



N° d'ordre :...../2016

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

Université Mohamed Boudiaf - 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

Bouaoukaz Soumia

THEME

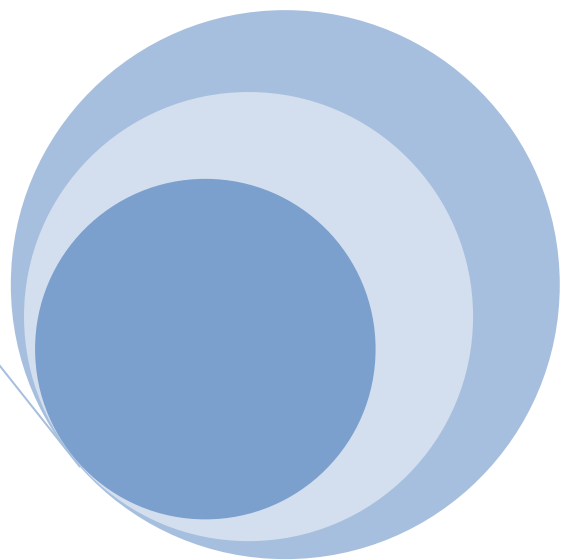
Dépendance en composition des propriétés physiques des alliages semi-conducteurs GaP_xSb_{1-x} et $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.

Soutenu le : 05/06/2016

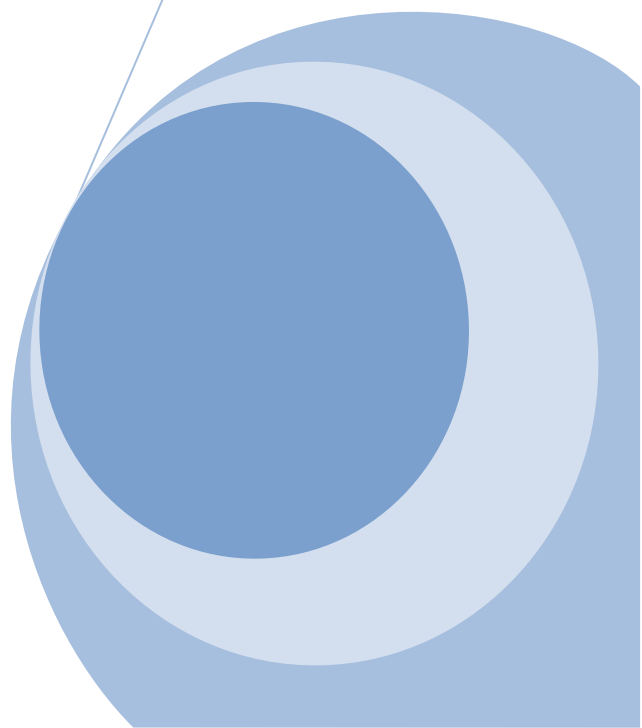
Devant le jury composé de :

| | | |
|-------------|----------------------|------------|
| N.Bouarissa | Prof Univ. de M'sila | Président |
| M.Boucenna | Prof Univ. de M'sila | Rapporteur |
| H.Baaziz | Prof Univ. de M'sila | Examineur |

Promotion Juin 2016



Remerciements



Remerciements

La description de tout travail réalisé débute par des remerciements toutefois, il paraît difficile de remercier en seulement quelques lignes et comme je le voudrais toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce mémoire.

*Je tiens à remercier ALLAH qui m'a donné la force de faire ce modeste travail .je suis heureuse de témoigner de ma profonde estime a mon encadreur **Dr.Boucenna Mustapha**, Je lui suis très reconnaissant de m'avoir fait bénéficier de ses compétences très scientifiques et d'avoir proposé et dirigé ce travail.*

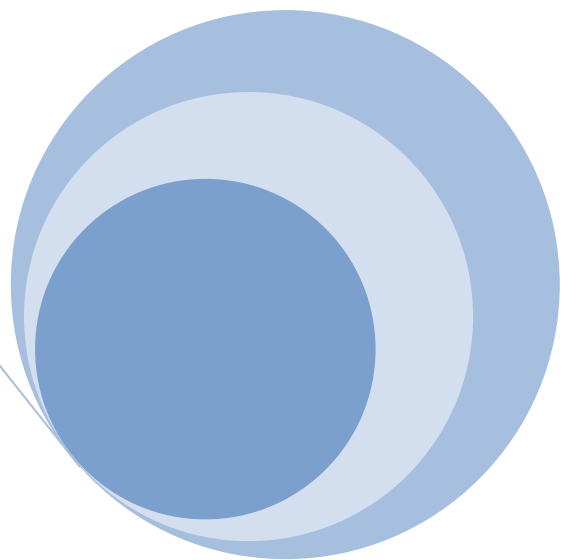
Il a été très disponible malgré ses charges, il a toujours pris le temps de répondre très clairement à mes questions. Qu'il trouve ici toute ma gratitude.

*Je remercie très sincèrement le professeur **Bouarissa Nadir** pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury de ce mémoire.*

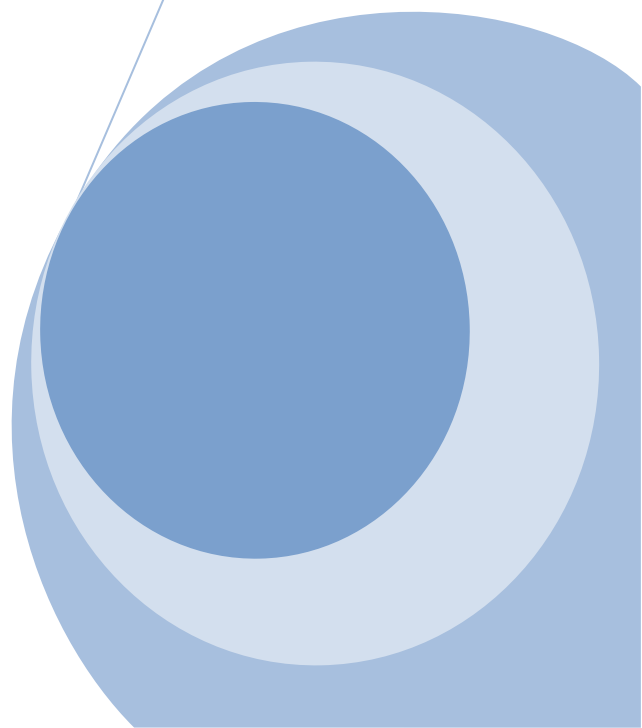
*Je suis très reconnaissante au professeur **Baaziz Hakim** d'avoir accepté d'examiner ce travail et de me faire l'honneur de participer au jury.*

Mes remerciements vont également à tous les professeurs du département de physique.

Je ne saurais aussi oublier de citer mes amis et mes collègues, ainsi que tous ceux qui ont participé de loin ou de près pour l'élaboration de ce mémoire.



Dédicace



Dédicace

Je dédie ce modeste travail

A mon chère père qui ma soutenu jusqu'au bout

A ma chère mère que je lui dois tous

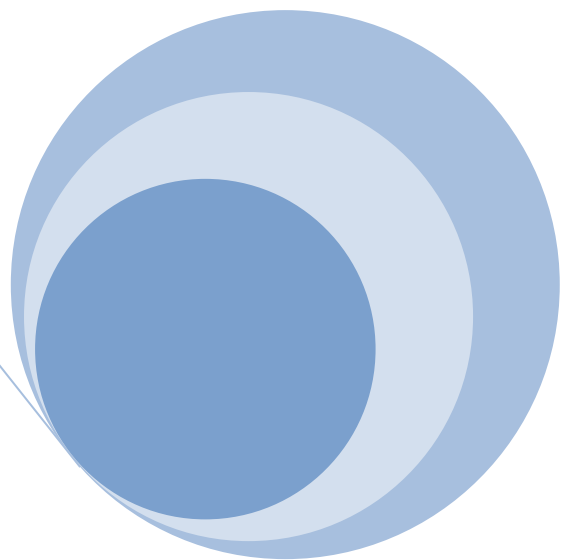
A mes frères et mon seul sœur Insaf

A toute la famille BOUAOUKAZ

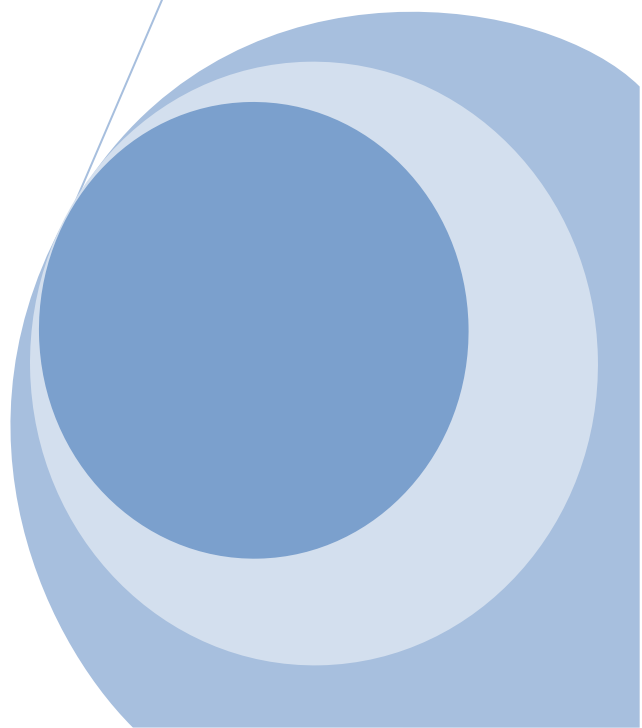
A toute la famille BEN LOGAB et à tous mes amies

A tous qui m'ont aidé de près ou de loin

Bouaoukaz Soumia



Sommaire



Sommaire

Sommaire

| | |
|----------------------------|-----|
| Table des matières..... | i |
| Liste des figures..... | iv |
| Liste des tableaux..... | vi |
| Introduction générale..... | vii |

Chapitre I

Les semi-conducteurs et leurs propriétés physiques

| | |
|--|----|
| I-1 Introduction..... | 02 |
| I-2 Définition d'un semi-conducteur..... | 02 |
| I-3 Différents types de semi conducteurs..... | 03 |
| I-3-1 semi conducteur intrinsèque..... | 03 |
| I-3-2 semi conducteur extrinsèque..... | 03 |
| I-4 Semi-conducteur III-V..... | 03 |
| I-5 La structure cristalline..... | 04 |
| I-6 la zone de Brillouin..... | 06 |
| I-6-1 La première zone de Brillouin..... | 06 |
| I-6-1-1 Les points de haute symétrie..... | 06 |
| I-6-1-2 Les lignes de haute symétrie..... | 07 |
| I-7 Les propriétés physiques des semi-conducteurs..... | 07 |

Sommaire

| | |
|---|----|
| I-7-1 Les propriétés structurales des semi-conducteur..... | 07 |
| I-7-1-1 Les semi-conducteurs cristallins..... | 07 |
| I-7-1-1-1 La constante de réseau..... | 08 |
| I-7-1-2 Les semi conducteurs non cristallins..... | 09 |
| I-7-2 Les propriétés optiques..... | 09 |
| I-7-2-1 L'absorption fondamentale..... | 09 |
| I-7-2-2 L'émission spontanée..... | 10 |
| I-7-2-3 L'émission stimulée..... | 11 |
| I-7-2-4 L'indice de réfraction..... | 12 |
| I-7-3 Les propriétés électroniques..... | 12 |
| I-7-3-1 Bandes d'énergie..... | 12 |
| I-7-3-2 Gap énergétique..... | 13 |
| I-8 Les alliages des semi conducteurs III-V..... | 14 |
| I-8-1 Les composés binaires semi-conducteurs..... | 14 |
| I-8-2 Les alliages semi-conducteurs..... | 15 |
| I-8-3 L'approximation du cristal virtuel(VCA)..... | 16 |
| I-8-3-1 Le cas d'un alliage ternaire..... | 16 |
| I-8-3-2 Le cas d'un alliage quaternaire..... | 16 |
| I-9 Méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs..... | 17 |
| I-9-1 L'Hamiltonien total du cristal..... | 18 |

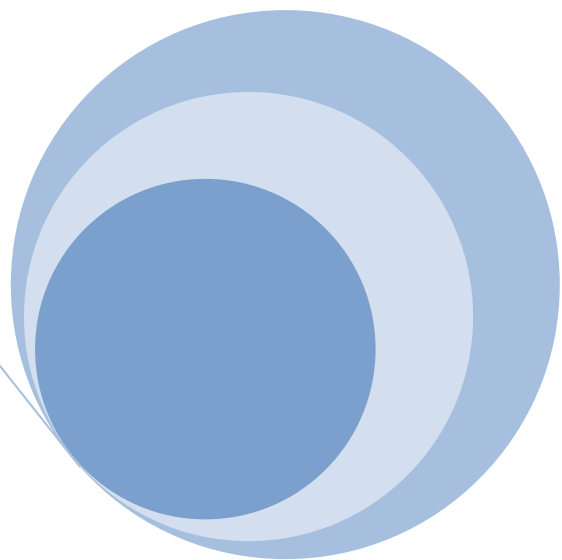
Sommaire

| | |
|--|----|
| I-9-2 L'approximation adiabatique..... | 18 |
| I-9-3 L'approximation de Hartree-fock..... | 19 |
| I-9-4 L'approximation du pseudo-potentiel..... | 20 |
| I-9-4-1 Méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M)..... | 20 |

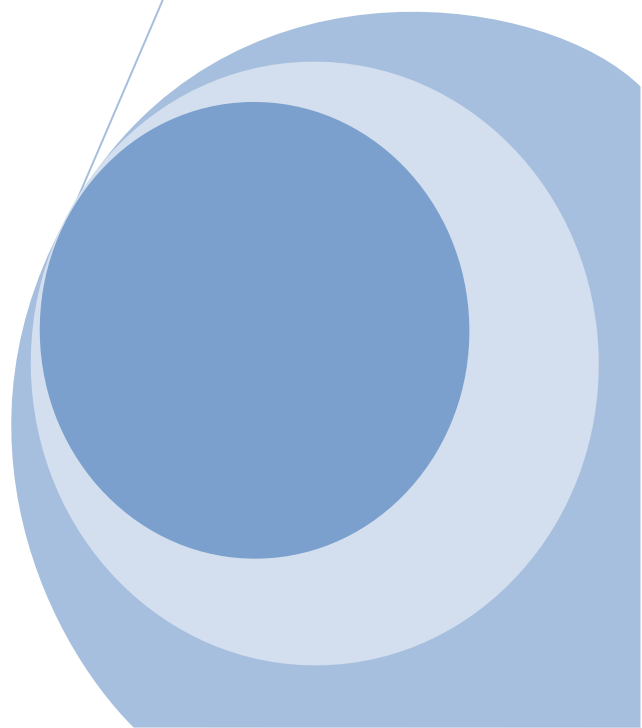
Chapitre II

Résultats et discussion

| | |
|--|----|
| II-1 Introduction..... | 22 |
| II-2 Les propriétés physiques des semi-conducteurs..... | 22 |
| II-2-1 Les propriétés structurales..... | 22 |
| II-2-1-1 Les alliages Ternaires $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ | 22 |
| II-2-1-2 Les alliages quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ | 27 |
| II-2-2 Les propriétés électroniques..... | 31 |
| II-2-2-1 Les alliages Ternaires $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ | 32 |
| II-2-2-2 Les alliages quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ | 34 |
| II-2-2-3 Structure de bandes d'énergie de GaP et GaSb..... | 38 |
| II-2-3 Les propriétés optiques (Indice de réfraction)..... | 40 |
| II-2-3-1 Les alliages ternaires $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ | 41 |
| II-2-3-2 Les alliages quaternaires..... | 43 |



Tables des figures



LISTE DES FIGURES

Figure I-1 : (a) La structure de zinc blende et (b) la première zone de Brillouin.....04

Figure I-2 : Structure cristalline Diamant et Zinc Blende.....08

Figure I-3 : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.....09

Figure I-4 : L'absorption fondamentale de la lumière par les porteurs.....10

Figure I-5 : L'émission spontanée.....11

Figure I-6 : L'émission stimulée.....12

Figure I-7 : Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.....13

Figure I-8 : Structure de bande d'un semi-conducteur.....14

Figure I-9 : Diagramme block de la méthode E.P.M locale.....21

Figure II-1 : La variation du paramètre de réseau a pour GaP_xSb_{1-x} en fonction de la composition x..... 24

Figure II-2 : Les modules de compressibilité GaP_xSb_{1-x} 26

Figure II-3 : La variation du le dérivé de le module de compressibilité en fonction de la composition x on P pour GaP_xSb_{1-x} 27

Figure II-4 : La variation du paramètre de réseau pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y} / InP$ en fonction de la composition y.....29

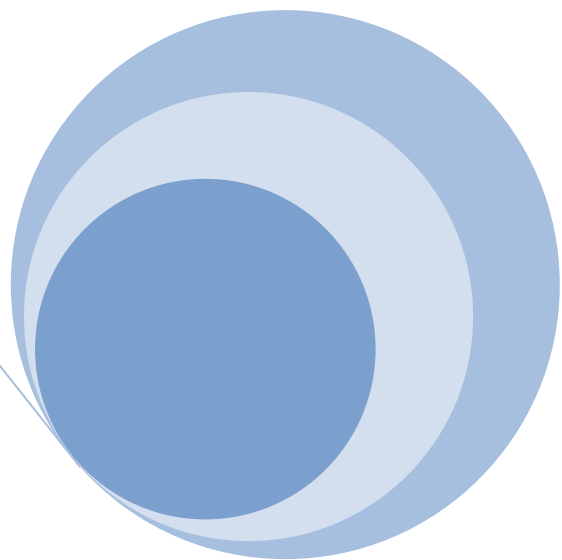
Figure II-5 : La variation du module de compressibilité de la composition y pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ 30

Figure II-6 : La variation du le dérivé de le module de compressibilité en fonction de la composition y on P pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ 32

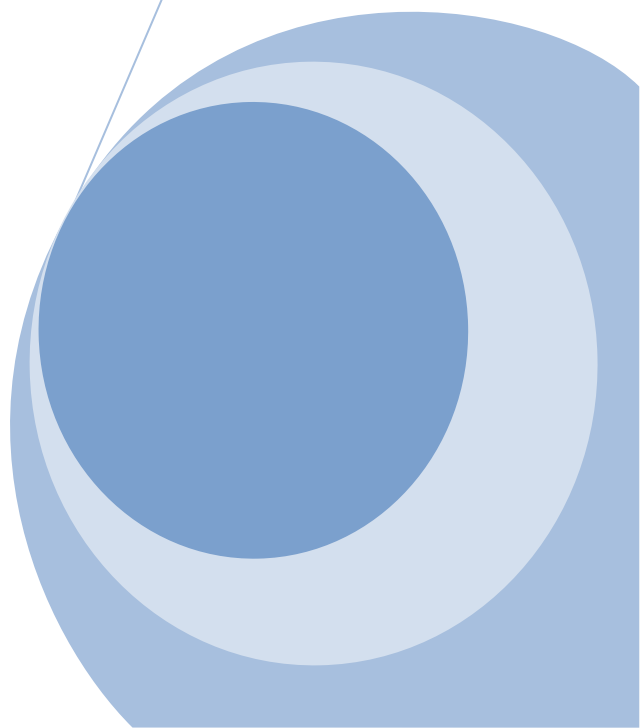
Liste des figures

| | |
|---|----|
| Figure II-7 : La variation du gap direct ($\Gamma - \Gamma$) et des gaps indirects ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) en fonction de la concentration x de l'alliage GaP_xSb_{1-x} | 34 |
| Figure II-8 : La variation du gap direct ($\Gamma - \Gamma$) et des gaps indirects ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) en fonction de la concentration y de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ | 38 |
| Figure II-9 : Structure de bande du composé $GaSb$ | 40 |
| Figure II-10 : Structure de bande du composé GaP | 40 |
| Figure II-11 : La structure de bande électronique de l'alliage semi-conducteur $GaP_{0.5}Sb_{0.5}$ | 41 |
| Figure II-12 : La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition...44 | |
| Figure II-13 : La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration y de l'alliage de semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ | 45 |

Liste des figures



Liste des tableaux



LISTE DES TABLEAUX

Tableau I-1: Extrait de la classification périodique des éléments.....07

Tableau I-2 Semi-conducteurs du type III-V et II-VI et ceux du groupe IV.....15

Tableau (II-1) : Les paramètres de réseau des alliages ternaires GaP_xSb_{1-x}24

Tableau (II-2) : Les modules de compressibilité de GaP_xSb_{1-x}25

Tableau (II-3) : Les dérivés du module de compressibilité de GaP_xSb_{1-x}27

Tableau (II-4) : Calcul du paramètre de réseau pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y} / InP$ en fonction de y.....29

Tableau II-5 : Les modules de compressibilité de $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$30

Tableau II-6 : Les dérivés du module de compressibilité de $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$31

Tableau II-7 : Les paramètres pseudo-potentiels du GaP_xSb_{1-x}33

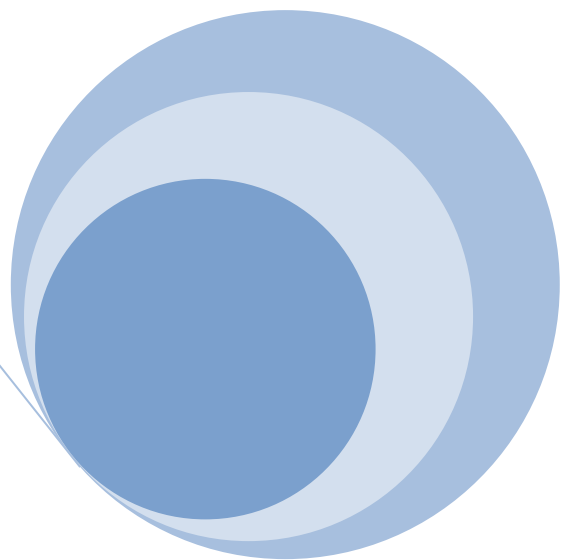
Tableau II-8 : Gaps d'énergie pour GaP et $GaSb$34

Tableau II-9 : Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés $GaAs, GaP, InAs$ et InP 36

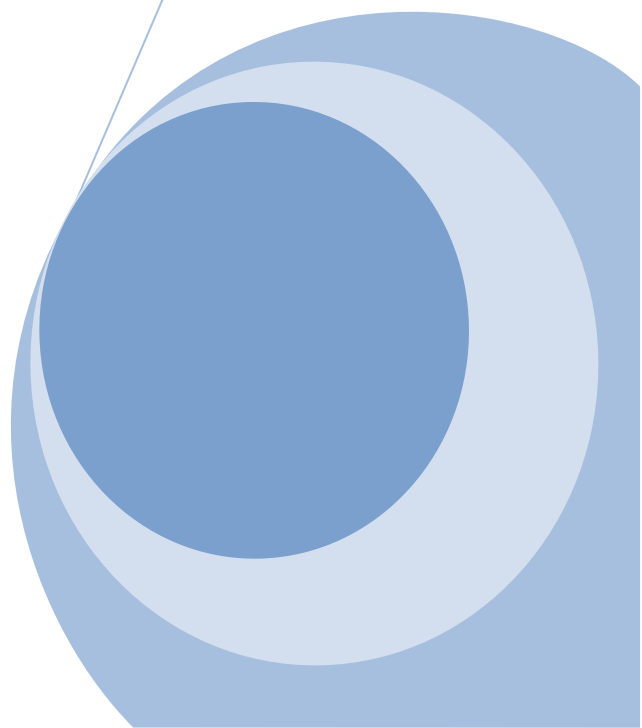
Tableau II-10 : Gaps d'énergie pour $GaAs$, GaP , $InAs$, InP37

Tableau II-11 : Calcul des indices de réfraction de l'alliage ternaire GaP_xSb_{1-x} en fonction de la composition x.....43

Tableau II-12 : Calcul de l'indice de réfraction (η) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y} / InP$ en fonction de la composition y.....45



Introduction générale



Introduction générale

Les semi-conducteurs sont des matériaux caractérisés par une conductivité électrique entre celles des métaux et des isolants. Généralement cette famille des matériaux se compose des semi-conducteurs élémentaires ou simples de groupe IV (Si, Ge, ...) du tableau périodique et des semi-conducteur binaires III-V (*GaP*, *GaAs*, *InP* et *InAs*) et II-VI (*ZnS*, *CdTe* ...) formés à partir de combinaisons des éléments du groupe II, III, V et VI.

Ces dernières années les semi-conducteurs III-V, ont attiré beaucoup d'attention à cause de leurs immenses applications technologiques. Ces derniers, offrent un énorme potentiel pour les dispositifs optoélectroniques. Ils sont de bons candidats à la réalisation des dispositifs émettant aussi bien dans le spectre visible que dans l'ultraviolet proche et l'ultraviolet lointain. Ils sont particulièrement utilisés dans la fabrication des diodes électroluminescentes vertes, bleues et violes ainsi que dans les diodes lasers bleues.

Les alliages des composés semi-conducteurs III-V, sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre du réseau, gap énergétique, indice de réfraction, constantes optiques et d'autres paramètres physiques qui peuvent être ajustés et contrôlés pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré.

Une connaissance précise de la structure de bandes du matériau étudié est nécessaire pour l'évaluation de son domaine d'application.

Les progrès réalisés dans les méthodes de calculs de la structure de bandes, surtout avec l'avènement de l'outil informatique, ainsi que le développement des appareils de mesure ont permis la compréhension des différentes propriétés physiques des alliages semi-conducteurs.

Quoique plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode de pseudo-potentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel est la méthode la plus simple et rapide, ainsi elle donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience.

Introduction générale

Notre travail de thèse est consacré à l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de ces semi-conducteurs de type III-V. L'objectif de notre investigation théorique est d'essayer de porter une certaine contribution pour une meilleure analyse et compréhension de ces diverses propriétés.

Pour mener cette étude nous avons utilisé la méthode du pseudo-potentiels empirique, qui est devenue aujourd'hui un outil de base pour le calcul des différents propriétés des systèmes les plus complexes. Elle est aussi un outil de choix pour la prédiction de nouveaux matériaux et parfois peut remplacer des expériences très coûteuses ou même irréalisables.

La connaissance du gap énergétique nous a permis de calculer le bowing ainsi que quelques paramètres optiques tels que l'indice de réfraction, de voir leur dépendance en concentration en utilisant;

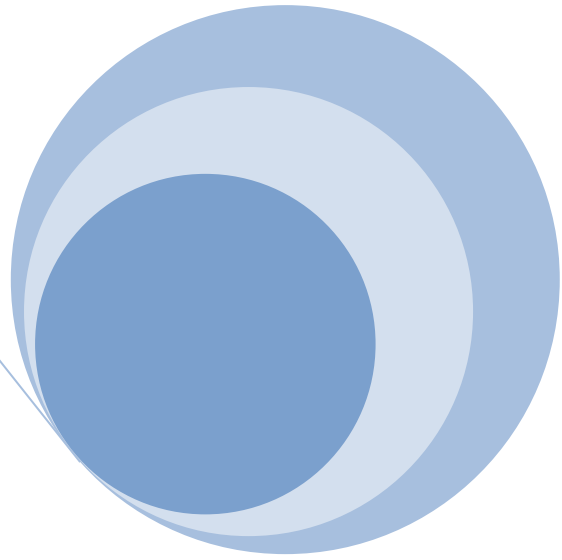
- La relation Moss basé sur le modèle atomique, le modèle linéaire de Ravindra et enfin la relation empirique de Hervé et Vandamme

Le manuscrite de cette thèse se compose de deux chapitre :

Après une introduction générale, le premier chapitre représente les semi-conducteurs et leurs propriétés physiques, à savoir les composés binaires, les ternaires et les quaternaires.

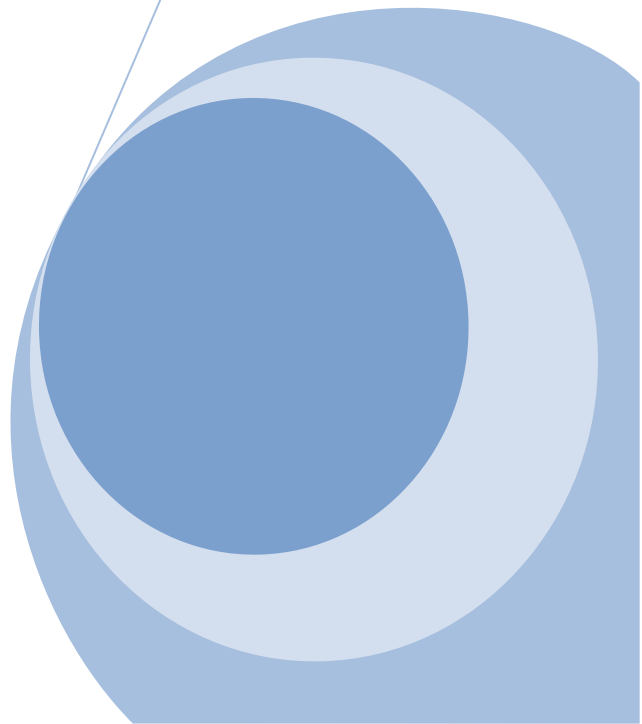
Nous présentons dans le deuxième et dernier chapitre les résultats obtenus dans notre étude.

Enfin, notre travail est achevé par une conclusion générale.



Chapitre I

Les semi-conducteurs et leurs
propriétés physiques



Chapitre I Les semi conducteurs et leurs propriétés physiques

I-1 Introduction

Les matériaux sont présentés dans de multiples domaines et prennent une place de plus en plus importante dans le système que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour.

On différencie trois types de matériaux : les isolants, les conducteurs et les semi-conducteurs, Ces derniers sont intermédiaires entre les métaux et les isolants : à $T = 0 \text{ K}$ un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semi-conducteurs varie entre $10^{-3} \Omega\text{cm}$ et $10^9 \Omega\text{cm}$, alors que celle des métaux est de l'ordre de $10^{-6} \Omega\text{cm}$ et celle des isolants peut atteindre $10^{22} \Omega\text{cm}$. Dans un semi-conducteur il existe deux types de conceptions : la conduction par électrons et la conduction par trou. Lorsque dans un cristal certaines liaisons entre atomes se cassent, les électrons sont libres de se déplacer. L'emplacement de la liaison cassée est appelé trou. Sous l'effet du champ électrique les électrons se déplacent dans le sens inverse du champ et les trous se déplacent dans le sens de champ [1].

L'étude du fonctionnement des composants électroniques passe par une maîtrise préalable des phénomènes physiques régissant les propriétés des électrons dans le semi-conducteur, il est par conséquent nécessaire de préciser les propriétés structurales, optiques et électroniques de ces semi-conducteurs, ces propriétés conditionnent les caractéristiques optiques et électriques de ces composants électroniques [2].

I-2 Définition d'un semi-conducteur :

Les semi-conducteurs sont des corps dont la bande interdite est assez étroite ($\approx 1\text{eV}$) pour que, sous l'action d'une agitation thermique, des électrons puissent passer de la bande de valence à la bande de conduction. La conductivité croît donc avec la température [3].

I-3 Différents types de semi conducteurs :

I-3-1 semi conducteur intrinsèque :

Un semi conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous.

Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour 10^{13} atomes de l'élément semi conducteur).

I-3-2 semi conducteur extrinsèque :

Un semi conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semi conducteur intrinsèque (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semi conducteur). Selon la nature des impuretés il existe deux types des semi conducteur : type n et type p.

Type n: Considérons par exemple les semi conducteurs tétravalents tels que Si ou Ge. Ils cristallisent dans une structure où chaque atome est relié à quatre atomes voisins par des liaisons covalentes. Introduisons un atome ayant cinq électrons de valence (phosphore, arsenic antimoine ...). Il prend la place d'un atome du cristal. Parmi les électrons de l'impureté, quatre participeront aux liaisons avec les voisins et le cinquième restera célibataire. L'atome d'impureté est associé à un niveau d'énergie appelés niveau donneur qui situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semi conducteur est dit de type n.

Type p: Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore aluminium ou galium). Celui-ci ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semi-conducteur est dit de type p [4].

I-4 Semi-conducteur III-V :

On distingue les semi-conducteurs de type III-V qui sont formés de l'association d'un élément de la III colonne et d'un élément de la V colonne, à partir de la classification périodique de Mendeleïev de nombreux composés binaires, ternaire ou quaternaire peuvent être réalisés selon les éléments qui ont formés. Le tableau (I-1) regroupe un

extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique) [5].

| <i>III</i> | <i>IV</i> | <i>V</i> |
|--------------------|--------------------|--------------------|
| $_{10,81}^{5}B$ | $_{12,01}^{6}C$ | $_{14,01}^{7}N$ |
| $_{26,98}^{13}Al$ | $_{28,09}^{14}Si$ | $_{30,97}^{15}P$ |
| $_{69,74}^{31}Ga$ | $_{72,59}^{32}Ge$ | $_{74,92}^{33}As$ |
| $_{114,82}^{49}In$ | $_{118,69}^{50}Sn$ | $_{121,75}^{51}Sb$ |

Tableau I-1: Extrait de la classification périodique des éléments

Dans les semi-conducteurs III-V, les électrons ns^3 des dernières orbitales des atomes de groupe III et les électrons ns^2p^3 des atomes du groupe V se réarrangent pour former, eux aussi, les orbitales hybridées $(2x)sp^3$ [6].

I-5 La structure cristalline :

Les matériaux semi-conducteurs sont exclusivement des solides cristallins. Leurs propriétés électronique, 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), *GaP*, *InP*, etc.ont une structure cristallographique de type de zinc blende. 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-1), l'atome en rouge représente un élément III par exemple, le premier (Ga) à l'origine et l'autre (As) à $(\mathbf{a}/4, \mathbf{a}/4, \mathbf{a}/4)$, ou \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 hétéro structures semi-conductrices III-V qui a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisin [7,8] .

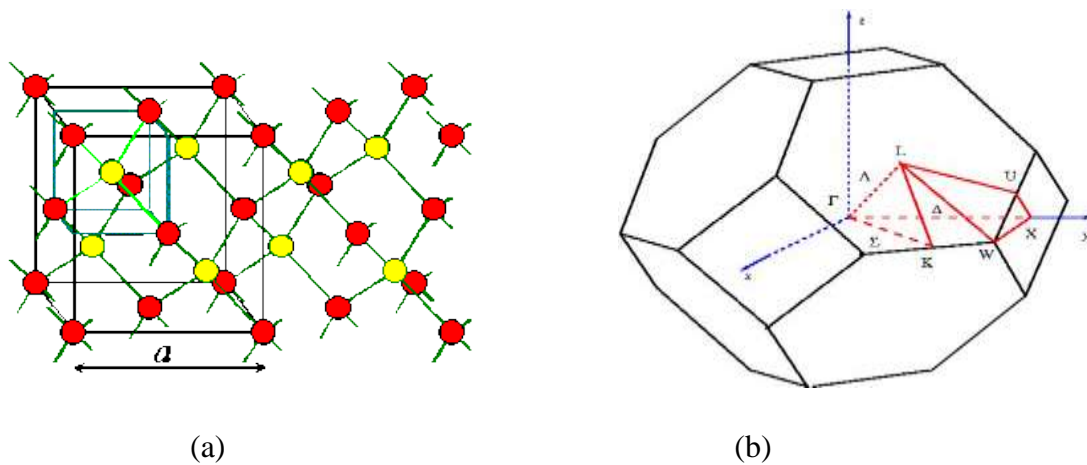


Figure I-1: (a) La structure de zinc blende et (b) la première zone de Brillouin

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 (voir figure I-1(b)) 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 λ , 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-6 La zone de Brillouin:

Les zones de Brillouin sont une caractéristique nécessaire pour décrire les structures cristallines. il est plus facile pour suivre les ZB pour les surface bidimensionnel que pour un surface tridimensionnel

On définit une zone de Brillouin (ZB) comme sous-ensemble de l'espace réciproque de volume minimal permettant de décrire entièrement les fonctions périodiques (par exemple l'énergie des électrons) dans cet espace.

I-6-1 La première zone de Brillouin:

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

I-6-1-1 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-6-1-2 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 $k_x = k_z$

A : Cette ligne est la direction $\langle 100 \rangle$ elle relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonal qui est le point L de l'octaèdre.

I-7 Les propriétés physiques des semi-conducteurs:

I-7-1 Les propriétés structurales des semi-conducteurs :

I-7-1-1 Les semi-conducteurs cristallins:

Les caractéristiques physiques fondamentales des semi-conducteurs se manifestent lorsque le matériau se trouve à l'état solide particulier, dite état cristallin.

L'état cristallin se distingue des autres états solides par le fait que, les atomes s'organisent suivant un ordre défini.

Cette état est engendré par la répétition périodique d'atomes ou de groupement d'atomes (de même nature ou de nature différente) appelé motif du cristal ou maille suivant les trois directions de l'espace et qui permet, par translation, de généré la structure cristalline. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement colombiennes [9].

L'immense majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques (*Si, Ge*) ou optoélectronique (*GaAs, InP*) sont basés sur la même structure cristalline, celle de diamant (*Si, Ge*) ou la structure zinc blende (*GaAs, InP*). Ces deux structures sont présentées sur la figure ci contre [10].

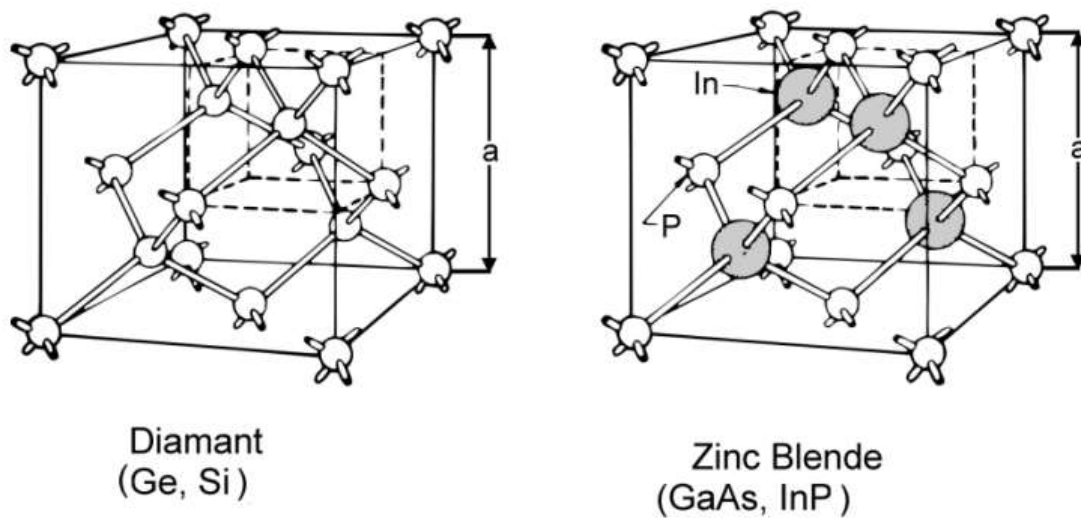


Figure I-2 : Structure cristalline Diamant et Zinc Blende

Toutefois, les cristaux réels présentent des défauts inévitables susceptibles de modifier leur propriété physique.

I-7-1-1-1 La constante de réseau:

C'est une grandeur utilisée pour d'écrire la maille d'un cristal, la maille cristalline est définie par trois paramètres a, b, c et par trois angles α, β, λ qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (I-3). Suivant les valeurs relatives de ces six grandeurs on définit les différentes structures cristallines [11].

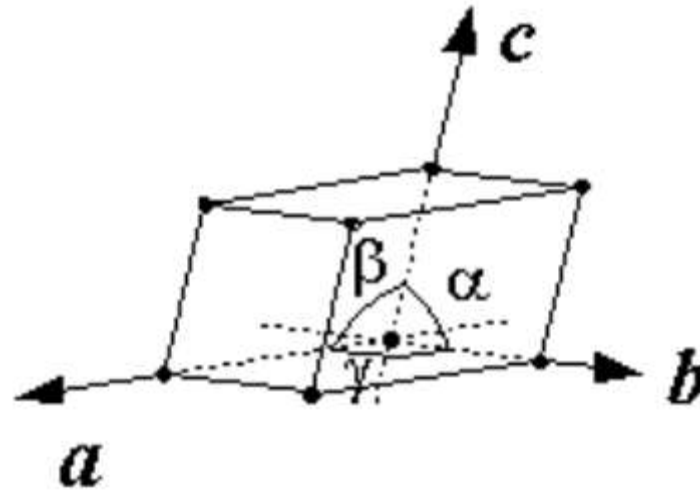


Figure I-3 : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

C'est pour cela, la détermination de la constante du réseau est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal.

On voit clairement que, la connaissance de cette constante du réseau permet de calculer le potentiel moyen du cristal ainsi la densité électronique.

I-7-2 Les propriétés optiques:

Les propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission) sont d'intérêt pratique, leur étude a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [12].

I-7-2-1 L'absorption fondamentale :

Un photon d'énergie $h\nu$ peut induire le saut d'un électron d'un état occupé de la bande de valence d'énergie E_1 , vers un état libre de la bande de conduction d'énergie E_2 appelé aussi état excité ($h\nu = E_2 - E_1$), c'est l'absorption fondamentale elle est présentée sur la figure (I-4). Ce processus sera mis à profit les capteurs de rayonnement.

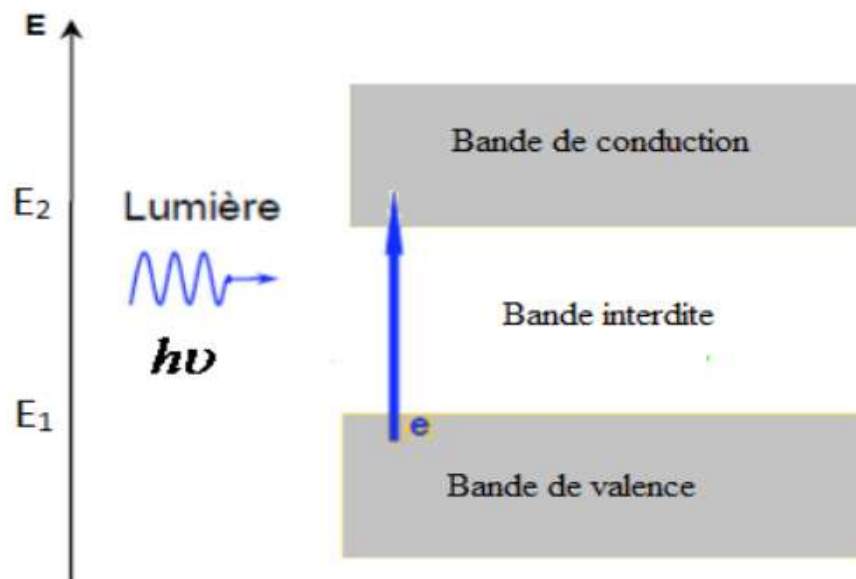


Figure I-4 : L'absorption fondamentale de la lumière par les porteurs.

I-7-2-2 L'émission spontanée:

Si l'état excité est instable, l'électron dans la bande de conduction a tendance à revenir à son état d'équilibre et retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence.

Une recombinaison électron-trou aura lieu avec émission d'un photon d'énergie $h\nu$, il s'agit d'une recombinaison radiative; c'est l'émission spontanée (I-5).

Ce phénomène est mis en évidence par les émetteurs de rayonnement et les diodes électroluminescentes [9].

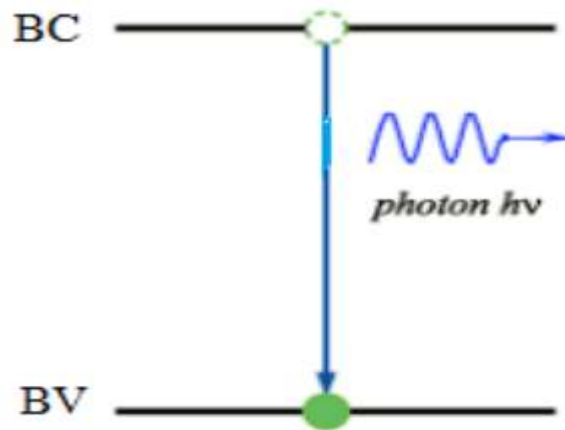


Figure I-5 : L'émission spontanée

I-7-2-3 L'émission stimulée :

Si le photon présenté dans le semi conducteur résultant d'une émission spontanée excité un atome voisin, un retour à l'état l'équilibre de cet atome peut induire la transition d'un électron de la bonde de conduction vers un état vide de la bonde de valence avec émission d'un deuxième photon de même énergie, en parlera ainsi de l'émission stimulée.

Ce principe est utilisé dans le fonctionnement des lasers à semi-conducteur (lumière cohérent). Ce phénomène est présenté sur la figure ci contre.

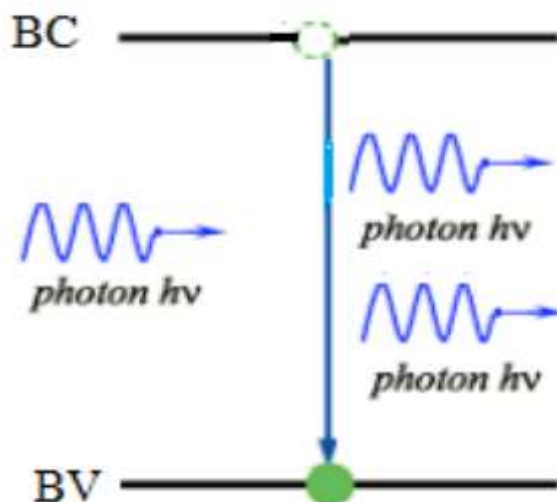


Figure I-6 : L'émission stimulée

I-7-2-4 L'indice de réfraction:

L'indice de réfraction n d'une substance est une de ses constantes physiques susceptible de la caractériser au même titre que sa densité ou son point de fusion ou d'ébullition. C'est l'une des notions importantes de l'optique. Cette grandeur caractérise la modification de la propagation des ondes lumineuses par leur interaction avec le milieu matériel dans lequel elles se propagent.

L'indice de réfraction dépend du type de matériau utilisé qu'il soit monocristallin, poly-cristallin ou amorphe et du taux d'impuretés dans le matériau. En général, il est lié au gap énergétique du matériau, plus le gap est grand, plus l'indice est petit.

En électromagnétisme, l'indice de réfraction se définit à partir de la constante diélectrique, substance isolante capable d'emmagasiner de l'énergie électrostatique caractérisée par sa permittivité ou constant diélectrique pouvant prendre des valeurs complexes dans milieu absorbants.

Connaitre l'indice de réfraction d'un matériau est très important pour la réalisation des dispositifs électronique tels que les guides d'ondes, les cellules solaires etc. plusieurs approches ont touchées cet indice qui est lié au gap énergétique fondamental du matériau [14].

Donc pouvoir choisir un indice pour une application quelconque revient à ajuster ce gap c.à.d. affiner la structure du matériau pour qu'il puisse répondre aux exigences de l'application.

I-7-3 Les propriétés électroniques:

I-7-3-1 Bandes d'énergie:

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leurs vecteurs d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de conduction la plus haute, la bande de

valence la plus basse, et la bande interdite qui les sépare et qui détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur [15].

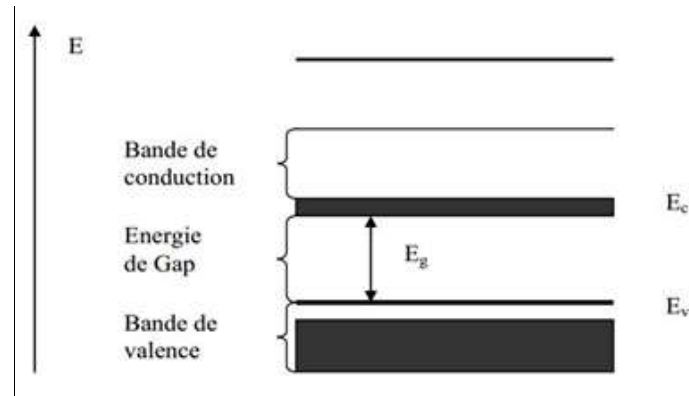


Figure I-7 : Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs

I-7-3-2 Gap énergétique:

Dans un semi-conducteur comme dans un isolant, l'écart énergétique entre la bande de conduction et la bande de valence est appelé longueur de bande interdite, ou tout simplement gap noté E_g , dans le quel, un porteur de charge ne peut se trouver.

- Gap direct et gap indirect:

Pour un cristal semi-conducteur, 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} . Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} : on dit que le semi-conducteur est à gap direct.

Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{k} différentes: on dit que le semi-conducteur est à gap indirect.

Cette distinction entre matériaux semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons.

En effet, lors de la transition d'un électron de la BV vers la BC ou de la recombinaison électron-trou, il faut conserver l'énergie (relation scalaire) et l'impulsion (relation vectorielle).

La transition d'énergie minimale entre ces deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect.

Cette différence oriente le choix des matériaux pour les applications optoélectroniques [16].

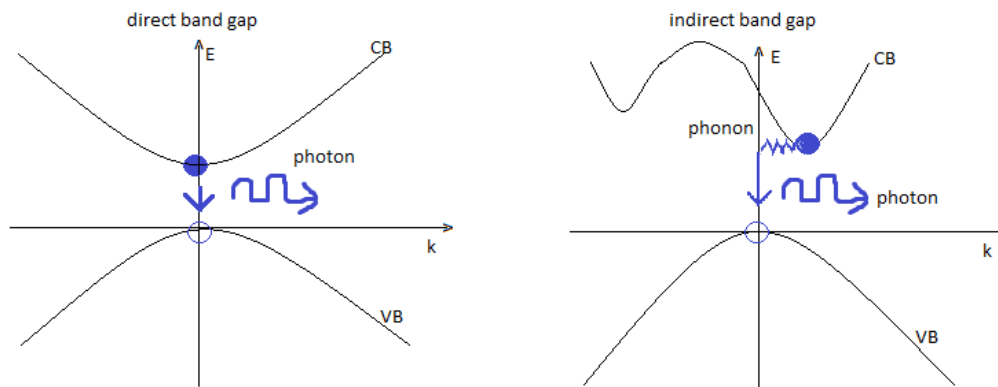


Figure I-8 : Structure de bande d'un semi-conducteur

I-8 Les alliages des semi conducteurs III-V :

I-8-1 Les composés binaires semi-conducteurs:

Les semi-conducteurs les plus connus sont :

- Les éléments : Si, Ge, Se offrent des liaisons de covalence aussi fortes entre atomes mais l'absence de transition optique direct, réduit leur possibilité d'application à l'optoélectronique.

- Les composés binaires : $InSb, GaAs$ (III-V)

CdS, CdSe (II-IV)

PbS, PbTe (IV-VI)

La liste complète des semi-conducteurs II-V et II-VI peut être obtenue à partir de l'extrait du tableau de Mendeleïev suivant [17]:

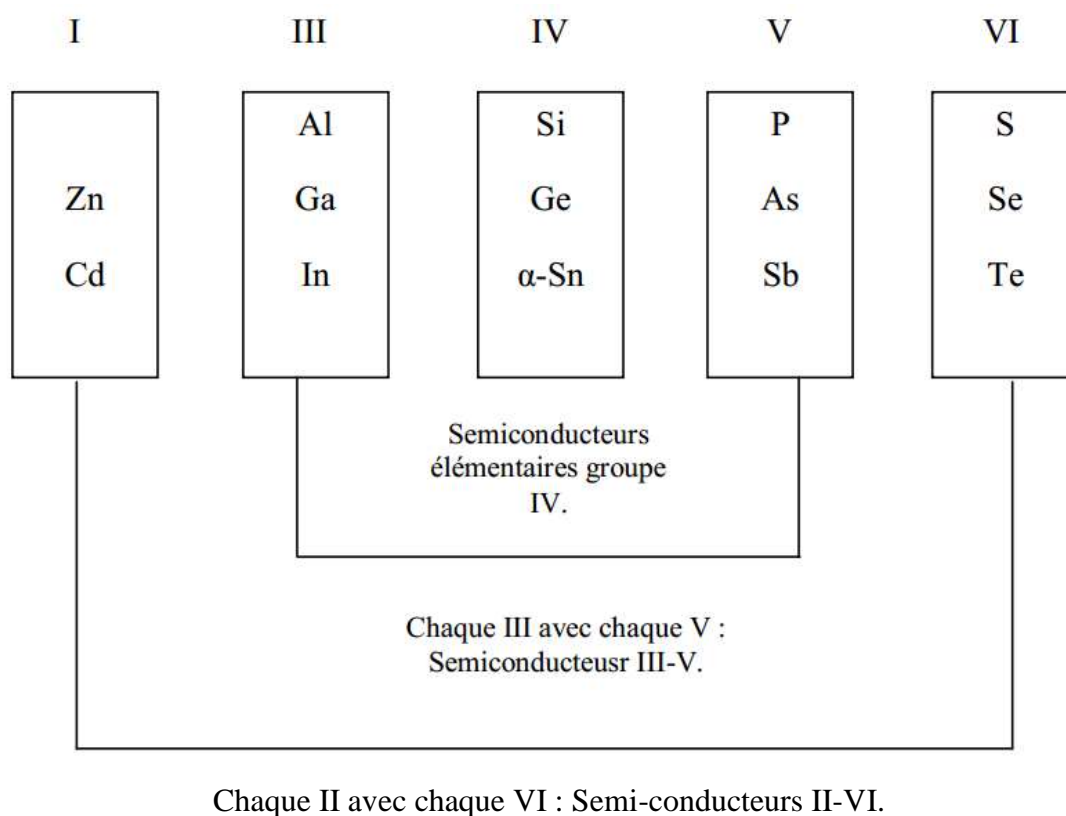


Tableau I-2 Semi-conducteurs du type III-V et II-VI et ceux du groupe IV.

I-8-2 Les alliages semi-conducteurs :

Une mention particulière est donnée aux alliages semi-conducteurs, vu leur application dans le domaine de l'optoélectronique.

L'élaboration de ces alliages se fait à partir du composé binaire dont on fait varier leur composition, ils peuvent être binaire, ternaire, quaternaire suivant qu'ils renferment deux, trois, quatre éléments respectivement.

I-8-3 L'approximation du cristal virtuel(VCA):

I-8-3-1 Le cas d'un alliage ternaire:

L'approximation du cristal virtuel (VCA) est la proche le plus simple, elle considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen. Cet alliage ternaire de la forme $A_{1-x}B_xC$ est composé des molécules AC avec une fonction molaire $(1-x)$ et des molécules BC avec une fonction molaire x [18].

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter cet alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [19].

La valeur moyenne $F(x)$ de la propriété physique de l'alliage ternaire, peut être liée linéairement à la concentration stœchiométrique x par la relation suivant:

$$F(x)_{A_{1-x}B_xC} = xF_{BC} + (1-x)F_{AC} \quad (\text{I-1})$$

Certaines propriétés suivant une interpolation linéaire, comme le paramètre de réseau donné par la loi de Vegard [20]:

$$a(x)_{A_{1-x}B_xC} = xa_{BC} + (1-x)a_{AC} \quad (\text{I-2})$$

a_{BC} est la constante du réseau du composé BC

a_{AC} est la constante du réseau du composé AC

x est la concentration molaire.

I-8-3-2 Le cas d'un alliage quaternaire:

Les alliages quaternaires sont d'intérêt particulier dans la technique actuel à cause de l'avantage qu'il offrent pour la conception des dispositifs aux propriétés souhaitées,

ils ajoutent un degré de liberté du gap énergétique, couvrant ainsi, une gamme de longueur d'onde.

Ces alliages quaternaires sont de la forme $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$, composé de quatre binaires AC, BC, AD et BD est caractérisé par la présence de deux coefficients stœchiométriques x et y , permettant d'ajuster de façon indépendante les propriétés physiques de l'alliage quaternaire, en utilisant les propriétés physiques de ses composés binaires en particulier son potentiel et son paramètre de maille.

La propriété physique $F(x, y)$ de ce type d'alliage est calculé par une interpolation linéaire des paramètres de ses composés binaires:

$$F_{ABCD}(x, y) = xyF_{AC} + (1-x)yF_{BC} + x(1-y)F_{AD} + (1-x)(1-y)F_{BD} \quad (I-3)$$

Pour un système quaternaire, la constante de réseau est donnée par la loi de Vegard [21]

$$a_{alliage}(x, y) = xy a_{AC} + (1-x)y a_{BC} + x(1-y) a_{AD} + (1-x)(1-y) a_{BD} \quad (I-4)$$

a_{AC}, a_{BC}, a_{AD} et a_{BD} sont les constantes des réseaux des composés binaire formant l'alliage quaternaire.

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

Parallèlement au progrès effectué dans le domaine expérimental, les méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques, basées sur le développement des concepts de base de nouveaux algorithmes, ont fait un impact crucial, afin de comprendre les propriétés et les caractéristiques des matériaux et fournir par la suite, des données complémentaires pour les expérimentateurs.

Quoique pour le calcul de la structure de bandes électroniques, le majeur problème qu'on retrouve est que le potentiel cristallin n'est pas vraiment défini, ce qui rend difficile de trouver une solution générale à l'équation de Schrödinger qui permet de trouver les énergies et les fonctions d'ondes en état stationnaire de toutes les particules en interactions qui forment le cristal, ces particules sont donc

les électrons et les noyaux atomiques. L'équation cidessous décrit l'Hamiltonien total du système moléculaire.

I-9-1 L'Hamiltonien total du cristal :

Le cristal est un ensemble de noyaux et des électrons en interaction, il est décrit par l'Hamiltonien total défini par :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (\text{I-5})$$

Où

T_e : représente l'énergie cinétique des électrons

T_n l'énergie cinétique des noyaux

électron –attraction électron d' l'énergie V_{ee}

noyau –gie d'attraction électron l'éner V_{en}

V_{nn} l'énergie d'attraction noyau – noyau

Les énergies propres et les fonctions d'ondes propres sont données par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi(R, r) = E\Psi(R, r) \quad (\text{I-6})$$

Où

R représentée les coordonnées des noyaux et r celles des électrons, E l'énergie totale du système et $\Psi(R, r)$ la fonction d'onde du système [21].

Cependant la résolution de l'équation (II-2) ne peut pas être résolu qu'en faisant certains approximations.

I-9-2 L'approximation adiabatique:

L'approximation de Born-Oppenheimer dite adiabatique est la première des approximations utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger pour les

systèmes complexes contenant plus d'un ou deux électrons, elle sépare le mouvement des électrons et des noyaux en se basant la différence de masse entre les noyaux atomique et les électrons $M_n \gg m_e$, elle conduit donc à la séparation des l'hamiltonien total en une partie électronique et une partie nucléaire reliée aux noyaux, ces derniers sont considérer fixes. Les états propres du système sont alors caractérisés par des fonctions d'ondes produits d'une fonction d'onde électronique par une fonction d'onde nucléaire. Donc on peut écrire l'hamiltonien des électrons He comme:

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (I-7)$$

$$H_e = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_{i,j} \frac{-Z_I e^2}{|R_I - r_j|} \quad (I-8)$$

Dans ce qui suit on pose $H = H_e$

Et l'équation de Schrödinger devient :

$$H \psi_e(r_i, R_I) = E \psi_e(r_i, R_I) \quad (I-9)$$

Ou $\psi_e(r_i, R_I)$ 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 (II-5) représente un problème à N corps, dont la solution rigoureuse ne peut être obtenue avec les outils mathématiques actuels. Pour simplifier on utilise une seconde approximation celle de Hartree-Fock [22].

I-9-3 L'approximation de Hartree-fock :

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

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

$$H = H_e = \sum_i H_i \quad (\text{I-10})$$

Avec :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(r) \quad (\text{I-11})$$

Ou :

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

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$H\psi_n(r) = E_n\psi_n(r) \quad (\text{I-12})$$

ψ_n et E_n représentent les fonction d'onde et les énergies propres du cristal. Pour obtenir les états électroniques du cristal [23], il existe différentes méthodes de résolution de l'équation (II-8).

I-9-4 L'approximation du pseudo-potentiel:

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 "pseudo-potentiel" est de remplacer un problème par un autre.

I-9-4-1 Méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M) :

La méthode empirique des pseudo-potentiels (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 du constant diélectrique que l'on calcule en partant du spectre de réflexion.

Elles peuvent être développées en une série d'ondes planes. Cette technique du pseudo-potentiel est pratiquement utilisée, car elle nécessite seulement un nombre réduit de facteurs de forme pour le calcul de la structure de bandes électroniques.

La procédure de calcul de l'E.P.M suit le diagramme ci-dessous.

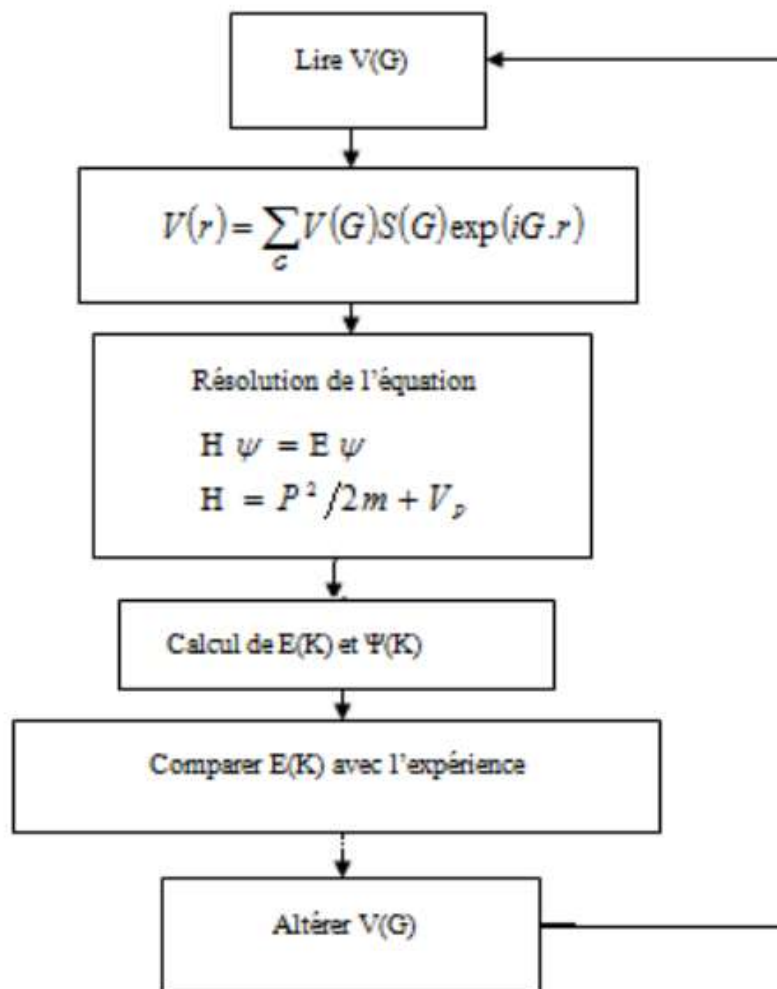
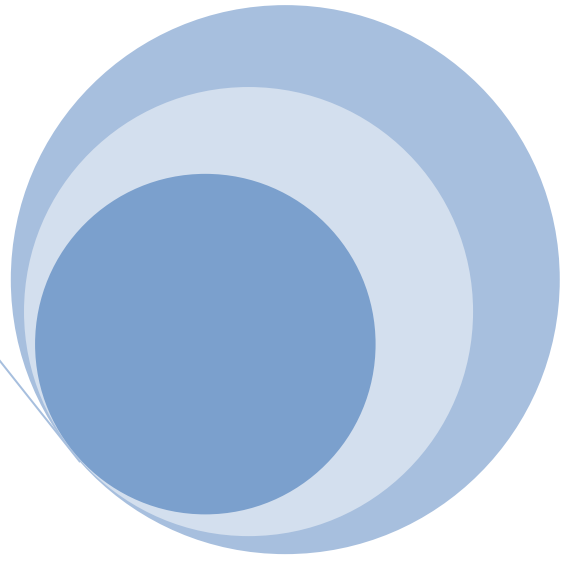
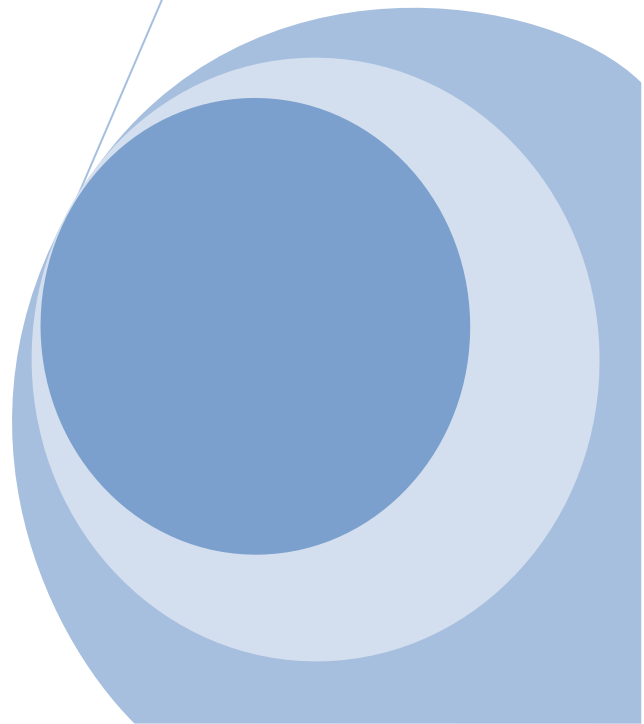


Figure I-9 diagramme block de la méthode E.P.M locale



Chapitre II

Résultats et discussion



Chapitre II Résultats et discussion

II-1 Introduction :

Notre travail porte ici sur l'étude des propriétés structurales, électronique et optique des alliages semi-conducteurs ternaires $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ et quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ par simulation numérique. Il s'agit de modéliser la structure et les interactions dominantes l'algorithme approprié pour réaliser cette étude.

Ces semi-conducteurs de la famille III-V se cristallisent dans la structure "Zinc Blende". Cette structure, comme on a vu précédemment, s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées.

Dans ce présent travail, nous avons opté pour l'utilisation de la méthode empirique des pseudo potentiels (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA) [24].

II-2 Les propriétés physiques des semi-conducteurs :

II-2-1 Les propriétés structurales :

II-2-1-1 Les alliages Ternaires $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$:

Pour l'alliage ternaire $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ étudiés l'Hamiltonien est décrit par une composante due au cristal virtuel [20].

- Le paramètre cristallin de l'alliage ternaire $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$:

Le paramètre du réseau a de ces alliages est calculé en utilisant la loi de Vegard.

$$a_{\text{GaPSb}}(x) = x.a_{\text{GaP}} + (1-x).a_{\text{GaSb}} \quad (\text{II-1})$$

Où a_{GaP} , a_{GaSb} sont les constantes du réseau GaP , GaSb .

Pour le composé ternaire $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ les données des paramètres de réseau en fonction de la

composition x ($0 \leq x \leq 1$) sont illustrées sur le tableau (II-1).

| La composition x | a ($\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$) (Å) |
|--------------------|---|
| 0 | 6.118 |
| 0.1 | 6.0513 |
| 0.2 | 5.9846 |
| 0.3 | 5.9179 |
| 0.4 | 5.8512 |
| 0.5 | 5.7845 |
| 0.6 | 5.7178 |
| 0.7 | 5.6511 |
| 0.8 | 5.5844 |
| 0.9 | 5.5177 |
| 1 | 5.451 |

Tableau II-1 : Les paramètres de réseau des alliages ternaires $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$

La variation du paramètre de réseau a pour les alliages ternaires semi-conducteurs $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ en fonction de la composition x est présentée sur la figure (II-1).

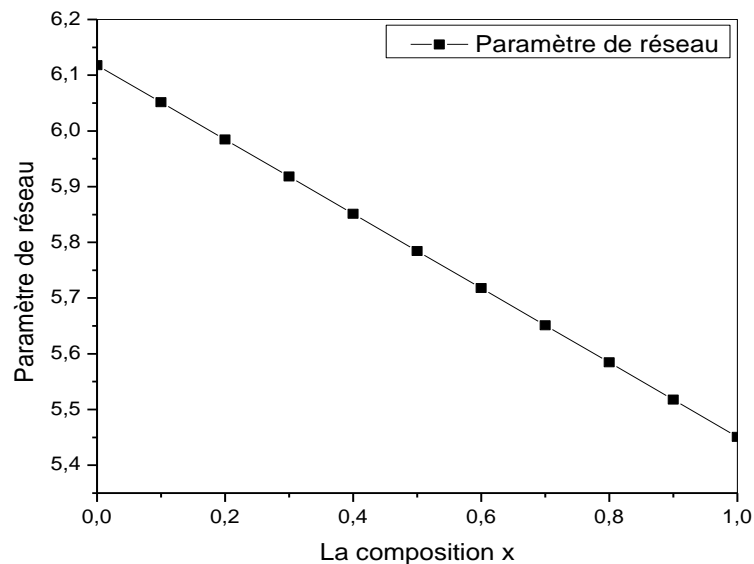


Figure II-1: La variation du paramètre de réseau a pour $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ en fonction de la composition x

On remarque que le paramètre du réseau de l'alliage ternaire diminue d'une façon linéaire lorsqu'on augmente la concentration du phosphore

- Le module de compressibilité de l'alliage ternaire $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$:

Le module de compressibilité B de ces alliages est calculé en utilisant la loi de Vegard.

$$B_{\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}}(x) = x.B_{\text{GaP}} + (1-x).B_{\text{GaSb}} \quad (\text{II-2})$$

Pour le composé ternaire $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ les données des modules de compressibilité en fonction de la composition x ($0 \leq x \leq 1$) sont illustrées sur le tableau (II-2).

| La composition x | B ($\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$) * 10^{11} |
|------------------|---|
| 0 | 5.63 |
| 0.1 | 5.949 |
| 0.2 | 6.268 |
| 0.3 | 6.587 |
| 0.4 | 6.906 |
| 0.5 | 7.225 |
| 0.6 | 7.554 |
| 0.7 | 7.863 |
| 0.8 | 8.182 |
| 0.9 | 8.501 |
| 1 | 8.82 |

Tableau II-2 : Les modules de compressibilité de $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$

La variation du module de compressibilité B en fonction de la composition x est présentée sur la figure (II-2), qui montre une augmentation linéaire.

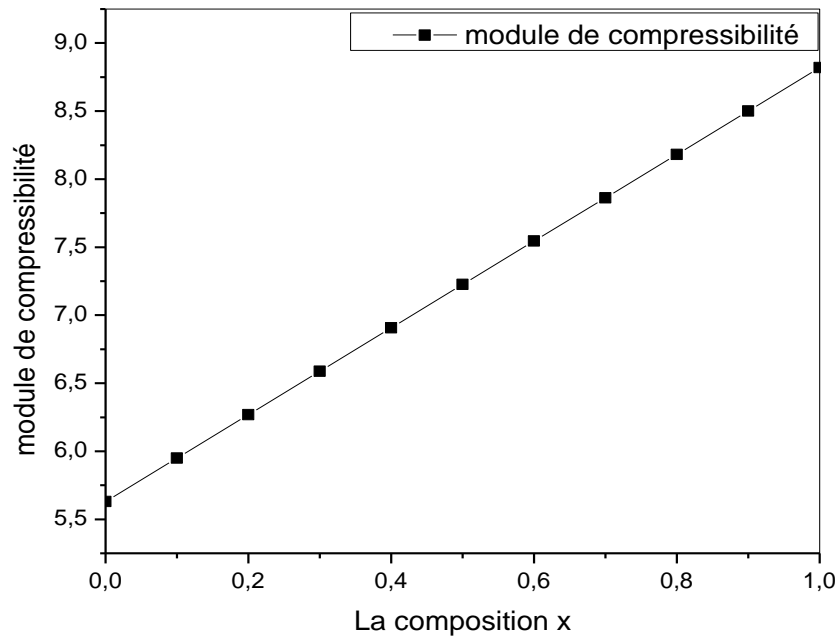


Figure II-2: La variation du module de compressibilité en fonction de la composition x pour $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$

-La dérivé du module de compressibilité de l'alliage ternaire $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$:

La dérivé du module de compressibilité B' de ces alliages est calculé en utilisant la loi de Vegard:

$$B'_{\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}}(x) = x.B'_{\text{GaP}} + (1-x).B'_{\text{GaSb}} \quad (\text{II-3})$$

Pour le composé ternaire $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ les données des dérivés de module de compressibilité en fonction de la composition x ($0 \leq x \leq 1$) sont illustrées sur le tableau (II-3).

| La composition x | B' (GaP _x Sb _{1-x}) |
|------------------|--|
| 0 | 4.78 |
| 0.1 | 4.752 |
| 0.2 | 4.724 |
| 0.3 | 4.696 |
| 0.4 | 4.668 |
| 0.5 | 4.64 |
| 0.6 | 4.612 |
| 0.7 | 4.584 |
| 0.8 | 4.556 |
| 0.9 | 4.528 |
| 1 | 4.5 |

Tableau II-3 : Les dérivés du module de compressibilité de GaP_xSb_{1-x}

La variation du la dérivé du module de compressibilité B' en fonction de la composition x on P présentée sur la figure (II-3).

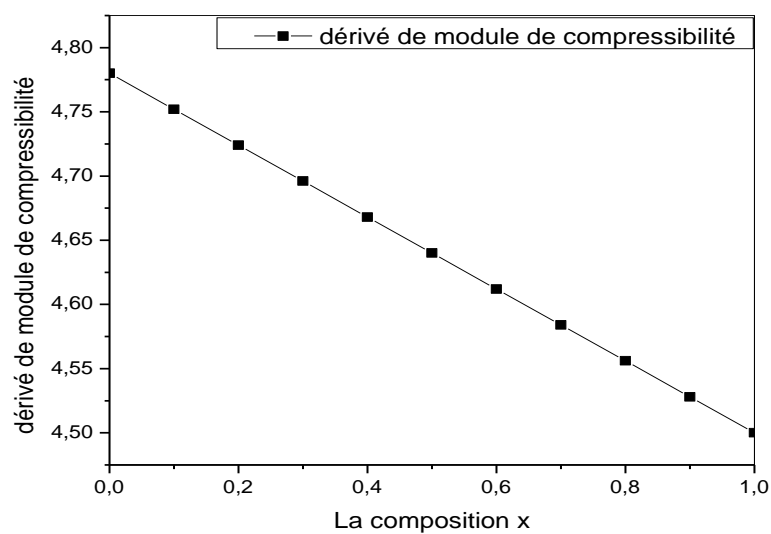


Figure II-3 : La variation du le dérivé de le module de compressibilité en fonction de la composition x on P pour GaP_xSb_{1-x}

On remarque que La dérivé du module de compressibilité de l'alliage ternaire diminue lorsqu'on augmente la composition en phosphore.

II-2-1-2 Les alliages quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$:

Le paramètre de réseau est estimée à partir de la loi de Vegard , c'est-à-dire que pour un alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, elle est exprimée par :

$$a_{\text{alliage}} = x.(1-y).a_{\text{GaP}} + (1-x).y.a_{\text{InAs}} + x.y.a_{\text{GaAs}} + (1-x).(1-y).a_{\text{InP}} \quad (\text{II-4})$$

a_{GaP} , a_{InAs} , a_{GaAs} et a_{InP} sont des constantes du réseaux des composés binaires constituant l'alliage .

Tenant compte de principe de l'accord de maille, La variation de la composition y en fonction de x est calculée en résolvant l'équation :

$$a_{\text{InP}} = x.(1-y).a_{\text{GaP}} + (1-x).y.a_{\text{InAs}} + x.y.a_{\text{GaAs}} + (1-x).(1-y).a_{\text{InP}} \quad (\text{II-5})$$

La solution de cette équation (II-4) :

$$y = \frac{0.418x}{0.189 + 0.013x} \quad (\text{II-6})$$

$$(0 \leq x \leq 0.4 \quad \text{et} \quad 0 \leq y \leq 0,861)$$

Les données des valeurs du paramètre a des alliages quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ en fonction de la composition y sont présentés dans le tableau (II-4):

| La composition y | a ($\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$) (Å) |
|--------------------|--|
| 0 | 5.869 |
| 0.1 | 5.896 |
| 0.2 | 5.896 |
| 0.3 | 5.896 |
| 0.4 | 5.896 |

Tableau II-4 : Calcul du paramètre de réseau pour $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ en fonction de y

La variation du paramètre de réseau pour $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ en fonction de la composition y est présentée dans la figure (II-4) :

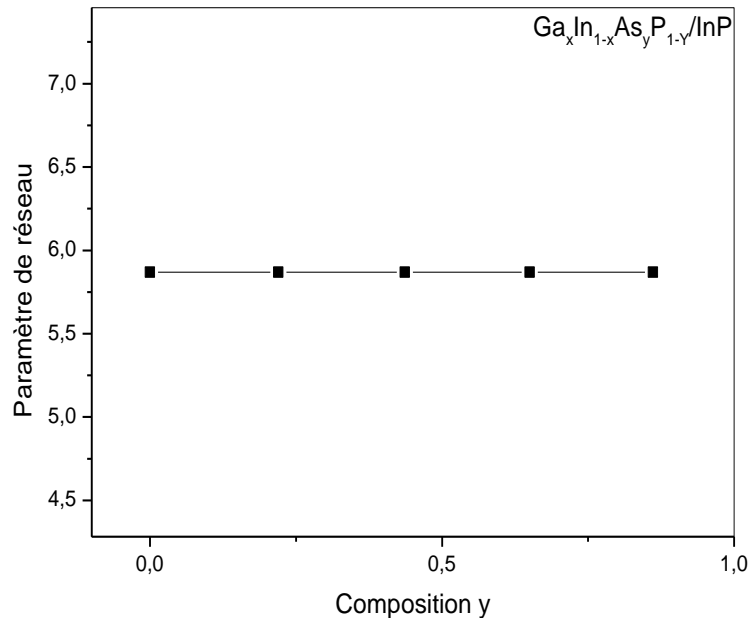


Figure II-4 : La variation du paramètre de réseau pour $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ en fonction de la composition y .

-Le module de compressibilité de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$:

Le module de compressibilité B de ces alliages est calculé en utilisant la loi de Vegard.

$$B_{alliage} = x.(1-y).B_{GaP} + (1-x).y.B_{InAs} + x.y.B_{GaAs} + (1-x).(1-y).B_{InP} \quad (\text{II-7})$$

Pour le composé quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ les valeurs des modules de compressibilité en fonction de la composition y ($0 \leq y \leq 0.861$) sont illustrées sur le tableau (II-5).

| La composition y | B ($\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$)* 10^{11} |
|------------------|--|
| 0 | 7.23 |
| 0.219 | 7.076 |
| 0.436 | 6.935 |
| 0.650 | 6.804 |
| 0.861 | 6.685 |

Tableau II-5 : Les modules de compressibilité de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$

La variation du module de compressibilité B en fonction de la composition y est présentée sur la figure (II-5).

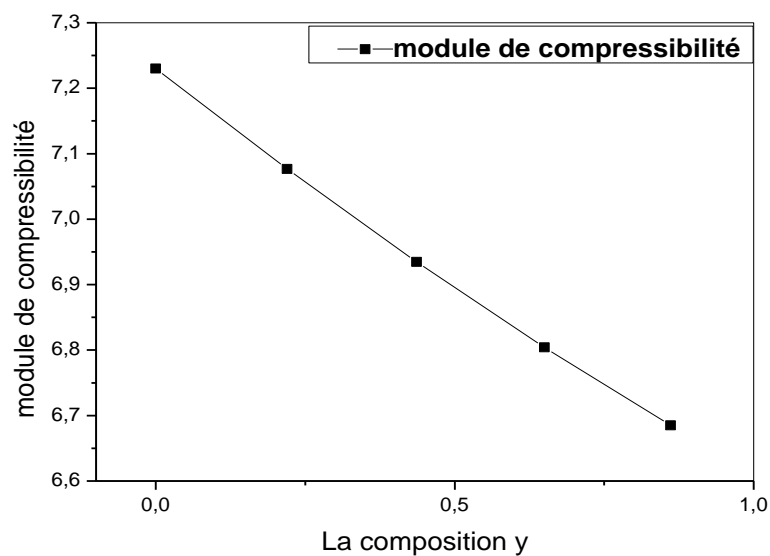


Figure II-5 : La variation du module de compressibilité en fonction de la composition y pour $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$

On remarque que le module de compressibilité de l'alliage quaternaire diminue avec l'augmentation de la concentration du phosphore.

-La dérivé du module de compressibilité de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$:

La dérivé du module de compressibilité B' de ces alliages est calculé en utilisant la loi de Vegard:

$$B'_{alliage}(x) = x.(1-y).B'_{GaP} + (1-x).y.B'_{InAs} + x.y.B'_{GaAs} + (1-x).(1-y).B'_{InP} \quad (II-8)$$

Pour le composé quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ les données des dérivés de module de compressibilité en fonction de la composition y ($0 \leq y \leq 0.861$) sont illustrées sur le tableau (II-6).

| La composition y | B' ($Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$) |
|------------------|------------------------------------|
| 0 | 4.59 |
| 0.219 | 4.627 |
| 0.436 | 4.667 |
| 0.650 | 4.710 |
| 0.861 | 4.757 |

Tableau II-6 : Les dérivés du module de compressibilité de $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$

La variation du la dérivé du module de compressibilité B' en fonction de la composition y on P présentée sur la figure (II-6).

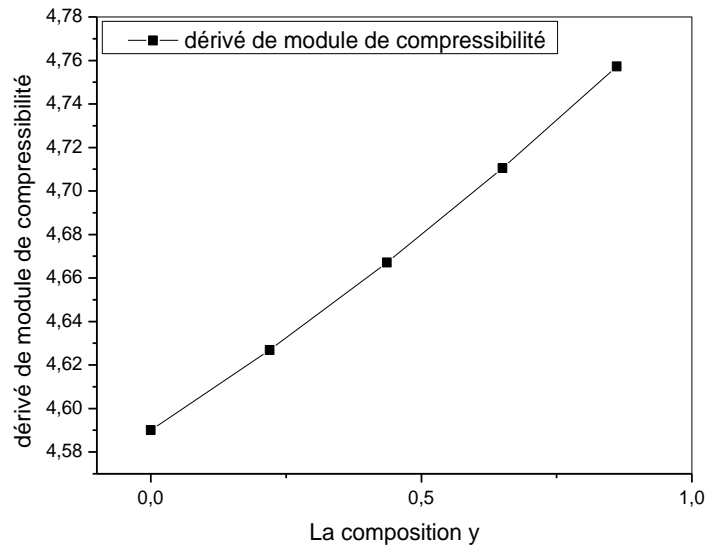


Figure (II-6) : La variation du le dérivé de le module de compressibilité en fonction de la composition y on P pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$

II-2-2 Les propriétés électroniques :

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode du pseudo-potentiel empirique dans laquelle le potentiel du cristal est une superposition linéaire des potentiels atomiques, qui sont modifiés afin de reproduire le gap énergétique expérimental aux points choisis de la zone de Brillouin.

La nature empirique de la méthode du pseudo-potentiel consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques [25].

Ces facteurs de forme, initialement pris de la théorie, sont ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [26,27], dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée, de l'écart des niveaux d'énergie définit par :

$$\delta = \left[\sum_{i,j} \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m-N} \right]^2 \quad (\text{II-9})$$

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}} \quad (\text{II-10})$$

E_{ij}^{exp} et E_{ij}^{cal} sont respectivement, les énergies observées et calculées entre l'état i avec $k = k_i$ et l'état j avec $k = k_j$ de la même paire (i, j) et N le nombre de paramètre du pseudo-potentiel empirique. Les valeurs des facteurs de formes sont modifiées par interaction jusqu'à minimiser le δ [26,28].

II-2-2-1 Les alliages Ternaires $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$:

Les facteurs de forme pseudo-potentiels symétriques et antisymétriques ajustés ainsi que les paramètres du réseau des composés ternaires semi-conducteurs $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$ dans la phase zinc blende, sont présentés dans le tableau (II-7).

| Composé | Facteurs de forme (Ryd) | | | | | | Paramètre du réseau (Å) |
|-------------|-------------------------|----------|-----------|----------|----------|-----------|-------------------------|
| | $V_S(3)$ | $V_S(8)$ | $V_S(11)$ | $V_A(3)$ | $V_A(7)$ | $V_A(11)$ | |
| <i>GaP</i> | -0.210510 | 0.03 | 0.072244 | 0.132668 | 0.07 | 0.02 | 5.451 |
| <i>GaSb</i> | -0.191206 | 0.005 | 0.073533 | 0.045340 | 0.03 | 0.00 | 6.118 |

Tableau II-7 : Les paramètres pseudo-potentiels du $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$

Les valeurs des gaps d'énergie du *GaP* et *GaSb* aux points de haute symétrie Γ, X et L obtenues par la procédure d'ajustement, sont illustrées sur le tableau (II-8).

| Composé | $E_{\Gamma}^{\Gamma} (eV)$ | $E_{\Gamma}^X (eV)$ | $E_{\Gamma}^L (eV)$ |
|-------------|----------------------------|---------------------|---------------------|
| <i>GaP</i> | 2.76509 | 2.22431 | 2.57796 |
| <i>GaSb</i> | 0.71134 | 0.99398 | 0.76616 |

Tableau II-8 : Gaps d'énergie pour *GaP* et *GaSb*

Le formalisme peut être facilement généralisé dans le cas d'un alliage, en utilisant la VCA dans lequel le potentiel atomique est remplacé par une pondération de ceux des différents composés parents.

L'appel à cette méthode c'est que la structure électronique peut être calculée en résolvant une équation d'ondes de Schrödinger à un électron.

- Gap énergétique :

Les variations des gaps énergétique direct ($\Gamma - \Gamma$) et indirect ($\Gamma - X$), ($\Gamma - L$), on été calculé en fonction de la composition x on phosphore, allant de 0 à 1. Les courbes représentant les variations de ces gaps sont présentés dans la figure (II-7).

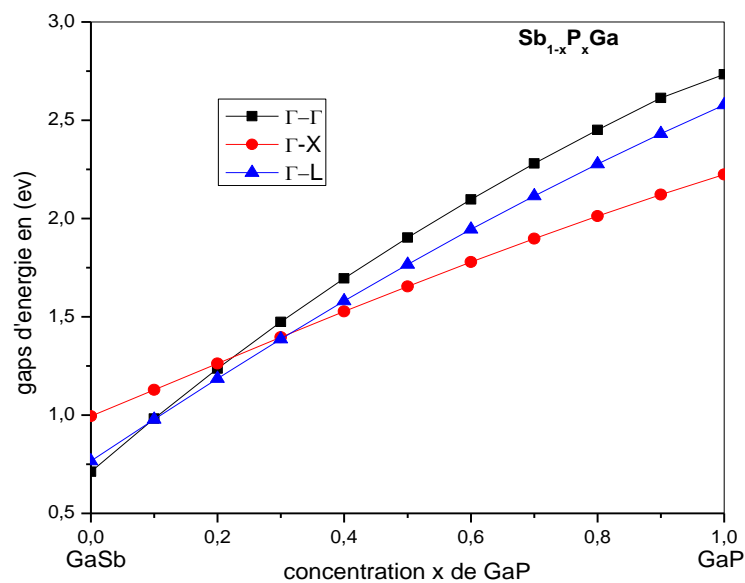


Figure II-7 : La variation du gap direct ($\Gamma - \Gamma$) et des gaps indirects ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) en fonction de la concentration x de l'alliage semi-conducteur GaP_xSb_{1-x}

Dans le but de confirmer la possibilité d'existence des transitions du gap direct ($\Gamma - \Gamma$) et des gaps indirects ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) en fonction de la concentration x en phosphore,

Nous avons tracés les déférents courbes de variations des gaps énergétique ($\Gamma - \Gamma$), ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) en fonction de la concentration x on phosphore, sur la même figure (II-7).

Nous observons que les trois gaps ($\Gamma - \Gamma$), ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) augmentent de façon monotone avec l'augmentation de la concentration x confirmant ainsi l'existence d'un point de transition correspond à une concentration égal $x=0.2$.

Supposant que les courbes de la variation des gaps direct et indirect en fonction de la concentration x en phosphore ont une interpolation quadratique, le paramètre optique du gap sera définit par la valeur b donné dans la relation :

$$E_g(x) = (1-x)E(0) + xE(1) - bx(1-x) \quad (\text{II-11})$$

En utilisant l'équation (II-11), les gaps direct et indirect en fonction de la concentration x en phosphore dans le $\text{GaP}_x\text{Sb}_{1-x}$, sont exprimés par les relations analytiques suivantes :

$$E_{\Gamma-\Gamma} = 0.71408 + 2.74036x - 0.71423x^2 \quad (\text{II-12})$$

$$E_{\Gamma-X} = 0.98954 + 1.41947x - 0.18091x^2 \quad (\text{II-13})$$

$$E_{\Gamma-L} = 0.76393 + 1.41947x - 0.18091x^2 \quad (\text{II-14})$$

Les valeurs de paramètres optique du gap b sont: (-0.71423), (-0.18091) et (0.18091) pour les gaps ($\Gamma - \Gamma$), ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) respectivement.

II-2-2-2 Les alliages quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$:

Les facteurs de forme pseudo-potentiels symétriques et antisymétriques ajustés ainsi que les paramètres du réseau des composés quaternaires semi-conducteurs

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposés sur un substrat InP , sont présentés dans le tableau (II-9).

| Composé | Les facteurs de forme (Ry) | | | | | | Les paramètres du réseau (A^0) |
|-------------|----------------------------|----------|-----------|----------|----------|-----------|------------------------------------|
| | $V_S(3)$ | $V_S(8)$ | $V_S(11)$ | $V_A(3)$ | $V_A(4)$ | $V_A(11)$ | |
| <i>GaAs</i> | -0.239833 | 0.0126 | 0.059625 | 0.060536 | 0.05 | 0.01 | 5.653 |
| <i>GaP</i> | -0.210510 | 0.03 | 0.072244 | 0.132668 | 0.07 | 0.02 | 5.451 |
| <i>InAs</i> | -0.182147 | 0.00 | 0.047107 | 0.094714 | 0.05 | 0.03 | 6.058 |
| <i>InP</i> | -0.213870 | 0.00 | -0.070502 | 0.088816 | 0.06 | 0.03 | 5.869 |

Tableau II-9 : Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés *GaAs* , *GaP* , *InAs* et *InP*

Dans l'approche du pseudo-potentiel local V_S et V_A sont les facteurs de forme symétrique et antisymétrique.

Pour l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ étudié V_S et V_A sont écrits comme suit:

$$V_S^{alliage} = x.y.V_S^{GaAs} + x.(1-y).V_S^{GaP} + y.(1-x).V_S^{InAs} + (1-x).(1-y).V_S^{InP} \quad (II-15)$$

$$V_A^{alliage} = x.y.V_A^{GaAs} + x.(1-y).V_A^{GaP} + y.(1-x).V_A^{InAs} + (1-x).(1-y).V_A^{InP} \quad (II-16)$$

Les valeurs des gaps d'énergie du *GaAs* , *GaP* , *InAs* , *InP* aux points de haute symétrie Γ , X et L obtenues par la procédure d'ajustement , sont illustrées sur le tableau (II-10).

| Composé | E_{Γ}^{Γ} (eV) | E_{Γ}^X (eV) | E_{Γ}^L (eV) |
|-------------|----------------------------|---------------------|---------------------|
| <i>GaAs</i> | 1.41399 | 1.78877 | 1.70691 |
| <i>GaP</i> | 2.76509 | 2.22431 | 2.57796 |
| <i>InAs</i> | 0.35096 | 1.35034 | 1.05662 |
| <i>InP</i> | 1.34071 | 2.18943 | 2.03615 |

Tableau II-10 : Gaps d'énergie pour *GaAs* , *GaP* , *InAs* , *InP*

Le formalisme peut être facilement généralisé dans le cas d'un alliage , en utilisant la VCA dans lequel le potentiel atomique est remplacé par une pondération de ceux des différents composés parents (*GaAs*, *GaP*, *InAs*, *InP*) .

- Gap énergétique :

Les variations des gaps énergétique direct ($\Gamma-\Gamma$) et indirect ($\Gamma-X$), ($\Gamma-L$) , on été calculé en fonction de la composition y en phosphore, allant de 0 à 0.86

Nos résultats sont présentés dans la figure (II-8).

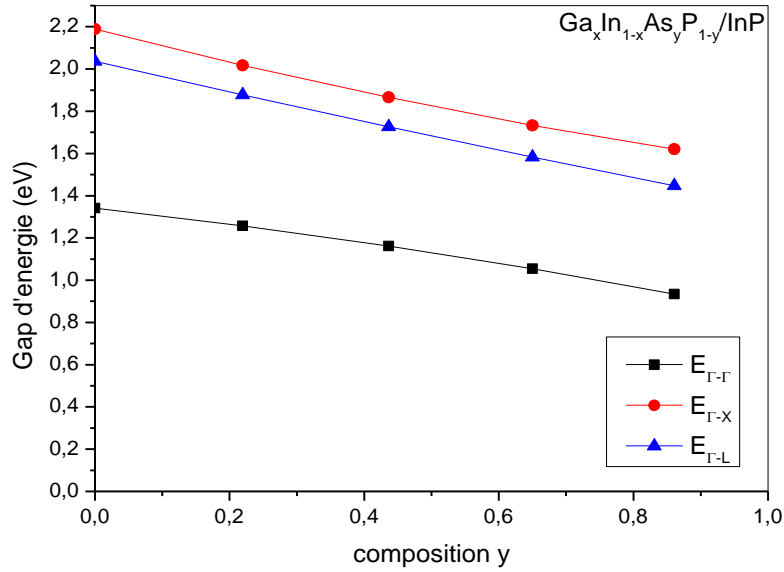
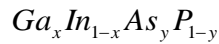


Figure II-8 : La variation du gap direct ($\Gamma - \Gamma$) et des gaps indirects ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) en fonction de la concentration y de l’alliage semi-conducteur



Les résultats obtenus pour les gaps d’énergie étudiés ($\Gamma - \Gamma$), ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) sont obtenus par un ajustement des moindres carrés, donnant les expressions analytiques suivantes:

$$E_g(y) = (1 - y)E(0) + yE(1) - by(1 - y) \tag{II-17}$$

En utilisant l’équation (II-12), les gaps direct et indirect fonction de la concentration y en phosphore dans le $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$, sont exprimés par les relations analytiques suivantes:

$$E_{\Gamma-\Gamma}(y) = 1.34 - 0.34y - 0.149y^2 \tag{II-18}$$

$$E_{\Gamma-X}(y) = 2.1895 - 0.825y + 0.19y^2 \tag{II-19}$$

$$E_{\Gamma-L}(y) = 2.036 - 0.735y + 0.059y^2 \tag{II-20}$$

Les valeurs de paramètres optique du gap b sont (-0.149) , (0.19) et (0.059) pour les gaps ($\Gamma - \Gamma$), $(\Gamma - X)$ et $(\Gamma - L)$ respectivement.

II-2-2-3 Structure de bandes d'énergie de GaP et GaSb:

- Le composé GaSb , InP :

Comme tous les semi-conducteurs composés III-V, le *GaSb* cristallise dans une structure de type zinc-blende. Il est formé de deux réseaux cubiques à face centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes de gallium Ga, l'autre les atomes de antimony Sb. 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-Sb 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.

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 [29,30]. La figure (II-9) représente la structure de bande de *GaSb*, obtenue à partir de l'alliage ternaire pour une concentration $x=0$ en phosphore.

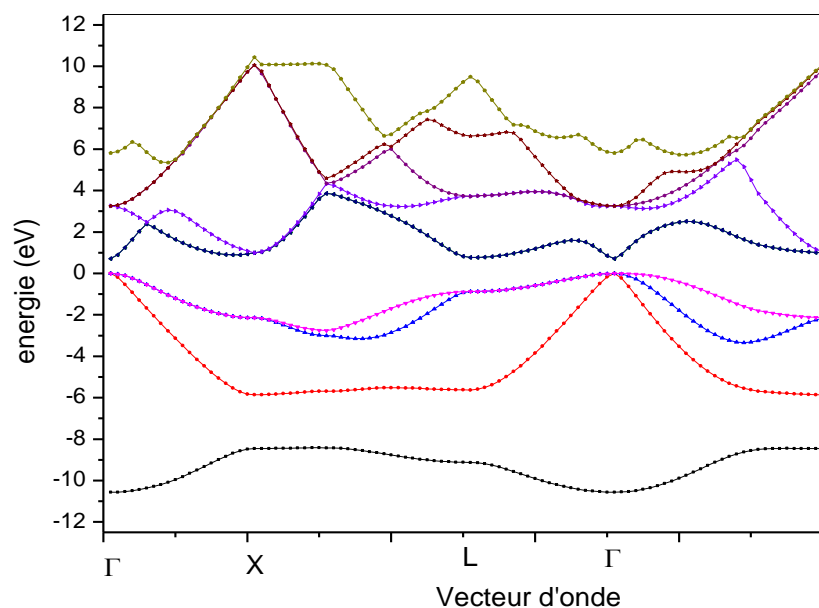


Figure II-9 : Structure de bande du composé *GaSb*

La figure (II-10) représente la structure de bande de GaP , obtenue a partir de l'alliage ternaire pour une concentration $x=1$ en phosphore.

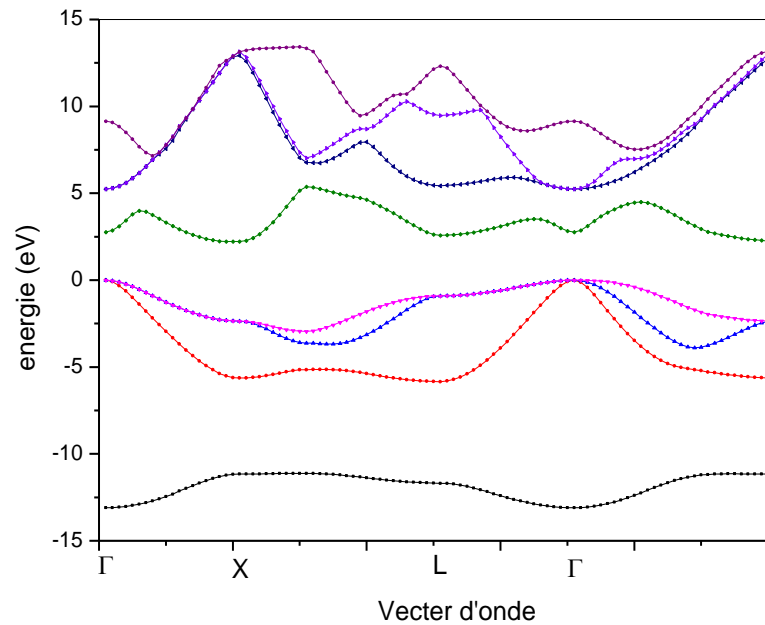


Figure II-10 : Structure de bande du composé GaP

- Structure de bande des alliages ternaires GaP_xSb_{1-x} :

Le figure (II-11) représentent le structure de bande électronique pour $x=0.5$, la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence. La figure indique que le maximum de la bande de valence est au point Γ et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ , l'alliage ternaires $GaP_{0.5}Sb_{0.5}$ est gap direct $E(\Gamma - \Gamma)$.

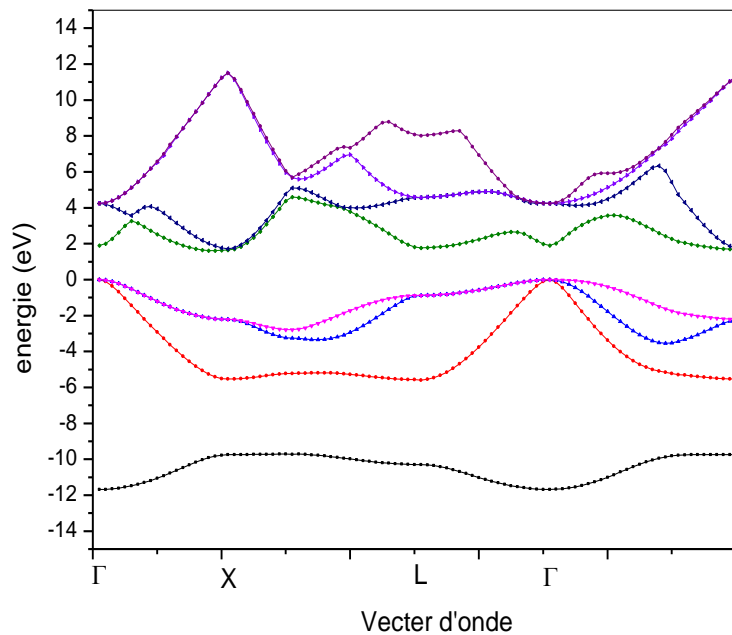


Figure II-11 : La structure de bande électronique de l'alliage semi-conducteur
GaP_{0.5}Sb_{0.5}

D'après les figures (II-9), (II-10) et (II-11) on remarque l'incorporation d'une quantité de phosphore dans l'alliage ternaire perturbe leurs structures de bandes électroniques.

Toutes les bandes de valences et de conduction sont affectées.

II-2-3 Les propriétés optiques (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 hétérojonctions, les amplificateurs optiques, les fibres optiques [31].

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 [32].

$$\eta = \sqrt[4]{\frac{k}{E_g}} \quad (\text{II-21})$$

Où

E_g est le gap d'énergie et k une constante trouvée égale à 108eV.

Ravindra et autres proposent une relation linéaire entre n et E_g donnée par [33] :

$$\eta = \alpha + \beta E_g$$

Où

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

L'expression empirique de Hervé et Vandamme [34] donnée par :

$$\eta = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{II-22})$$

Avec A et B sont des constantes numériques de valeurs 13.6 eV et 3.4 eV respectivement.

II-2-3-1 Les alliages ternaires GaP_xSb_{1-x} :

Pour les alliages ternaires GaP_xSb_{1-x} , nous avons utilisé la loi de Vegard ou l'indice de réfraction η est calculé selon la relation:

$$\eta_{GaPSb}(x) = x.\eta_{GaP} + (1-x).\eta_{Gasb} \quad (\text{II-23})$$

Nos résultats calculés de l'indice de réfraction pour les composés binaires $GaSb$, GaP et leurs alliages ternaires (GaP_xSb_{1-x}) sont donnés dans le tableau suivant:

| Matériau | n calculé à partir de : | | |
|-----------------------|---------------------------|--------------------------------|-------------------------------|
| | Relation Moss | Relation de Ravindra et autres | Relation de Hervé et Vandamme |
| $GaSb$ | 3.51 | 3.64 | 3.46 |
| $Sb_{0,90}P_{0,10}Ga$ | 3.24 | 3.48 | 3.26 |
| $Sb_{0,80}P_{0,20}Ga$ | 3.09 | 3.35 | 3.13 |
| $Sb_{0,70}P_{0,30}Ga$ | 2.97 | 3.22 | 3.01 |
| $Sb_{0,60}P_{0,40}Ga$ | 2.90 | 3.14 | 2.94 |
| $Sb_{0,50}P_{0,50}Ga$ | 2.84 | 3.06 | 2.87 |
| $Sb_{0,40}P_{0,60}Ga$ | 2.97 | 2.98 | 2.81 |
| $Sb_{0,30}P_{0,70}Ga$ | 2.75 | 2.91 | 2.76 |
| $Sb_{0,20}P_{0,80}Ga$ | 2.71 | 2.84 | 2.70 |
| $Sb_{0,10}P_{0,90}Ga$ | 2.67 | 2.77 | 2.66 |
| GaP | 2.64 | 2.70 | 2.62 |

Tableau II-11 : Calcul des indices de réfraction de l'alliage ternaire GaP_xSb_{1-x} en fonction de la composition x .

La dépendance de η de la concentration x du GaP est montré dans la Figure (II-12), pour les trois modèles envisagés.

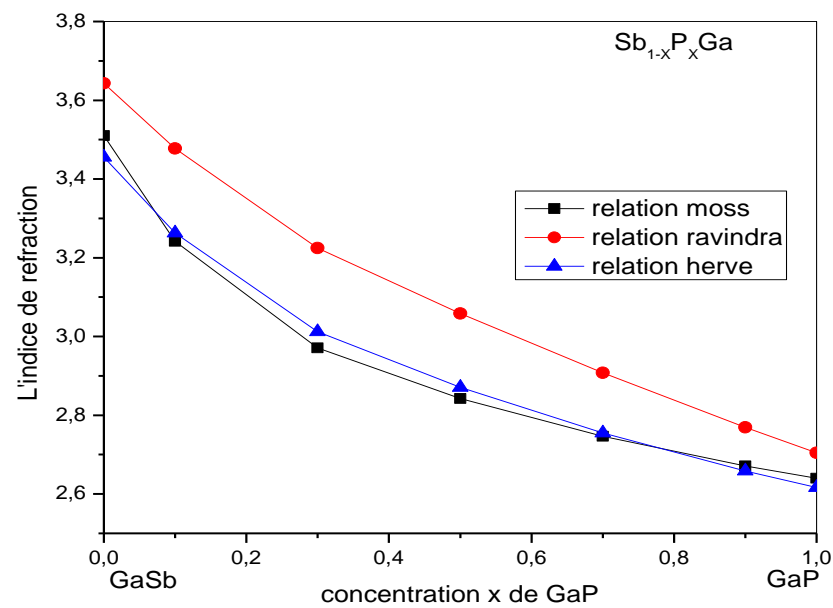


Figure II-12 : La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x.

-L'augmentation de la concentration x du zinc entraîne une diminution monotone de η .

-le matériau qui a le plus petit gap E_g a la plus grande valeur de η .

II-2-3-2 Les alliages quaternaires :

En utilisant l'équation (II-16), l'indice de réfraction du système $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ a été calculé pour différentes composition x et y.

Nos résultats sont donnés dans le tableau (II-12), calculés de l'indice de réfraction.

| Composition y | n |
|---------------|------|
| 0 | 3.00 |
| 0.1 | 3.21 |
| 0.2 | 3.37 |
| 0.3 | 3.50 |
| 0.4 | 3.58 |

Tableau II-12 : Calcul de l'indice de réfraction (η) de l'alliage quaternaire

$Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y} / InP$ en fonction de la composition y.

La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration y de l'alliage semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ est représenté dans la figure suivant :

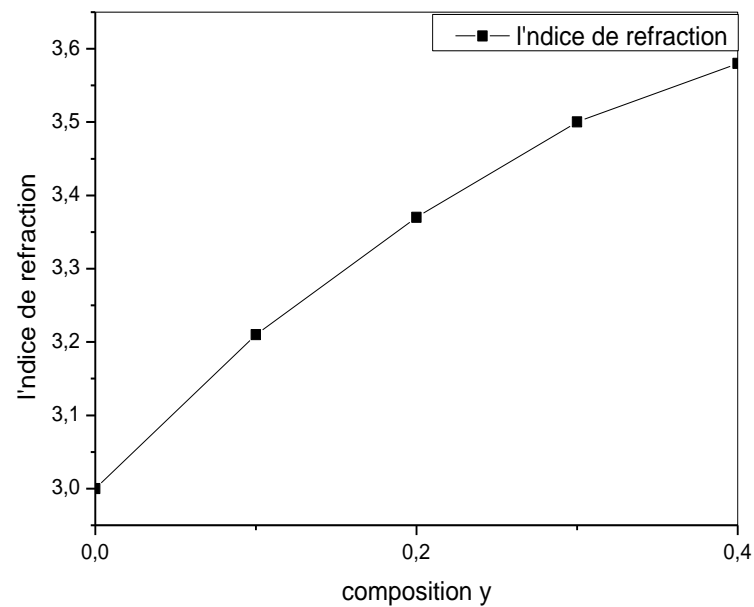
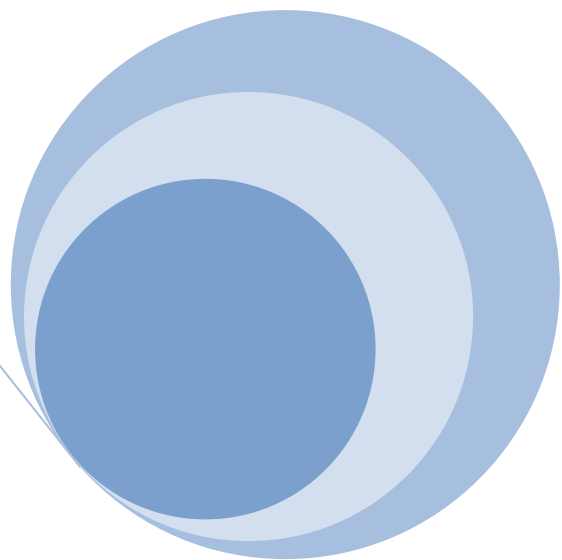
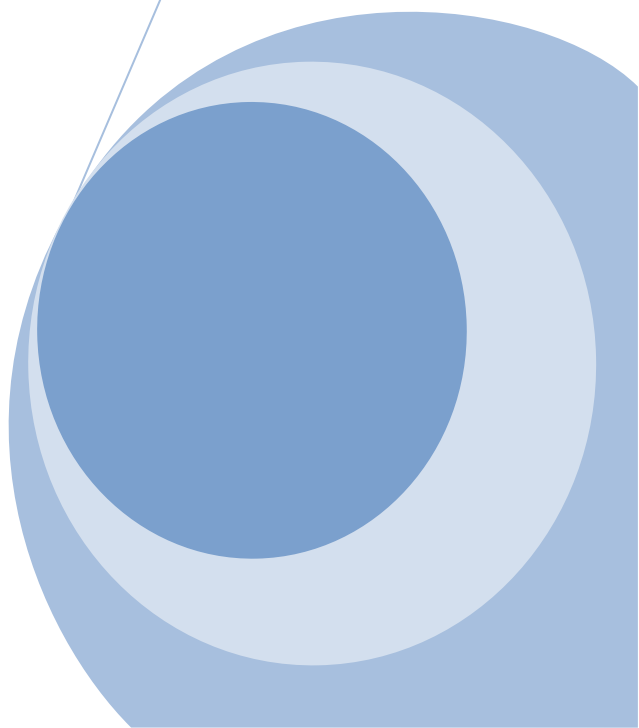


Figure II-13 : La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration y de l'alliage semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$



Conclusion générale



Conclusion générale

En conclusion nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et optiques des semi-conducteurs GaP , $GaSb$, $GaAs$, InP et $InAs$, ainsi que leurs alliages ternaires GaP_xSb_{1-x} et quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ en accord de maille avec le substrat InP dans la phase zinc blende. Pour se faire nous avons utilisé la méthode empirique du pseudo-potentiel couplé à l'approximation du cristal virtuel (V.C.A).

Toutes les propriétés de l'alliage ternaire ont été examinées en fonction de la concentration x du phosphore allant de 0 à 1, tandis que toutes les propriétés de l'alliage quaternaire ont été étudiées en fonction de la concentration y de l'arsenic (As) allant de 0 à 0.86

Les principaux résultats de notre investigation se résument ainsi

- Le paramètre du réseau de l'alliage ternaire diminue d'une façon linéaire lorsqu'on augmente la concentration du phosphore.
- Le module de compressibilité de l'alliage ternaire augmente linéairement avec l'augmentation de la concentration du phosphore. Cela veut dire que le matériau étudié devient plus rigide avec l'augmentation de la concentration du phosphore.

Alors que l'alliage quaternaire diminue avec l'augmentation de la concentration du phosphore. Cela veut dire que le matériau étudié devient plus fragile avec l'augmentation de la concentration du phosphore.

- La dérivée du module de compressibilité de l'alliage ternaire diminue lorsqu'on augmente la composition en phosphore. Cela veut dire que le matériau étudié devient plus fragile avec l'augmentation de la concentration du phosphore.

Alors que l'alliage quaternaire augmente avec l'augmentation de la concentration du phosphore. Cela veut dire que le matériau étudié devient plus rigide avec l'augmentation de la concentration du phosphore.

Conclusion générale

- L'incorporation d'une quantité de phosphore dans l'alliage ternaire perturbe leurs structures de bandes électroniques.

Toutes les bandes de valences et de conduction sont affectées.

- La bande interdite de l'alliage ternaire augmente non linéairement avec l'augmentation de la concentration du phosphore, alors que la bande interdite de l'alliage quaternaire diminue avec l'augmentation de la concentration de l'arsenic (As).

- L'alliage ternaire sous investigation passe par une transition de gap direct à un gap indirect lorsque la concentration du phosphore est au-delà la valeur 0.2 , tandis que l'alliage quaternaire reste à gap direct pour toute les concentrations de l'arsenic dans l'intervalle [0 , 0.86].

- L'indice de réfraction à été calculé on utilisant trois modèles.

La variation de l'indice de réfraction de l'alliage ternaire en fonction de la concentration x du phosphore à montré une diminution de se dernier en allant de 0 à 1.

Toutes les modèles utilisés montrent une tendance qualitativement similaire, tandis que pour l'alliage quaternaire l'indice de réfraction montre une augmentation monotone et non linéaire avec l'augmentation de la concentration de l'arsenic.

Conclusion générale

Bibliographie:

- [1] Abdelali Aouina, Mémoire de Magister en physique, Université Mentouri Constantine.
- [2] F. Bassani and G. Pastori Parravicini, in Electronic States and Optical Transition in Solids,
edited by B. Pamplin and R. Ballinger (Pergamon Press, 1975)
- [3] A.Bousetta, M.Mobarki, A.Bensaada,"Semi-conducteur de la technologie aux dispositifs".
- [4] 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).
- [5] Mme BAGHDADI Nawel née: KORTI, Evolution du paramètre exciton de Bohr en fonction des propriétés optoélectronique des semi-conducteurs III-V, (2013).
- [6] Noudjoud LEBGA, Propriétés structurales, élastiques et optiques de semi-conducteurs à grand gap, (2011).
- [7] John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors, Cambridge University Press, (1998).
- [8] CAPPY. A, Propriétés physique 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).
- [9] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électronique », 4Ed. Masson (1998).
- [10] Q.Tridoan, thèse de doctorat, université de Reims, Champagne.Ardenne, (2011).
- [11] E. Mooser, « Introduction à la Physique du solide », 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).

Bibliographie

- [12] F. Abelés, « Optical Properties of Solids», North-Holland Publishing Company (1972).
- [13] Jean-Louis Coutaz, "Optoélectronique terahertz", EDP Science ,2008.
- [14] K.Hacni, THESE, Etude des propriétés structurales et électroniques des alliages quaternaires $Zn_{1-x}Be_xSySe_{1-y}$ par la méthode FP-LAPW(2012).
- [15] Malika LABIDI, Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires, (2011).
- [16] E. Mooser, « Introduction à la Physique du solide », 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [17] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod université (1983).
- [18] N. Bouarissa, *Matter. Chem. Phys.* 72 (2001) 387.
- [19] J.E. Bernard, A. Zunger, *Phys. Rev. B*36, 3199 (1987).
- [20] L. Vegard, *Z. Phys.* 5 (1921) 17.
- [21] H. Mathieu, *Physique des Semiconducteurs et des Composants électronique*, 4 Ed. Masson (1998) 21, 23, 24, 25, 33, 419, 420.
- [22] S. Bounab, Thèse de magister, Univ. de Constantine, Algeria, (2002).
- [23] M. L .Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical properties of Semi-conducteurs*, Springer Series in Solide-State Sciences (1989).
- [24] S.J.Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, *J. Phys.:Condens. Matter* 2 (1990) 3253.
- [25] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer, Berlin, 1988.
- [26] T. Kobayasi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ.* 2 (1993) 7.
- [27] N. Bouarissa, M. Boucenna, *Phys. Scr.* 79 (2009) 015701.
- [28] N.Bouarissa, T.kobayasi, and H. Nara , *Solid. State. Commun.* 96 (1995) 689.

Bibliographie

- [29] A. G. Milnes and D. L. Feuchet, Heterojunctions and Metal-semiconductor Junction, Academic Press, (1972).
- [30] ANDERSON. R. L, Experiment on Ge-GaAs hétérojunctions, solid state electronics, voll.5, 1962, pp.341-351.
- [31] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.V.R. Rao, Infrared Phys, Vol.34, No.1, (1993) 95.
- [32] V. P. Gupta, N. M. Ravinda, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [33] N. M. Ravinda, S. Auluck, V. K. Srivastava, Phys. Stat. Sol. (b) 93 (1979) K 155.
- [34] P. J. L Hervé, L. K. J. Vandame, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.

Résumé

Basé sur la méthode des pseudo-potentiels empiriques couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA), les propriétés structurales, électroniques et optiques ont été examinées pour les alliages ternaire GaP_xSb_{1-x} et quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ dans la structure zinc blende.

Nos résultats ont montré que toutes les propriétés étudiées varient d'une façon monotone, Ce qui a permis d'obtenir de diverses possibilités pour l'obtention du paramètre de réseau, module de compressibilité, bande interdite et indice de réfraction. Cela va nous permettre d'avoir des nouveaux matériaux avec de nouvelles propriétés désirées.

Abstract

Based on the empirical pseudo-potential method within the virtual crystal approximation, the structural, electronic and optical properties of ternary GaP_xSb_{1-x} and quaternary $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ alloys have been examined in the zinc blend structure. Our results showed that all the studied properties vary monotonically which gives the possibility of obtaining diverse lattice parameter, bulk moduli gaps and refractive indices. This gives the opportunity to have new materials with new desired properties.

ملخص

بالاعتماد على طريقة الحقل الكاذب التجريبي الى جانب تقريب البلورة الافتراضية VCA، الخصائص البلورية الالكترونية والضوئية للخلائط الثلاثية والرابعة داخل بنية ZnS.

نتائجنا أظهرت ان كل الخصائص المدروسة تتغير بشكل رتيب الذي يتيح إيجاد احتماليات متنوعة لإيجاد ثابت الشبكة ومعامل الانضغاطية والعصابة الممنوعة ومعامل الانكسار .

كل هذا يسمح لنا بإيجاد مواد جديدة بخصائص مرغوبة .