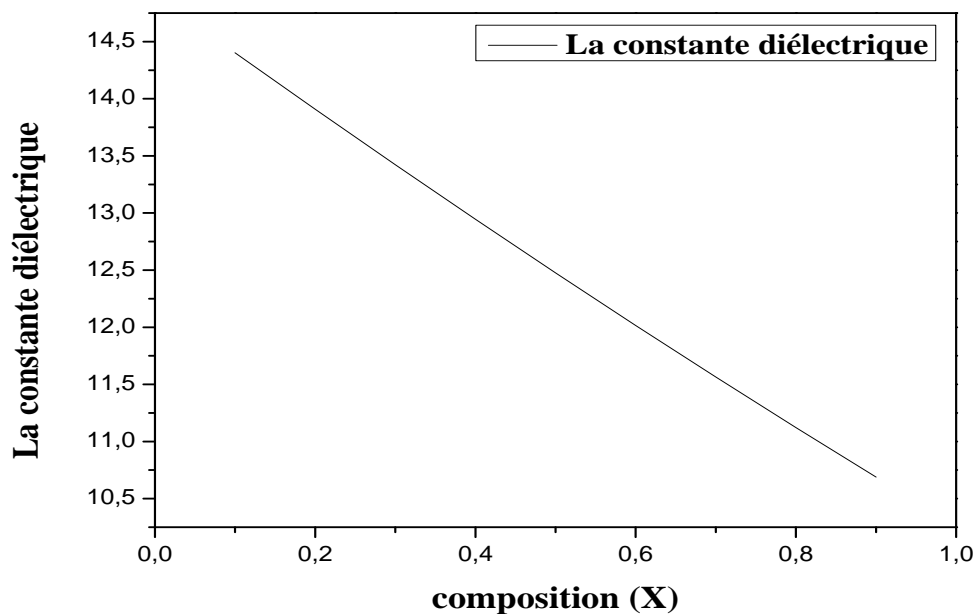


Figure III-24 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x.

Hervé et Vandamme :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_{g+B}}\right)^2}$$

$A = 13.6eV, B = 3.4eV$

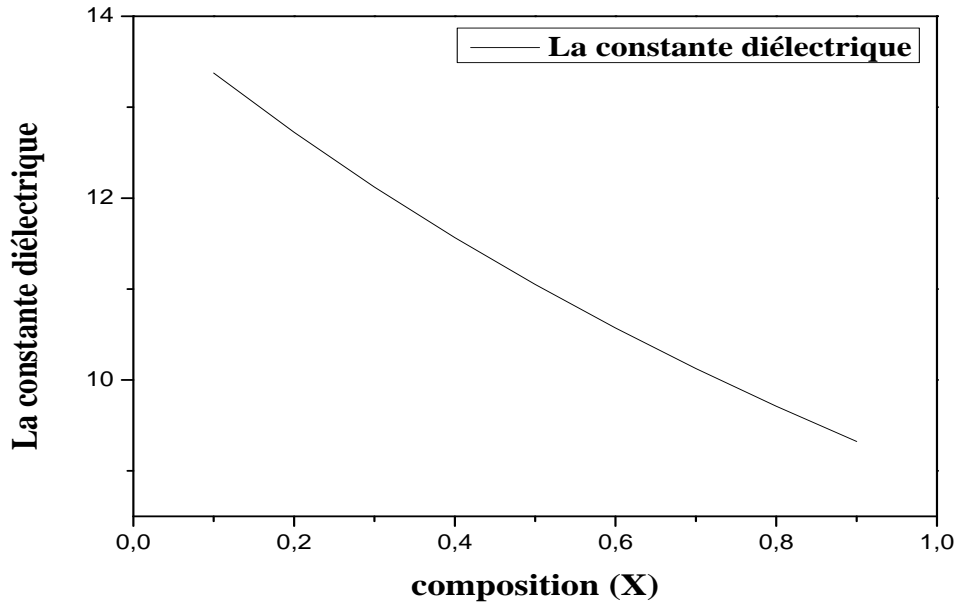


Figure III-25 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x.

La relation de Reddy et Anjaneyulu:

$$E_g e^n = 36.3$$

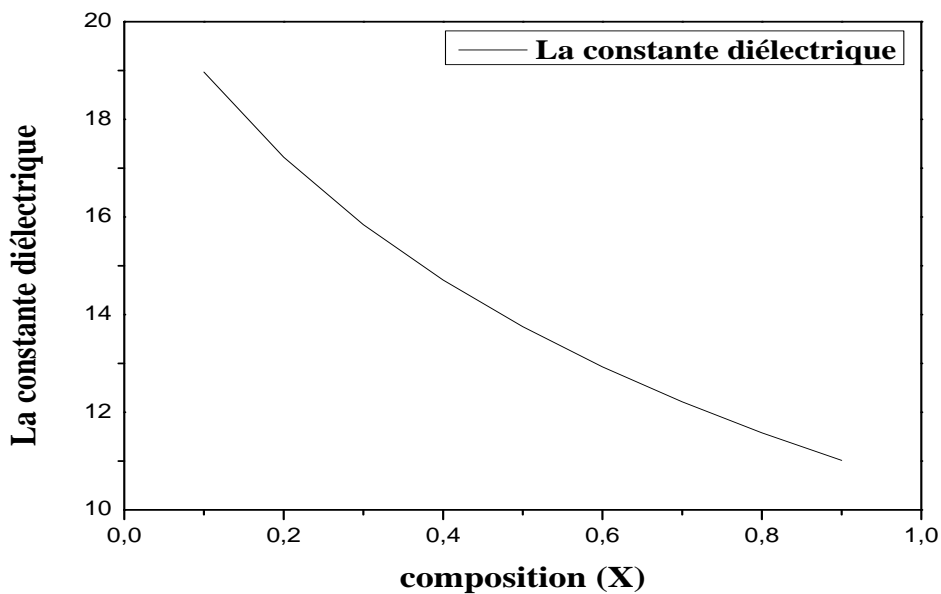


Figure III-26 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x.

La relation de Ravindra :

$$n = 4.16 - 0.85 E_g$$

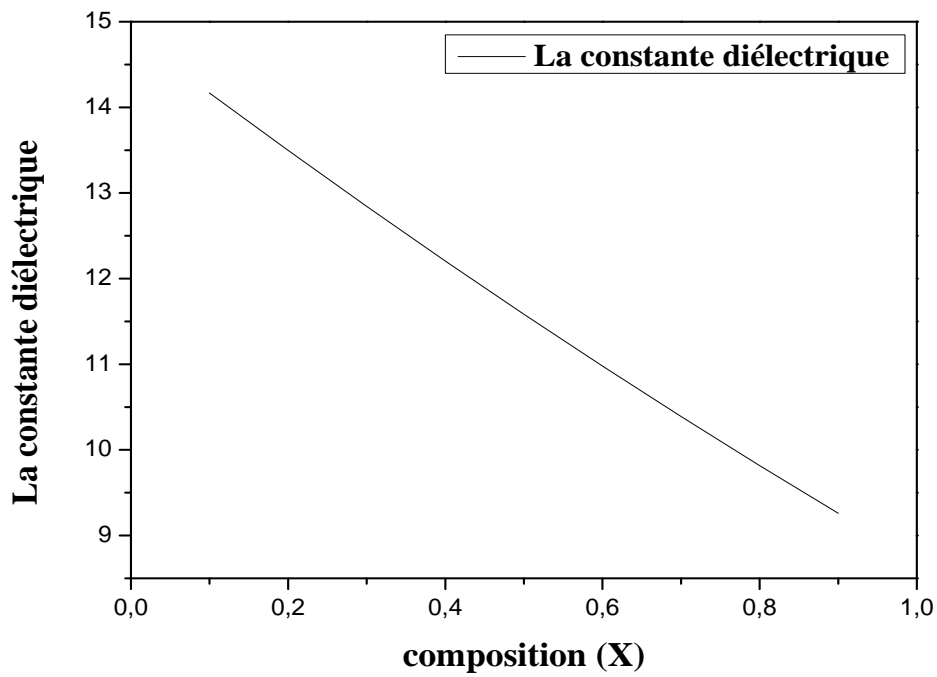


Figure III-27 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x.

III-6 Constante diélectrique statique :

Nous avons également calculé la constante diélectrique statique ε_0 en utilisons la relation suivante :

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_\infty - 1} = 1 + g \quad (\text{II-23})$$

Ou g est donnée par la formule :

$$g = \frac{\alpha_p^2(1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{II-24})$$

Avec α_p est la polarité qui a été estimée à partir de la définition de Vogl [33] comme suit :

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{II-25})$$

Ou $V_S(3)$ et $V_A(3)$ représente les facteurs de formes pseudopotential symétrique et antisymétrique respectivement.

La variation de la constante diélectrique statique ε_0 en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles est montrée sur les figures III-28, III-29, III-30, III-31, III-32.

On note que la valeur de ε_0 dépend du modèle utilisée, quoique il existe une différence quantitative entre les différents modèles. Nous observons aussi qu'il n'y a pas une différence qualitative entre ces modèles. Quelque soit le modèle utilisé, le comportement de ε_0 en fonction de la composition x est le même, ou on note une diminution de la constante diélectrique statique avec l'augmentation de la composition x suggérant ainsi que le matériau semi-conducteur devient un bon isolant.

D'autre part les tendances de ε_∞ et ε_0 indiquent que le stockage et la disparition l'énergie électrique et magnétique dans le matériau étudié dépend fortement de la composition x dans l'alliage.

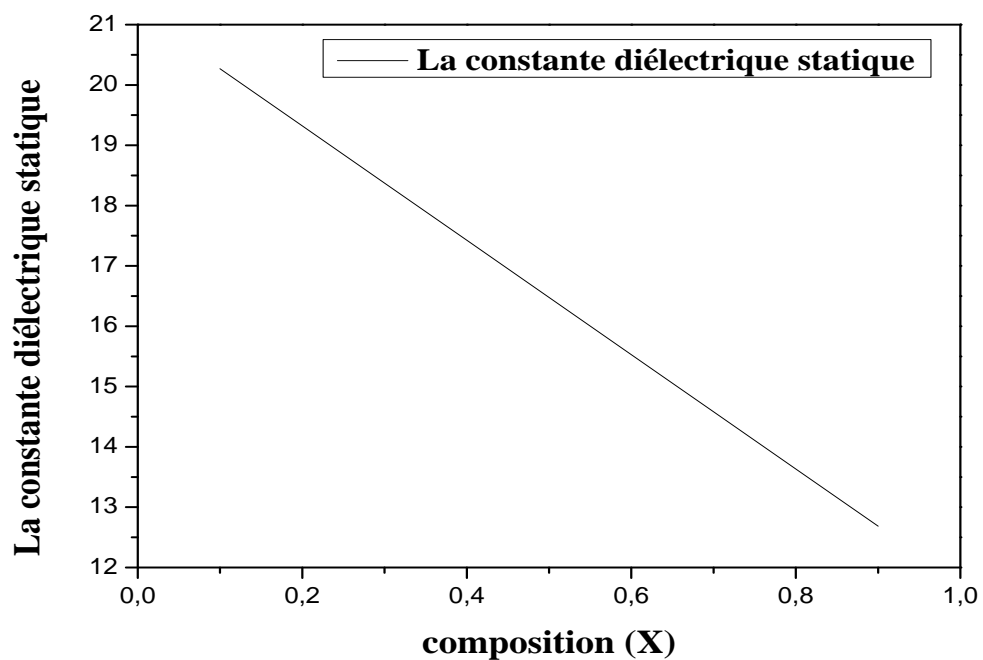


Figure III-28 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x.

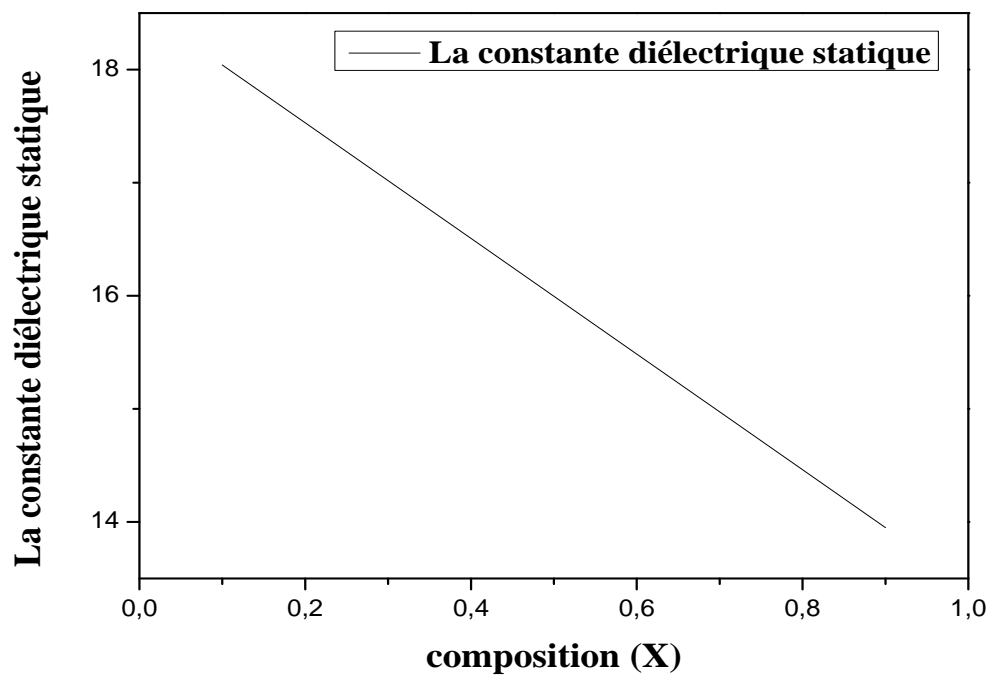


Figure III-29 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x.

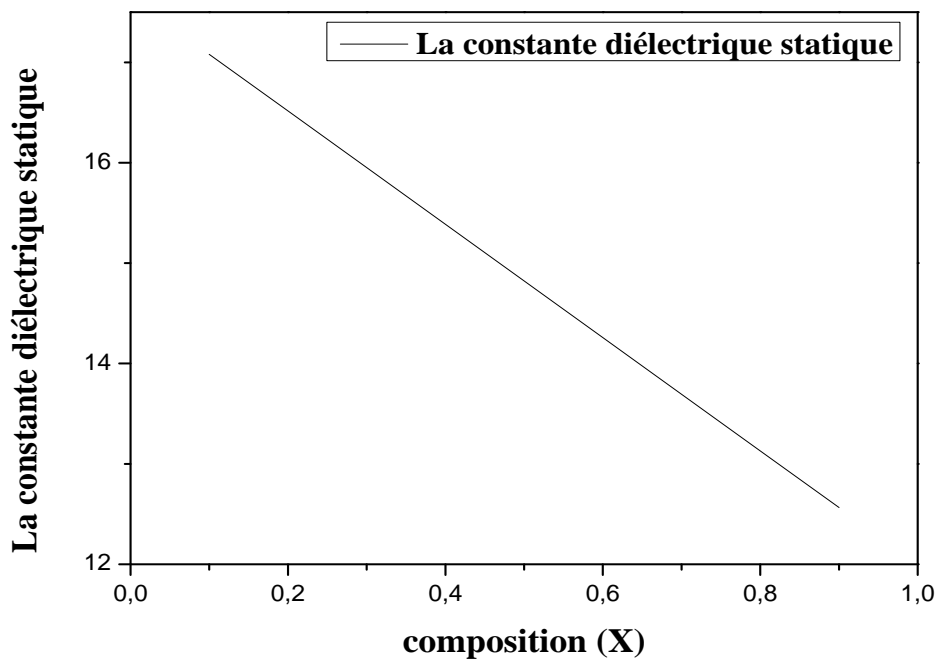


Figure III-30 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x.

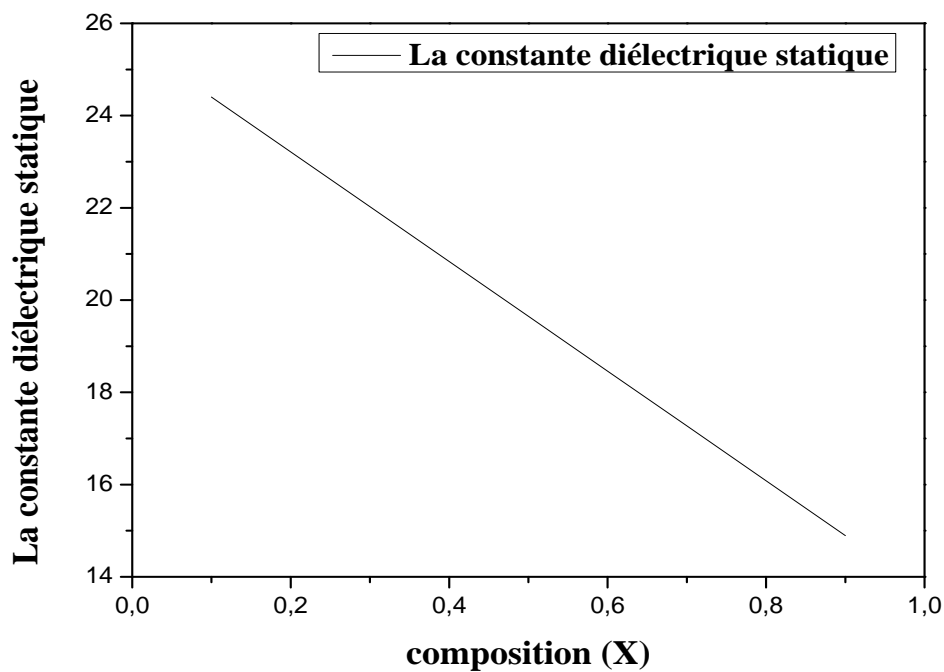


Figure III-31 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x.

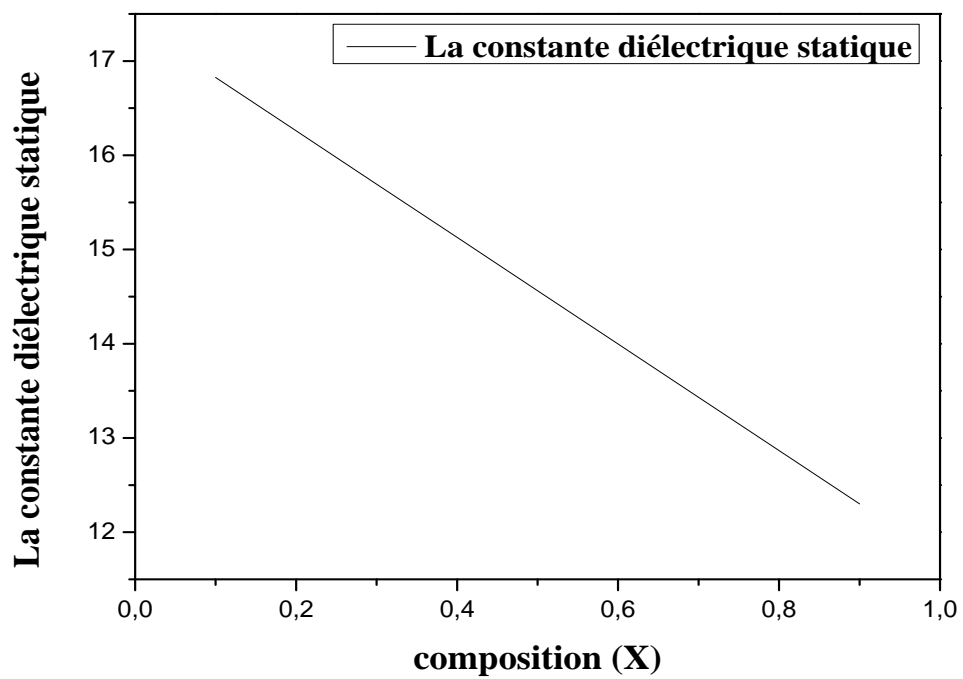


Figure III-32 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x .



Conclusion générale

Conclusion générale

En conclusion, dans ce présent travail nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques des semi-conducteurs GaAs et InAs ainsi que leur alliage ternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ dans la phase zinc-blende. Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la concentration x du gallium allant de 0 à 1.

Les principaux résultats de notre investigation se résument ainsi :

- ▶ l'incorporation d'une quantité de gallium dans l'InAs perturbe leurs structures électroniques. Toutes les bandes de valence et de conduction sont affectées. Ces premières semblent plus perturbées par la présence de gallium que les bandes de conduction.
- ▶ le gap énergétique directe $E(\Gamma-\Gamma)$ augmente non-linéairement lorsque la concentration du gallium augmente.
- ▶ le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ est à gap direct pour toutes les concentrations du gallium allant de 0 à 1.
- ▶ l'indice de réfraction a été calculé selon cinq modèles existant. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x pour l'alliage semi-conducteur ternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ a montré une diminution de ce dernier en allant de 0 à 1.
- ▶ la constante diélectrique de haute fréquence diminue lorsqu'on augmente la concentration du gallium suggérant ainsi que le matériau étudié devient un bon isolant.
- ▶ la constante diélectrique statique diminue lorsque la concentration du Ga augmente. Cela indique que la capacité de stocker de l'énergie électrique potentielle sous l'influence d'un champ électrique diminue.
- ▶ deux approches ont été utilisées, à savoir la loi de Vegard et celle de l'interpolation afin de déterminer les propriétés optiques et diélectriques du matériau étudié. Généralement, les deux approches donnent des résultats un peu différents.

Le contrôle de ces paramètres en faisant varier la composition x pour l'alliage ternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ est d'importance capitale pour la conception de nouveaux dispositifs optoelectroniques.

Bibliographie :

- [1] Benatmane Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V. Mémoire de magister Université de Batna, (2011).
- [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] J. C. Phillips, Rev. Mod. Phys. 42, 317 (1970).
- [6] R. Castagné et all. Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [7] Henry Mathieu. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Masson, (1987).
- [8] Gerald Bastard, Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, Les éditions de physique, paris, (1988).
- [9] John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors, Cambridge University Press,(1998).
- [10] CAPPY. A, Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ : structures conventionnelles et à gaz d'électrons, Thèse d'état, Université de Lille France, (1986).
- [11] 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.
- [12] B.de Cremoux, Les diodes laser ;des principes aux développements récents.
- [13] Bounab Sabrina, Etude des état électronique et positronique de l'alliage AlInN

dans la phase Zinc-Blinde, (2002).

[14] Berghout Abid, Etude abinitio de composés et d'alliages ternaires II-VI à base de béryllium, (2007).

[15] M. L .Cohen, J .R .Chelikowsky, Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences (1989).

[16] Chalmers, Structure et Propriétés des Solides, Ed Masson, Paris, New York, (1987).

[17] F. Abelés, Optical Properties of Solids, North-Holland, Pblishing Company, (1972).

[18] Badr-Eddine Nabil BRAHMI, Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc, (2013).

[19] T.S. Moss, "Relation between The Refractive Index and Energy Gap of Semiconductors", Physica status solidi. B, Volume 131, pp 415-427, 1985.

[20] C. Kittel, Physique de l'état solide, Ed. Dunod Université, (1983).

[21] D. Dangoisse, D. Hennequin et V. Zehnlé-Dhaoui, Les lasers, Dunod, 2004.

[22] Henry Mathieu. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques,4 Ed Masson, (1998).

[23] J. Boucher, J.Simonne, Principe et Fonction de l'électronique Intégrée, Ed Cepadues, (1977).

[24] S. Yu .Davydov, S.K .Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947 and references cited therein.

[25] P. Vogl, J. phys. C 11 (1978) 251.

[26] G. A. Samara, phys. Rev. B 27 (1983) 3494.

[27] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.V.R. Rao, Infrared Phys, Vol.34, No.1, (1993).

[28] V. P. Gupta, N. M. Ravinda, Phys. Stat. Sol. (B) 100 (1980) 715.

[29] Pr.Welter, Matériaux Diélectriques.

[30] G.G. Raju, Dielectrics in Electric Fields, Marcel Dekker Inc., 2003.

- [31] N.M.Ravinda, S. Auluck, V.K.Srivastava, Phys. Stat.Sol. (b) 93 (1979) K 155.
- [32] P.J .L Hervé, L. K. J. Vandame, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [33] R.R. Reddy, S. Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. (b) 174 (1992) K91.
- [34] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21.
- [35] A. G. Milnes and D. L. Feucht, Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions, Academic Press, (1972).
- [36] ANDERSON. R. L., Experiment on Ge-GaAs hétérojonctions, solid state electronics, vol1.5, 1962, pp. 341-351.
- [37] PATILLON J. N., ANDRE J. P., propriétés de transport dans les hétérojonctions à base de composés III-V, Acta electronica, 28, 1988, pp15-26.
- [38] Francis Levy. Traité des matériaux. Physique et technologie des semiconducteurs. Presses polytechniques et universitaires Romandes(1995).

Resumé

Basé sur la méthode du pseudopotentiel empirique couplée a l'approximation du cristal virtuel, le présent travail est porté sur une étude théorique qui a été effectuée afin d'étudier les propriétés électroniques, optiques et diélectriques de l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$.

Nos résultats ont montré qu'en faisant varier la concentration de Ga de 0 à 1, notre l'alliage pourrait nous fournir de diverses possibilités pour l'obtention des bandes interdites souhaités, les indices de réfraction et les constantes diélectriques, nous permetd'avoir la possibilité de découvrir de nouveaux appareils avec des caractéristiques spéciales et de propriété optimum .

Abstract

Based on the empirical pseudopotential method under the virtual crystal approximation, the present work deals with a theoretical investigation that has been performed so as to study the electronic, optical and dielectric properties of the ternary system Ga_xIn_xAs . Our results showed that by varying the Ga concentration from 0 to 1, the alloy of interest could provide more diverse opportunities to obtain desired band gaps, refractive indices and dielectric constants, which spans up the possibility of discovering new electronic devices with special features and properties.

الملخص

قمنا في هذه الاطروحة بدراسة الخصائص البصرية والالكترونية و العازلة للمركب الثلاثي Ga_xIn_xAs وذلك باستعمال طريقة شبه الكمون (الكمون الكاذب) مع ادماج تقريب البلورة الافتراضية . النتائج التي تحصلنا عليها مع التغيير في تركيز Ga من 0 الى 1 حيث المركب الذي تم دراسته يمكن ان يعطينا عدة احتمالات من أجل تحديد العصب الطاقوية الممنوعة المطلوبة. مؤشرات الانكسار و ثوابت العوازل تسمح بإمكانية اكتشاف أجهزة جديدة مع سمات خاصة ذو خصائص عالية.