



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

MESSAOUDENE IKRAM

THEME

**Effet de confinement quantique sur la structure de
bande des semiconducteurs à puits quantiques**

Soutenue le : //2014

Devant le jury composé de :

S.SAIB

M.C.A Univ. de M'sila

Président

N.BOUARISSA

Prof. Univ. de M'sila

Rapporteur

F.MEZRAG

M.C.B Univ. de M'sila

Examineur

Promotion Juin 2014



Remerciement



Avant tout, on tiens à remercier et exprimer notre profonde gratitude envers le bon dieu tout puissant : son amour, sa miséricorde et ses grâces à notre endroit nous ont fortifiée dans la persévérance et l'ardeur au travail.

Je tiens à remercier Monsieur Nadir BOUARISSA, Professeur à l'Université de M'sila, mon directeur de thèse, pour m'avoir proposé un sujet de thèse aussi passionnant, ainsi que pour sa gentillesse et son suivi dont j'ai pu apprécier l'enthousiasme et le sérieux dans le travail ; ce travail lui doit beaucoup.

J'aimerais lui témoigner ma profonde reconnaissante pour sa disponibilité, ses qualités pédagogiques et scientifiques. Je voudrais lui avouer que, sans lui ce travail n'aurait jamais vu le jour.

Mon grand respect aux membres de jury qui m'ont fait l'honneur d'accepter de juger ce modeste travail.

Mes remerciements vont aussi à tous les enseignants et le chef de département de physique qui ont contribué efficacement à ma formation.

A mes enseignants pour tous les efforts qui 'ils ont consentis, qui ont assuré ma formation du primaire jusqu'à l'université. et à tous ceux qui surent me faire aimer la physique, surtout Dr Ahmed BOUARISSA.

Remerciements très spéciaux à Dr Idris MESSAOUDENE et Dr Safa ATIA, pour m'avoir soutenu sans relâche pendant les moments les plus pénibles.

Je réserve une reconnaissance particulière à mon adorable mère et ma grande mère et mon oncle Mohamed, ainsi qu'à toute famille.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à tous mes amis pour leur soutien moral. Surtout ma chère Asma.

Merci à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce travail.

Vous etes trop nombreux pour vous citer !

Ikram Messaoudene.

Je dédie cette thèse à ...

A la mémoire de mon Père Madani رحمه الله

Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour vous.

*Rien au monde ne vaut les efforts fournis jour et nuit pour mon éducation et mon bien être.
Ce travail est le fruit de tes sacrifices que tu as consentis pour mon éducation et ma formation.*

A ma très chère Mère Khaira

*La source de tendresse et l'exemple du dévouement qui n'a pas cessé de m'encourager et de prier pour moi.
Ta prière et ta bénédiction m'ont été d'un grand secours pour mener à bien mes études.*

*Aucune dédicace ne saurait être assez éloquente pour exprimer ce que tu mérites pour tous les sacrifices que tu n'as cessé de me donner depuis ma naissance, durant mon enfance et même à l'âge adulte. Tu as fait plus qu'une mère puisse faire pour que ses enfants suivent le bon chemin dans leur vie et leurs études.
Je te dédie ce travail en témoignage de mon profond amour. Quisse Dieu, le tout puissant, te préserver et t'accorder santé, longue vie et bonheur.*

A ma sœur Soumia, son mari abd al Ghani.

A mes frères Ahmed lakhdar, abd al Kamel, Daoud.

Mes sœurs Abla, Asma.

Je vous dédie ce travail avec tous mes vœux de bonheur, de santé et de réussite.

A mes anges Louai & Razan.

En témoignage de l'attachement, de l'amour et de l'affection que je porte pour vous. Je vous souhaite un avenir plein de joie, de bonheur, de réussite et de sérénité.

A ma grand-mère, mes oncles & tantes, cousins & cousines,

Qui je le sais ma réussite est très importante pour vous. Que Dieu vous paye pour tous vos bienfaits.

A mes chères ami(e)s

En témoignage de l'amitié qui nous uni et des souvenirs de tous les moments que nous avons passé ensemble, je vous dédie ce travail et je vous souhaite une vie pleine de santé et de bonheur.

 *Ikram.*

Table des Matières

REMERCIEMENTS..... *i*
DEDICACES *ii*
Table des matières *iii*
Introduction Générale *1*

Chapitre I : les semiconducteurs et leur impact technologique

I-1) Définition d'un semiconducteur.....*5*
 I-1-1) La conduction électrique dans les semiconducteurs.....*5*
 I-1-2) La notion de bandes d'énergie dans un semiconducteur.....*6*
 I-1-3) bande d'énergie interdite (Gap).....*7*
 I-1-4) La conduction électrique des électrons et des trous.....*9*
 I-1-5) Semiconducteur intrinsèque.....*10*
 I-1-6) Semiconducteur extrinsèque.....*11*
 I-1-7) Le dopage des semiconducteurs.....*11*
I-2) Les Propriétés structurales des semiconducteurs.....*13*
 I-2-1) Les semiconducteurs cristallins*13*
 I-2-2) La constante de réseau*14*
I-3) les propriétés électroniques des semiconducteurs.....*15*
 I-3-1) Densité des états électroniques DOS et PDOS.....*15*
I-4) Les propriétés optiques des semiconducteurs.....*16*
 I-4-1) Les ondes électromagnétiques.....*16*
 I-4-2) Le spectre électromagnétique.....*17*
 I-4-3) Les transitions directes et indirectes.....*18*
 I-4-4) L'indice de réfraction.....*18*
 I-4-5) Propriétés physiques essentielles des semiconducteurs.....*18*
I-5) les propriétés diélectriques.....*19*
 I-5-1) La constante diélectrique statique ϵ_0 et de haute fréquences ϵ_∞*19*
I-6) L'impact technologique des semiconducteurs.....*20*
 I-6-1) Les photodétecteurs.....*20*
 I-6-1-1) La cellule photoconductrice.....*20*

I-6-1-2) La cellule photovoltaïque ou photodiode.....	21
I-6-1-3) La cellule solaire ou photopile.....	22
I-6-2) Les photoémetteurs.....	22
I-6-2-1) Les diodes électroluminescentes (LED).....	22
I-6-2-2) Les diodes laser.....	23

Chapitre II : Nanomatériaux

II-1) Définitions	25
II-1-1) Nanotechnologies.....	25
II-1-2) Nanomatériaux.....	26
II-1-3) Nano-objets.....	26
II-1-4) Nanoparticule.....	27
II-2) Différents types des nanomatériaux.....	27
II-3) Nanoagrégats semiconducteurs.....	27
II-3-1) Définitions.....	27
II-3-2) Effet quantique de taille.....	28
II-4) Effet du confinement quantique.....	29
II-4-1) Le concept des puits, fils et boîtes quantiques.....	29
II-5) Propriétés physiques des nanocristaux semiconducteurs.....	30
II-6) MODELISATION DE L'EFFET QUANTIQUE DE TAILLE.....	30
II-6-1) Modélisation.....	30
II-6-2) propriétés électroniques.....	31
II-6-3) Le confinement quantique.....	35
II-6-4) L'exciton dans le semiconducteur massif.....	35
II-6-5) L'exciton dans le semiconducteur nanocristallin.....	37
II-6-6) Spectre d'énergie et densité d'état d'un électron.....	38
II-7) Effet sur les propriétés structurales.....	39
II-8) Effet sur les propriétés optiques.....	39
II-8-1) L'absorption optique.....	39
II-9) Propriétés spécifiques des nanomatériaux.....	40
II-10) Différentes méthodes d'élaboration.....	41
II-10-1) méthode « descendante » (ou top down).....	41
II-10-2) méthode « ascendante » (ou bottom up).....	41

<i>II-10-3) Procédés par voie physique.....</i>	<i>42</i>
<i>II-10-4) Procédés par voie chimique.....</i>	<i>43</i>
<i>II-10-5) Les dépôts par voie sol-gel.....</i>	<i>43</i>
<i>II-10-6) Procédés par voie mécanique.....</i>	<i>44</i>
<i>II-11) Applications des nano semiconducteurs.....</i>	<i>44</i>
<i>II-11-1) Diodes électroluminescentes.....</i>	<i>44</i>
<i>II-11-2) Lasers.....</i>	<i>44</i>
<i>II-11-3) Photovoltaïque.....</i>	<i>45</i>
<i>II-11-4) Biologie.....</i>	<i>45</i>

Chapitre III : Résultats et discussions

<i>III-1) Modèle de la masse effective (puit infini).....</i>	<i>47</i>
<i>III-2) Les propriétés optiques (indice de réfraction).....</i>	<i>58</i>
<i>III-2-1) Les semiconducteurs binaires III-V : GaAs, InAs, InP.....</i>	<i>59</i>
<i>III-2-2) Les semiconducteurs binaires II-VI : CdTe, ZnSe.....</i>	<i>65</i>
<i>III-3) Les propriétés diélectriques.....</i>	<i>69</i>
<i>III-3-1) La constant diélectriques de haute fréquence (ϵ_{∞}).....</i>	<i>69</i>
<i>III-3-1-1) Les semiconducteurs binaires III-V : GaAs, InAs, InP.....</i>	<i>69</i>
<i>III-3-1-2) Les semiconducteurs binaires II-VI : CdTe, ZnSe.....</i>	<i>74</i>
<i>Conclusion générale.....</i>	<i>78</i>
<i>Références bibliographiques.....</i>	<i>79</i>

Liste des figures et tableaux



Introduction Générale

Introduction générale

La science des matériaux regroupe les domaines qui étudient la matière qui constitue les objets. Cela va des roches (en géologie) aux métaux en passant par les matériaux de construction (génie civil), les polymères (plastique, caoutchouc, peintures, résines) les céramiques, les verres.....

Le terme “matériau” désigne la substance dont sont faits les objets manufacturés. Il est plus restreint que le terme “matière”, qui désigne les liquides, les gaz et les solides en général. Ces nombreux concepts sont communs à tous ces domaines, c’est pourquoi l’on parle de la science des matériaux, mais certaines parlent aussi des sciences des matériaux qui par essence pluridisciplinaire : physique, chimie, physico-chimie, mécanique, Elle est au cœur de beaucoup des grandes révolutions techniques : en génie mécanique, électronique, nanosciences, nanotechnologies, etc..... [1].

Il est intéressant de constater que la science des matériaux est jeune avec un caractère interdisciplinaire original. Elle regroupe les différentes formes de pratiques industrielles dans leur caractère à la fois théorique et pratique, de la conception à la réalisation. Jusqu’au lendemain de la première guerre mondiale, pour l’essentiel, le domaine des matériaux est empirique. C’est l’expérience qui prime. A partir de 1920 et particulièrement de scientifiques Anglais, des modèles, des théories, des lois apparaissent.

L’usage et la connaissance de matériaux aux propriétés particulières a favorisé l’innovation technologique, qui a introduit dans notre environnement d’innombrables instruments et outils renfermant des mystères électroniques. Parmi ceux-ci, les Semiconducteurs qui sont des matériaux clés des techniques actuelles, vu la richesse de leur comportement vis-à-vis des sollicitations auxquelles ils sont soumis. Le domaine des semiconducteurs constitue un champ de bataille où la compétition est très vive. Ces matériaux sont très utilisés pour leurs différentes propriétés, et particulièrement pour leurs propriétés optiques, car ils présentent des résonances électroniques intenses au voisinage desquelles, des non- linéarités ont été observées. Cependant, dans ces conditions de résonances, l’absorption de ces matériaux s’est avérée en générale trop importante, ce qui permet leur utilisation dans les systèmes optoélectroniques. En effet ils sont utilisés pour la fabrication des diodes électroluminescentes (LEDs) ou des diodes laser (LDs) pompées électriquement dans la gamme allant de l’ultraviolet au visible ainsi les amplificateurs d’ondes radio travaillant dans

le domaine des micro ondes telles que celle utilisées dans les transmissions à haut débit sans fils, ou encore les commutateurs à haute tension des réseaux électriques. On envisage même que certains transistors pourraient remplacer les magnétrons dans les fours micro-ondes, aussi ils sont utilisés dans les mémoires optiques, les systèmes d'imagerie optique, médecine, les capteurs biologiques et chimiques avancés et pour produire des nanotubes pour des applications en nanoélectronique, en optoélectronique et en biochimie.

Toutefois ils sont par excellence les matériaux de l'optoélectronique permettant de contrôler les électrons pour la détection, la modulation et l'émission de la lumière, en d'autres termes, ils servent à réaliser des composants et systèmes optiques. Parmi les semiconducteurs eux-mêmes, les composés formés des éléments III-V de la classification de Mendeleïev qui ont des propriétés physiques remarquables entrant dans la plupart des composants de télécommunication. Par ailleurs les semiconducteurs II-VI ont longtemps constitué le prototype de matériaux radiatifs, grâce à leur bande interdite directe qui leur confère une forte efficacité radiative ainsi qu'à leur grande énergie du gap, conduisant à l'émission de photons situés dans le spectre du visible [1-2-3].

Actuellement le progrès technologique et industriel dépend fortement de l'avancement des matériaux. La conception des matériaux par ordinateur est devenue actuellement le moyen le plus efficace dans la recherche des sciences des matériaux. Ceci reflète les développements récents dans la théorie électronique pour l'explication de plusieurs résultats expérimentaux et la prédiction des propriétés physiques des matériaux qui n'ont pas encore été conçus. En plus la technologie des semi-conducteurs a donné la possibilité de mettre en œuvre des matériaux artificiels, tels que les super-réseaux, puits quantique, couche minces fabriquées par plusieurs techniques de la croissance des couches cristallines.

Actuellement on peut fabriquer des matériaux avec des nouvelles propriétés qui ne se trouvent pas dans la nature. Il s'agit de décrire les matériaux par des modèles théoriques qui peuvent expliquer les observations expérimentales et surtout d'effectuer des simulations ou «des expériences virtuelles» qui peuvent prédire le comportement des matériaux là où l'expérience réelle fait défaut, ou qu'elle soit très coûteuse et parfois difficilement réalisable. Ainsi, l'intérêt de la modélisation et la simulation est d'étudier les diverses possibilités qui se présentent, et d'orienter l'industrie vers les meilleurs choix avec un coût minimum [4].

Depuis une dizaine d'années, le "nano" est sans doute le préfixe le plus en vogue dans les revues scientifiques. Centaines de publications illustrent chaque mois le formidable défi lancé, en 1959, par le prix Nobel de physique Richard Feynman : "Il y a plein de place en bas de l'échelle ! Considérons la possibilité de faire un objet très petit, à l'image des cellules,

aussi petit et aussi fonctionnel, que nous puissions commander, et qui exerce une fonction à cette échelle. L'arrangement des objets à une petite échelle, nous découvrirons que la matière possède une gamme possible de propriétés énormément plus étendue, et qu'avec nous pourrons réaliser beaucoup plus de choses" [4].

Désormais, le préfixe « nano » est devenu très à la mode; l'étude des propriétés optiques linéaires et non-linéaires des cristaux semiconducteurs de dimensions nanométriques est devenue depuis quelques années un important domaine de recherche, qui se justifie pour des raisons aussi bien fondamentales que technologiques. Dans ce contexte, une recherche vaste a été développée pour l'utilisation de semiconducteurs de taille nanométrique ; ce qui a permis d'exploiter leurs incroyables propriétés. Sous forme de couches minces, ces derniers ont permis l'intégration de milliers de composants conduisant ainsi à la miniaturisation des dispositifs utilisés dans des applications technologiques telles que: les diodes électroluminescentes, les dispositifs laser, et les cellules photovoltaïques [5].

Les nanotechnologies recouvrent un grand nombre de domaines technologiques ayant pour dénominateur commun la taille nanométrique des structures (un nanomètre = 10^{-9} m). Parmi les domaines d'application, on peut citer par exemple l'électronique et les technologies de l'information et de la communication, qui font appel à des structures de plus en plus petites, atteignant la taille nanométrique. La Commission Européenne a estimé que le marché mondial des nanotechnologies en 2001 était légèrement supérieur à 40 milliards d'Euros. En 2010-2015, selon une estimation de la National Science Foundation (NSF USA), les enjeux économiques liés à l'avènement des nanotechnologies au niveau mondial devraient atteindre 1000 milliards de dollars par an (tous secteurs confondus), et concerner directement l'emploi de près de 2 millions de personnes. L'impact économique des nanomatériaux est estimé à hauteur du tiers de ce secteur, soit 340 milliards de dollars [4].

Le développement récent de la nanotechnologie a ouvert des nouvelles frontières fondamentales appliquées à la science des matériaux et à la technologie. En effet à l'échelle nanométrique, les propriétés des électrons à l'intérieur du matériau ainsi que les interactions atomiques sont influencées par la taille amène au changement des propriétés spécifiques (magnétique, optique, électronique.....) sans changement de la composition [2]. En raison du rapport élevé de la surface-volume lié à l'échelle nanométrique dans les matériaux une amélioration énorme au niveau des propriétés chimiques est également réalisable par la réduction de la taille. Alors, en créant des nanostructures, il est possible de contrôler les propriétés fondamentales des matériaux à travers l'effet de la surface et de la taille. Ces

nouveaux matériaux ; qui fréquemment montrent un comportement intermédiaire entre celui du solide massif (macroscopique) et celui du système moléculaire, fonctionnent sur les principes de la physique quantique, et on peut alors prédire leurs comportements, pour cela, la synthèse des nano particules représente la matière première pour ces réalisations, qui promettent des dispositifs plus petits et plus rapides avec un faible coût, et qui consomment une très faible énergie. Les nano particules semiconducteurs et métalliques occupent alors un intérêt majeur pour les scientifiques, du fait de leurs natures électroniques et comportement unique : ils obéissent aux lois de la physique quantique, contrairement aux matériaux massifs ; qui suivent les lois de la physique classique [2].

Depuis 25ans, l'optique et l'optoélectronique ont été révolutionnées avec l'apparition de structures artificielles dont les propriétés ne peuvent être comprises qu'en tenant compte de leurs caractères quantiques, et de la nature ondulatoire de l'électron, ces structures sont à la base de puits quantiques.

Les puits quantiques possèdent de multiples avantages tels que:

- ✓ La différence d'énergie entre deux niveaux quantiques peut être choisie en ajustant la dimension du puits.
- ✓ La largeur spectrale de la raie de luminescence est plus faible que celle qui résulte d'une émission bande à bande dans une structure semi-conductrice classique.

Les semiconducteurs qui permettent de réaliser un puits quantique sont sous formes nanocristallines ; Car ces mêmes matériaux en cette taille ont des propriétés électroniques et optiques qui diffèrent de celle du cristal massif, par le fait du confinement quantique des excitations électroniques dans un volume réduit [5].

Les objectifs de ce travail consistent à étudier l'effet de confinement sur les propriétés électroniques et optiques des puits quantiques de quelques semiconducteurs de type III-V et II-VI. Par ailleurs, la structure électronique a été étudiée, ainsi que les propriétés optiques et diélectriques.

Ce mémoire se divise en trois chapitres. Le premier chapitre est consacré à une introduction bibliographique aux semiconducteurs et leurs propriétés fondamentales. Le deuxième chapitre parle sur les nanomatériaux et leurs applications technologiques. Enfin le chapitre III se rapporte à notre étude de l'effet du confinement sur les propriétés d'intentes des semiconducteurs : InAs, InP, GaAs, ZnSe et CdTe.

Chapitre I :

**Les Semiconducteurs et leur
impact Technologiques**

I-1) Définition d'un semiconducteur

Un semiconducteur est un cristal qui est isolant s'il est pur et au zéro absolu, et dont la conductivité électrique est due à l'agitation thermique, à des impuretés ou à différents types de défauts. Les semiconducteurs sont des corps solides dont la conductivité électrique se situe entre celle des métaux et celle des isolants [6]. Elle peut varier sur plusieurs ordres de grandeur sous l'effet de la température et/ou de l'éclairement. Un autre facteur modifiant fortement la conductivité est la présence d'impuretés (dopage) [7].

I-1-1) La conduction électrique dans les semiconducteurs

La conductivité électrique des solides est une propriété qui est due à la présence d'électrons libres qui se déplacent dans le milieu et génèrent ainsi un courant électrique. Le courant électrique est un simple écoulement de ce fluide d'électrons libres [6]. Un semiconducteur sera isolant à une température de 0°K, contrairement à un métal, alors qu'à température plus élevée, il devient un conducteur électronique par excitation thermique, comme c'est indiqué sur le schéma ci-contre [8] :

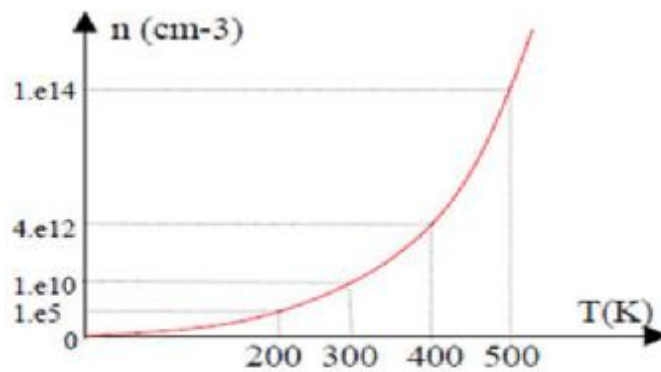


Figure I-1) Evolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température.

Un semiconducteur peut transporter de l'électricité et devenir conducteur, c'est cette propriété qui est à la source de la forte réactivité des semiconducteurs leur permette, en fait, d'être d'un intérêt technologique.

Pour mieux comprendre cette dynamique des électrons responsable du phénomène de conduction dans un semiconducteur, on fait appel à la théorie des bandes, qui décrit le comportement des électrons, dans le cas où une excitation leur permet de devenir libres et participent à la conduction [9].

I-1-2) La notion de bandes d'énergie dans un semiconducteur

Le comportement électrique des semiconducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes ; Celui-ci est un modèle quantique en physique du solide, il détermine les énergies possibles des électrons dans un solide et permet de comprendre les propriétés électroniques et optiques, il est issu de la théorie des orbitales moléculaire.

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 continue 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 [10].

Les deux bandes d'énergie de valence et de conduction jouent un rôle particulier dans la détermination des propriétés électroniques du solide [11].

La bande de valence et la bande de conduction, sont séparées par une bande dépourvue de niveau permis, nommé bande interdite (Figure I-2), 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 courants de conduction électrique [10].

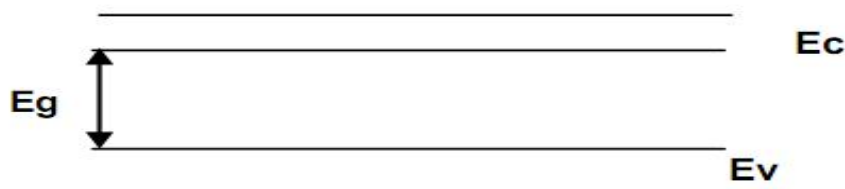


Figure I-2) Diagramme des bandes d'énergie des semiconducteurs.

I-1-3) BANDE D'ENERGIE INTERDITE (GAP)

L'intervalle séparant les deux bandes et noté E_g est appelé le gap. Le gap est la bande interdite, c'est -à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [12].

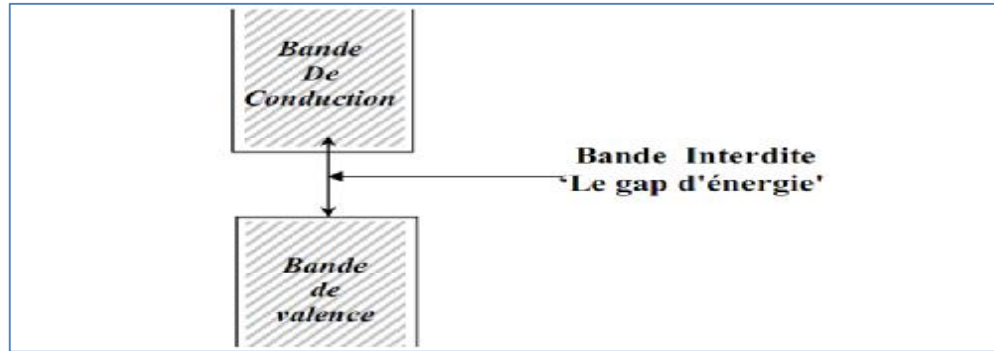


Figure I-3) : Le gap d'énergie "bande interdite".

Dans les semiconducteurs, l'énergie de gap décrit l'énergie nécessaire pour permettre à un électron de sauter de la bande de valence vers celle de conduction. En outre, c'est la largeur de cette bande d'énergie qui trace une ligne entre les semiconducteurs et les isolants [13].

Il est de quelques eV dans les solides. Quand sa valeur est limitée, de l'ordre de 1 eV, le solide est un semiconducteur car une conduction réduite est quand même possible. Quand sa valeur est plus importante, toute conduction est impossible car le changement d'énergie de l'électron est trop élevé Le solide est alors un isolant [14].

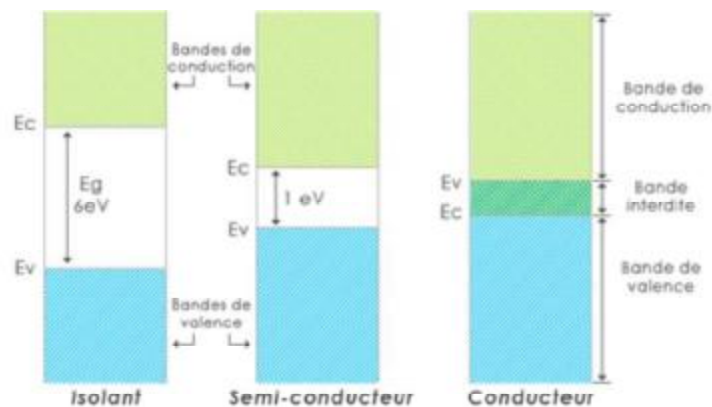


Figure I-4) Structure des bandes d'énergie dans un isolant, un semiconducteur et un conducteur.

Il y a 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 [12] comme le montre la figure (I-5).

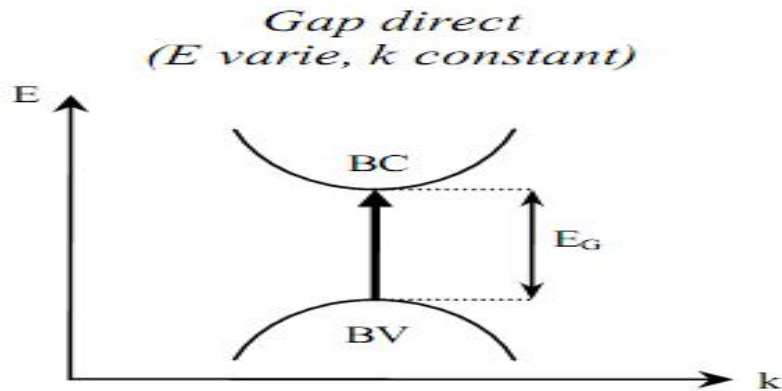


Figure I-5) l e gap direct.

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 de K [12] comme le montre la figure (I-6).

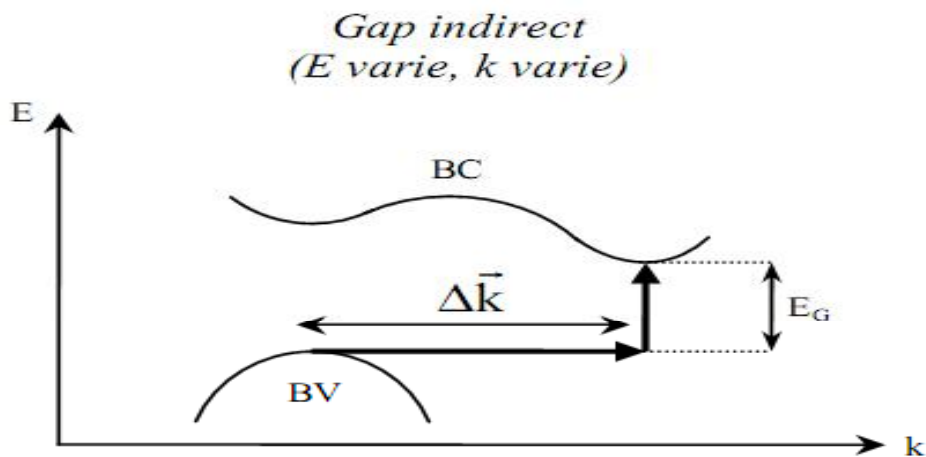


Figure I-6) Le gap indirect.

Si on se limite aux principaux semiconducteurs que sont les éléments du groupe IV et les composés binaires III-V et II-VI, les matériaux à gap indirect sont Si, Ge, AlP, AlAs, AlSb et GaP, tous les autres ont un gap direct.

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semiconducteur avec un rayonnement électromagnétique et par suite dans le fonctionnement des composants optoélectroniques [12-15].

Le phénomène de conduction dans les semi-conducteurs est assuré par les porteurs de charge, ces porteurs de charge peuvent être des électrons ou des trous [9].

I-1-4) La conduction électrique des électrons et des trous :

Lorsque la température est différente de zéro, un certain nombre d'électrons de la bande de valence sont excités dans la bande de conduction. Compte tenu de la nature antiliante des fonctions d'onde électroniques dans la bande de conduction, ces électrons sont des particules quasi-libres dans le semiconducteur. Nous verrons dans le paragraphe suivant comment représenter ces particules quasi-libres par des quasi-particules libres, en leur affectant une masse effective différente de la masse de l'électron libre. Mais revenons pour l'instant sur les électrons de la bande de valence. Dans la mesure où la bande de valence est incomplète, ces électrons peuvent aussi se déplacer et par suite transporter du courant électrique. Lorsqu'un électron d'une orbitale liante occupée passe sur une orbitale liante voisine, vide, la place vide se déplace dans l'autre sens.

Les propriétés des états vacants dans une bande presque pleine sont très importantes dans la physique des semiconducteurs et en physique électronique.

Les états vacants dans une bande presque pleine sont appelés trous, ils sont dus alors à l'interaction des électrons avec le réseau cristallin.

Dans la mesure où la bande de valence est toujours quasi-pleine, l'étude du mouvement des électrons de cette bande est un problème à N corps. On ramène alors le problème à une particule en affectant une identité au trou et en étudiant le mouvement des trous qui, en raison de leur densité relativement faible, peuvent être traités comme des quasi-particules élémentaires indépendantes. Dans la mesure où le trou se déplace dans le sens opposé à l'électron, on lui affecte une charge positive égale à $+e$. D'autre part, le mouvement du trou résulte du mouvement de l'ensemble des électrons occupant les orbitales liantes du cristal, on lui affecte comme à l'électron une masse effective [15 -17].

Le rôle important joué par ces particules imaginaires (quasi particule) et dû au fait, qu'elles réagissent comme des porteurs de charges mobiles. On peut dire que, la conduction électrique dans un semi-conducteur a pour origine :

- ✓ Les électrons, qui se trouvent dans la bande de conduction.
- ✓ Les états inoccupés ou trous, présent dans la bande de valence.

La répartition de ces porteurs et donnée sur le schéma si dessous [18].

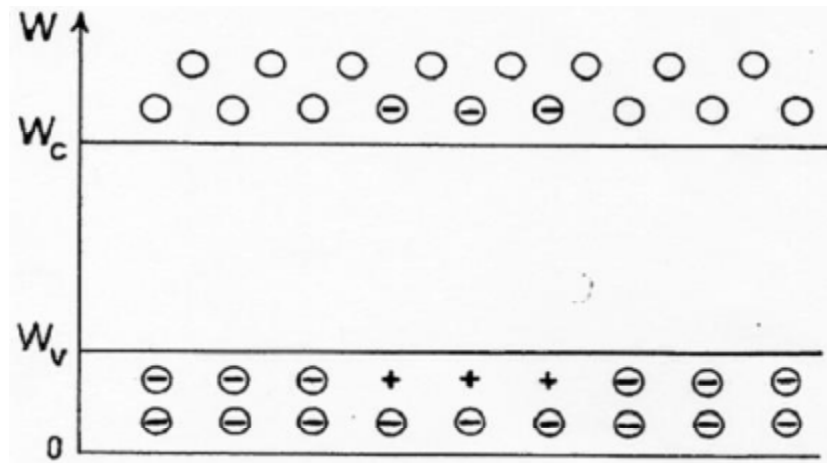


Figure I-7) Répartition des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence à la température T. (le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre des trous dans la bande de valence).

Afin de comprendre le phénomène de conduction dans un semiconducteur, nous devons définir quelques termes importants pour la description des semiconducteurs.

I-1-5) Semiconducteur intrinsèque

Un semiconducteur est dit intrinsèque, si ces propriétés électriques sont entièrement dues à sa composition chimique et à sa structure cristalline et non pas à la présence d'impuretés. Ce comportement correspond à son état pur, donc parfait ; sans défaut structural ou impuretés.

Toutefois, un semiconducteur réel n'est jamais parfaitement intrinsèque, ces semiconducteurs ne conduisent pas ou très peu le courant sauf s'ils sont portés à haute température [12].

Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour 10^{13} atomes de l'élément semiconducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmentent avec la température [19,20].

L'agitation thermique suffit pour fournir l'énergie nécessaire à la transition d'un électron, de la bande de valence à la bande de conduction, on parlera donc de conductivité intrinsèque celle-ci augment avec la température [12].

I-1-6) Semiconducteur extrinsèque

Un semiconducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semiconducteur intrinsèque (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semiconducteur) [19]. Ces semiconducteurs sont d'un grand intérêt technique, car leur conductivité électrique peut être fortement modifiée par l'adjonction dans leurs structures cristallines d'impuretés spécifiques. Les propriétés électriques étant ainsi déterminées par la présence des impuretés, on parle de conductivité extrinsèque [12,17].

La concentration en électrons n est différente de la concentration en trous p . Cette différence est obtenue le plus souvent en introduisant dans le matériau de manière intentionnelle une faible concentration d'impuretés de nature contrôlée. Cet ajout est appelé dopage [21].

I-1-7) Le dopage des semiconducteurs

Cette technique consiste à implanter des atomes correctement sélectionnés nommés impuretés dans un semiconducteur intrinsèque. La forte variabilité des propriétés électriques est due d'une part, à la nature des impuretés et d'autre part, à la manière selon laquelle elles s'incorporent dans le semiconducteur [17].

Il a une influence considérable sur les propriétés des semiconducteurs. Par exemple, l'ajout d'un atome de bore pour 10^5 atomes de silicium augmente la conductibilité du silicium d'un facteur 10^3 à température ambiante. Les éléments chimiques choisis comme dopant présentent une valence différente de celle du semiconducteur. Ils se positionnent dans son réseau en site substitutionnel, c'est-à-dire en remplacement de certains atomes [21].

La technique du dopage augmente la densité des porteurs, par la suite la conductivité électrique augmente [22]. Selon la nature des impuretés il existe deux types des semiconducteurs: type n et type p.

✓ **Type n** : Considérons par exemple les semiconducteurs 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 un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui se situe juste au-dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semiconducteur est dit de type n. Il augmente la densité des électrons dans le matériau semiconducteur par l'incorporation d'un certain nombre d'atomes riches en électrons.

✓ **Type p** : Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (Bore, aluminium ou galium). Cet atome ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semiconducteur est dit de type p. Il consiste à augmenter la densité des trous, pour ce faire, on introduit un certain nombre d'atomes pauvres en électrons dans le semiconducteur, afin de créer un excès de trous.

Du point de vue énergétique, la formation des bandes interdites étant due à la régularité de la structure cristalline, les porteurs libres introduisent des états accessibles à l'intérieure de ces bandes, rendant le gap plus « perméable » à un niveau accepteur ou donneur selon le type de dopage. Dans le cas du silicium, ce caractère est décrit par les figures (I-8) et (I-9) [19,23].

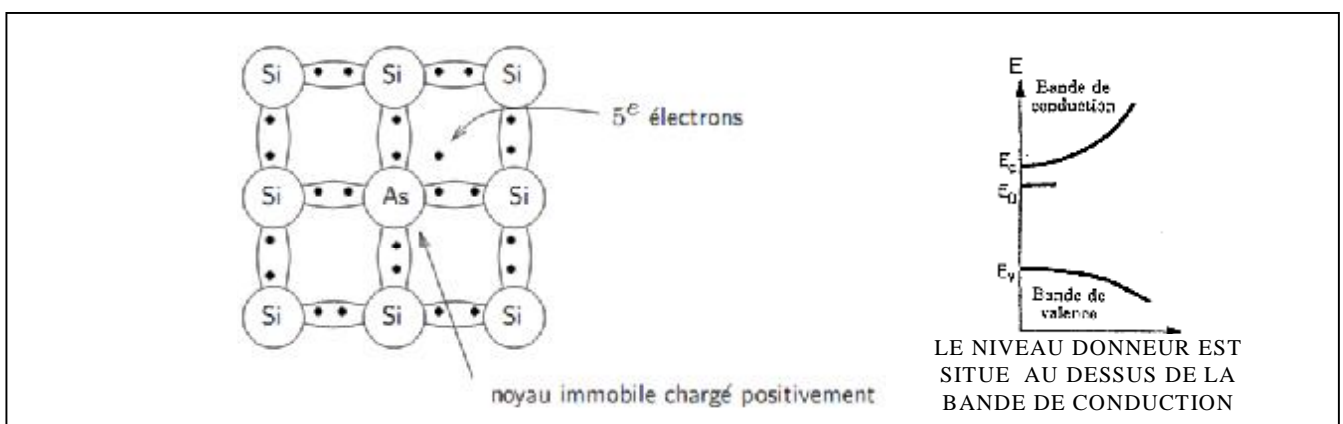


Figure I-8) Représentation schématique de la substitution d'un atome d'arsenic à un atome de silicium (exemple du dopage N avec la structure de bande énergétique relative).

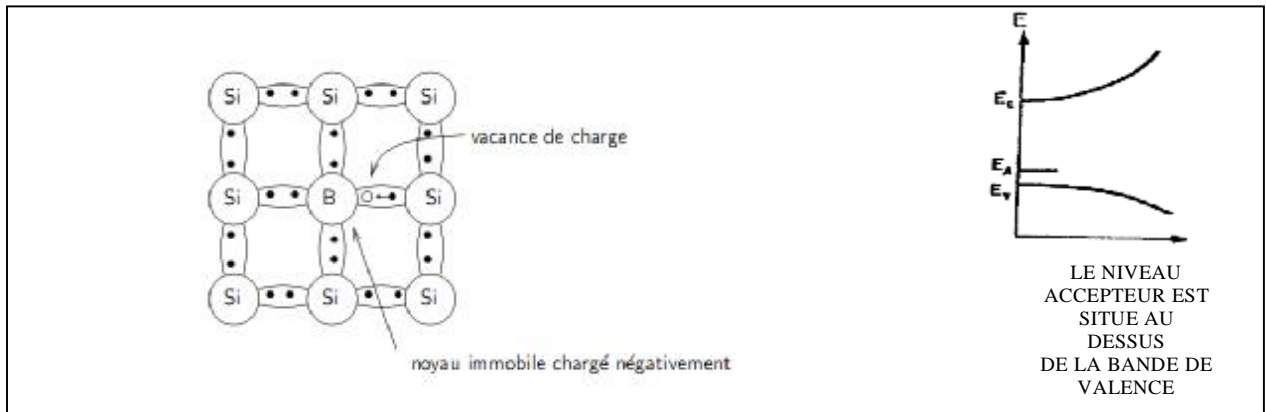


Figure I-9) Représentation schématique de la substitution d'un atome de bore à un atome de silicium (exemple du dopage P) avec la structure de bande énergétique relative.

L'étude du fonctionnement des composants électroniques passe par une maîtrise préalable des phénomènes physiques régissant les propriétés des électrons dans le semiconducteur, il est par conséquent nécessaire de préciser les propriétés structurales, optiques et diélectriques de ces semiconducteurs, ces propriétés conditionnent les caractéristiques optiques et électriques de ces composants électroniques [12].

I-2) Les Propriétés structurale des semiconducteurs

I-2-1) Les semiconducteurs cristallins

Les caractéristiques physiques fondamentales des semiconducteurs 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.

Cet 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 générer la structure cristalline.

Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement Coulombiennes [12,15].

L'immense majorité des semiconducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si, Ge), sont basés sur la même structure cristalline, celle de diamant (Si, Ge) [24].

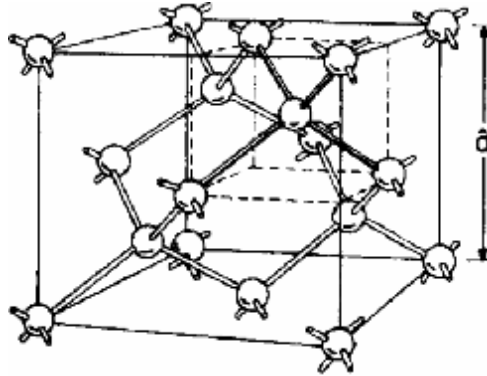


Figure I-10) structure cristalline Diamant.

En plus du gap énergétique, certains matériaux semiconducteurs sont identifiés par leur maille cristalline « a » [25].

I-2-2) 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 , γ qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (I-11) suivant les valeurs relatives de ces six grandeurs on définit les différentes structures cristallines [17].

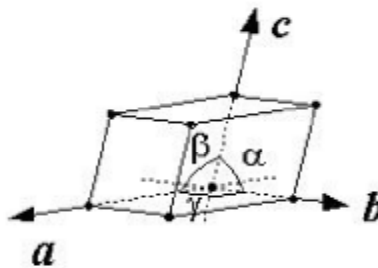


Figure I-11) Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

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 la densité des atomes et donc également la densité électronique. Néanmoins ces paramètres de réseau ne sont pas constants, ils peuvent varier en fonction de la température et de la pression [9].

I-3) les propriétés électronique des semiconducteurs

I-3-1) Densité des états électroniques DOS et PDOS

La densité d'états électroniques est une grandeur essentielle pour calculer la distribution d'énergie d'électrons dans les bandes de valence et de conduction [26].

Il existe des propriétés exigeant la connaissance de la densité d'états DOS (Density of States) ou partial PDOS (Partial Density of States), par exemple : l'analyse des fonctions diélectriques, propriétés de transport et la photoémission.

La densité d'états électroniques, quantifie le nombre d'états électroniques possédant une énergie donnée dans le matériau considéré. Elle est généralement notée par l'une des lettres g , ρ , n ou N . Plus précisément, on définit la densité d'états $N(E)$ par le fait que $N(E) dE$ est le nombre d'états électroniques d'énergie comprise entre E et $E + dE$ par unité de volume du solide, ou plus fréquemment, par maille élémentaire du cristal étudiée c.-à-d. l'intégrale de la fonction du spectre sur la première zone de Brillouin, La densité d'états (DOS) pour une bande d'indice n , est nommée par $N_n(E)$, définie comme suit [27]:

$$N_n(E) = \int \frac{dK}{4\pi^3} \delta(E - E_n(K)) \quad (I.1)$$

La densité des états d'énergie totale $N(E)$ est obtenue par la sommation de toutes les bandes. L'intégrale de $N(E)$ à partir le plus petit niveau jusqu'à celle de Fermi nous donne tout le nombre d'électrons dans la cellule primitive. En outre, le DOS est souvent utilisé pour l'analyse visuelle rapide de la structure des bandes d'énergie. Le DOS peut également aider à comprendre les changements de la structure électronique, lorsque la maille primitive est sous une contrainte externe.

Il est souvent utile de savoir si les crêtes principales dans le DOS sont de caractère de s de p, ou de d. Les analyses de PDOS peuvent résoudre ce problème et donnent une prédiction qualitative sur la nature de l'hybridation des niveaux d'électrons dans le système, sur l'origine des caractéristiques principales dans les spectres optiques, etc... [27].

I-4) Les propriétés optiques des semiconducteurs

L'étude des propriétés optiques des semiconducteurs a récemment connu un intérêt croissant dû à leur capacité à manipuler la lumière, permettant ainsi le contrôle de l'émission de la propagation de cette lumière. Les paramètres fondamentaux sont évidemment, l'état de la population électronique à l'équilibre thermodynamique et l'évolution de cette population lorsque le semiconducteur est soumis à une perturbation extérieure, soit une tension électrique ou un rayonnement électromagnétique [12].

Le rayonnement électromagnétique peut être décrit de manière corpusculaire comme la propagation de photons (boson vecteur de l'interaction électromagnétique), ou de manière ondulatoire comme une onde électromagnétique [28].

I-4-1) Les ondes électromagnétiques

Un champ électromagnétique nous entoure en permanence, exactement comme l'air qui nous entoure. Ce champ est créé par la présence des particules chargées, comme les électrons et les protons, le déplacement de ces particules donne un courant électrique qui va donner à son tour un champ magnétique, une simple perturbation de ce champ électromagnétique permet de créer la propagation d'une onde électromagnétique.

Toute onde est caractérisée par deux paramètres, sa fréquence et sa longueur d'onde [29].

La forme de cette onde est schématisée ci-dessous :

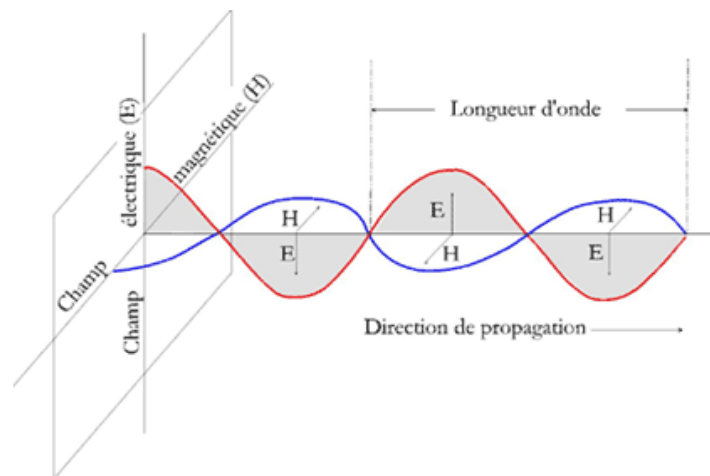


Figure I-12) L'onde électromagnétique.

I-4-2) Le spectre électromagnétique

Les ondes électromagnétiques couvrent un grand nombre de phénomènes, elles sont extrêmement utiles dans notre vie de tous les jours.

Il faut dire que ces rayonnements ont la même nature. D'ailleurs ils portent des noms différents, mais c'est aussi parce qu'ils se manipulent très différemment les uns des autres, ces ondes sont :

- Les ondes radio,
- Micro ondes,
- Infrarouges,
- Lumière visible,
- Ultraviolet,
- Rayon X,
- Rayons gammas.

Tous ces noms désignent en fait le même phénomène « onde électromagnétique ». Chaque type de rayonnement est caractérisé par une gamme de fréquence, en partant de ceux qui ont les plus faibles fréquences, c'est ce qu'on appelle « spectre électromagnétique » Présenté sur la figure (I-13) [29].

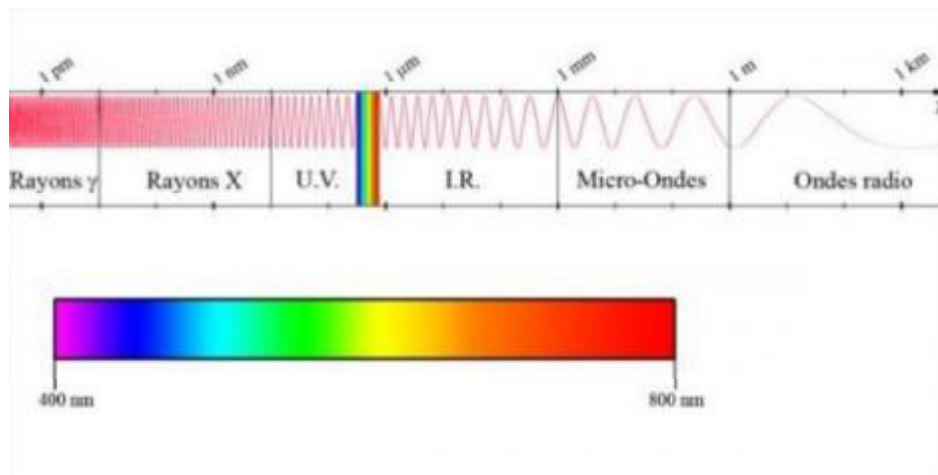


Figure I-13) Le spectre électromagnétique.

I-4-3) Les transitions directes et indirectes

Dans un semiconducteur, on s'intéresse surtout aux transitions à travers la bande interdite appelée gap. Notamment les recombinaisons électron-trou sont des transitions régies en mécanique quantique, par certaines règles de sélections citées ci-dessus (conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement) [30].

Dans l'étude des composants optoélectroniques, il est important d'avoir en esprit la relation énergie –longueur d'onde pour traduire en (eV) la caractéristique d'un rayonnement définie en μm [12].

Si la valeur $\frac{1.24}{\lambda(\mu)} < E_g$ (eV), le cristal semiconducteur sera transparent. Il devient opaque lorsque $\frac{1.24}{\lambda(\mu)} > E_g$ (eV) le photon a alors une énergie suffisante pour exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction [14].

I-4-4) L'indice de réfraction

L'optimisation des composants optoélectroniques nécessite une connaissance précise de l'indice de réfraction des matériaux semiconducteurs. L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau possède à ralentir et à dévier la lumière.

Cet indice de réfraction (souvent noté n) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ($C=299\,792\,458\text{ Km/s}$) et la vitesse de la lumière dans le matériau.

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques et dans les structures optoélectroniques ; comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques et les fibres optiques [9,31].

I-4-5) Propriétés physiques essentielles des semiconducteurs

- les semiconducteurs sont sensibles à la lumière visible, mais transparente dans l'infrarouge.
- leur résistance est comprise entre 10^{-5} et $10^{+6}\ \Omega$.
- leur résistivité diminue quand la température augmente au contraire des métaux [32].

Les propriétés optiques de la matière peuvent être décrites par la fonction diélectrique transverse $\epsilon(\omega)$.

Cette fonction est la somme de deux composantes : $\varepsilon_1(\omega)$ composante ou partie réelle et $\varepsilon_2(\omega)$ composante ou partie imaginaire tel que :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega).$$

Il y a deux types de transitions qui contribuent dans $\varepsilon_1(\omega)$:

Transition intra-bande plus importante pour les métaux et transitions inter-bandes. Les transitions inter-bandes à leurs tours sont en deux types : directes et indirectes. Ces dernières qui nécessitent la participation des phonons, est souvent négligées [32].

I-5) les propriétés diélectriques

I-5-1) La constante diélectrique statique $\varepsilon(0)$ et de haute fréquences $\varepsilon(\infty)$

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 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 de diélectrique $\varepsilon(\omega, \vec{k})$, cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur d'onde \vec{k} [33].

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

Elle a été définie pour tenir compte de la contribution du cortège électronique des ions. Le tableau (I-1), présent des valeurs expérimentales de $\varepsilon(0)$ et $\varepsilon(\infty)$ pour quelques matériaux semiconducteurs [33].

Matériau	Constante diélectrique statique $\epsilon(0)$	Constante Diélectrique Optique $\epsilon(\infty)$
Si	11,7	11,7
Ge	15,8	15,8
In Sb	17,7	15,6
InAs	14,9	12,3
InP	12,4	9,6
GaAs	12,9	10,9
GaSb	16,1	14,4
GaP	10,7	8,5

Tableau I-1) constantes diélectriques statique et optique de quelques matériaux semiconducteurs à 300 K°.

I-6) L'impact technologique des semiconducteurs

L'optoélectronique est le domaine de l'électronique qui exploite les phénomènes optiques en relation avec les porteurs de charge.

Elle met en évidence des phénomènes d'électroluminescence qui sont à la base des combinaisons radiatives électron-trou, régit par les semiconducteurs et cela pour la réalisation des composants photoémetteurs.

En parallèle, l'étude de ces phénomènes a permis de réaliser des photorécepteurs appelés aussi photo-détecteurs, en parfaite concordance avec ces photoémetteurs.

I-6-1) Les photodétecteurs

Les photo-détecteurs sont des dispositifs qui transforment la lumière qu'ils absorbent en grandeurs mesurables, à savoir un courant ou une tension électrique. Tout en se basant sur les phénomènes physiques que présentent les matériaux semiconducteurs.

I-6-1-1) La cellule photoconductrice

C'est un matériau semiconducteur qui exploite la conductivité électrique, assurée par la création des porteurs de charge, sous l'effet d'un éclairage.

La cellule est polarisée par une tension V débitant un courant électrique I par l'intermédiaire de deux contacts ohmiques comme c'est indiqué sur la figure (I-14). La conductance de la cellule est fonction de sa géométrie.

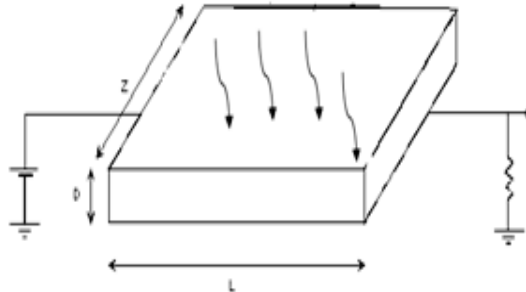


Figure I-14) Cellule photoconductrice.

Les semiconducteurs utilisés pour la réalisation de telles cellules sont :

- Les composés binaires (II-VI) CdS et CdSe dans le spectre visible.
- Le sulfure de plomb PbS dans le proche infrarouge [9,12].

I-6-1-2) La cellule photovoltaïque ou photodiode

L'effet photovoltaïque a été découvert par Antoine Becquerel en 1839, c'est la conversion de la lumière en électricité, mais il faudra attendre près d'un siècle pour que les scientifiques approfondissent et exploitent ce phénomène de la physique.

Une photodiode est formée d'une jonction PN créée en juxtaposant un semiconducteur dopé N avec un semiconducteur dopé P.

Les photons incidents créent des porteurs libres. Dans les régions N et P, ces photoporteurs minoritaires diffusent vers la zone de charge d'espace située entre les deux régions N et P et vont par la suite être propulsés par le champ électrique appliqué vers la région où ils deviennent majoritaires.

Ces porteurs contribuent à la création du courant par diffusion. Les paires électrons-trou créées dans la zone d'espace sont dissociées par ce champ électrique. Le trou est repoussé vers la région P et l'électron vers la région N. Ces porteurs donnent naissance à un photo-courant de génération. Le photo-courant résultant contribue au courant inverse.

Le courant inverse est formé par ces deux contributions (photo-courant de diffusion et photo-courant de génération).

I-6-1-3) La cellule solaire ou photopile

Une photopile comprend essentiellement, une couche épaisse faite de matériau semiconducteur pour absorber la quasi-totalité du rayonnement incident et d'une jonction semi-conductrice.

Elle fonctionne exactement comme une photodiode mais sans polarisation extérieure, débitant un photo-courant. Celui-ci est collecté au moyen des contacts métalliques reliés à un circuit électrique fermé [12].

Pour réaliser ces composants, on utilise soit du silicium monocristallin (très pur) ou de l'arséniure de gallium, ils offrent le meilleur rendement mais sont très coûteux, c'est pour cela on fait appel au silicium poly-cristallin ou à des matériaux en couches minces (sulfure de cadmium, silicium amorphe). Ils sont économiques mais de rendement plus faible. Ces cellules solaires sont notamment utilisées dans le domaine spatial [12].

I-6-2) Les photoémetteurs

Il se trouve que le phénomène d'émission dans les semiconducteurs a été utilisé pour la fabrication de divers dispositifs accommodés, pour assurer une fonction électronique désirée.

I-6-2-1) Les diodes électroluminescentes (LED)

La structure de base d'une diode électroluminescente LED (Light Emitting Diode) est une jonction PN polarisée en direct, les électrons qui sont majoritaires dans la région de type n sont injectés dans la région p, permettant ainsi de créer des recombinaisons électron-trou, provoquant une radiation lumineuse en quantité suffisante.

Ces diodes sont réalisées à base de matériaux semiconducteurs dont les recombinaisons sont essentiellement radiatives [12].

Le spectre d'émission, c'est-à-dire la couleur du rayonnement d'une diode électroluminescente est conditionnée par le gap du matériau de type p, ou bien par le type du dopant.

Elles sont fabriquées à base des alliages semiconducteurs III-V du type $GaAs_xP_{1-x}$, $GaAl_xAs_{1-x}$ ou $Ga_xIn_{1-x}P$, couvrant pratiquement tous le spectre du visible. La figure (1-15) montre le spectre d'émission de ces alliages [12].

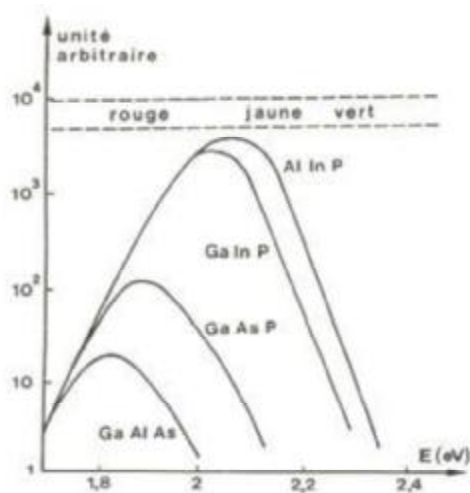


Figure I-15) Spectre d'émission des différents alliages.

Les composés II-V et III-V à grand gap sont bien adaptés à l'émission bleue, toute fois, la maîtrise du dopage a longtemps compliqué la réalisation des jonctions PN pour ces matériaux.

Ces LED sont souvent utilisées dans l'affichage alphanumérique, opto-coupleurs, transmission de signaux par fibre optique.....etc. [12].

I-6-2-2) Les diodes laser

Comme tout laser, une diode laser est similaire à une diode électroluminescente, sauf que les deux régions n et p sont fortement dopées.

Elle fonctionne à l'aide d'un milieu amplificateur qui est le matériau semiconducteur mettant en évidence le phénomène de l'émission stimulée et d'un processus de pompage assuré par un courant électrique [12].

Ce courant va créer le peuplement de la bande de conduction. L'inversion de population est assurée par la création d'un très grand nombre de paires électrons- trous dans le matériau, résultant d'un bombardement électronique ou excitation optique.

L'émission d'une radiation lumineuse est régit par les phénomènes d'électroluminescence qui se basent sur l'émission d'un photon.

Cette diode laser peut être divisée en trois zones comme suit:

- Une couche de confinement de type n,
- Une zone active,
- Une couche de confinement de type p.

Ces couches de confinement sont utiles dans l'optimisation du courant dans la diode et l'augmentation de son rendement.

Ces diodes sont formées d'une structure multicouche, ce qui nécessite un accord de maille entre ces matériaux.

Ce paramètre important conditionne l'absence de contraintes au niveau des interfaces. Ces contraintes créent des centres de recombinaisons non radiatives souvent non désirées.

La polarisation directe de la diode permet de peupler la bande de conduction et de créer par la suite, l'inversion de la population des électrons de la bande de conduction vers la bande de valence, ce qui augmente le phénomène de l'émission stimulée et formant ainsi de la lumière cohérente plus puissante et moins divergente.

En conséquence, ce type de diodes est bien adapté dans les télécommunications à fibre optique [12].

Ces lasers font partis aussi de notre vie, ils sont souvent utilisés pour:

- ✓ Soudure,
- ✓ Imprimante,
- ✓ Découpe,
- ✓ Chirurgie cardiaque,
- ✓ Chirurgie de l'œil,
- ✓ Diagnostique.

La structuration de la matière dans le but de modifier ses propriétés physiques est ancienne mais les nanotechnologies permettent l'ouverture d'un champ de recherche immense avec les possibilités de structurations en une, deux et même trois dimensions afin de créer des assemblages de plans, de fils ou de boîtes nanométriques. Cette nanostructuration multidimensionnelle permet d'envisager de très nombreuses applications en électronique (puits, fils et boîtes quantiques), en optique (modification des indices de réfraction, des couleurs, etc.), dans le photovoltaïque (cellules de 3ème génération) et dans bien d'autres domaines. Il faut donc favoriser les recherches sur les nouveaux matériaux à l'échelle nanométrique, sur le contrôle et la maîtrise de leurs propriétés, en tenant compte non seulement des effets de dimension mais aussi des interfaces. Ces nouveaux matériaux sont appelés les nanomatériaux.



Chapitre II :

Nanomatériaux

Introduction :

Durant les deux dernières décennies les nanotechnologies et les nanosciences se sont imposées comme deux secteurs majeurs de la recherche, tant pour les sciences que pour les applications. La nanotechnologie recouvre toutes les techniques de miniaturisation qui permettent de fabriquer et d'exploiter les matériaux de taille nanométrique. Les nanosciences regroupent les disciplines scientifiques qui permettent de comprendre et de prévoir les nouvelles propriétés de ces matériaux. Les nanomatériaux constituent les briques élémentaires des matériaux de future [34].

II-1) DEFINITIONS***II-1-1) NANOTECHNOLOGIES***

Les nanotechnologies reposent sur la connaissance et la maîtrise de l'infiniment petit. Elles constituent un champ de recherche et de développement multidisciplinaire impliquant la fabrication de nouveaux matériaux et de nouveaux dispositifs à partir d'outils ou de techniques permettant de structurer la matière au niveau atomique, moléculaire ou supramoléculaire. Les échelles caractéristiques des nanotechnologies vont de 1 à 100 nanomètres [35].

Les nanotechnologies sont la formalisation des concepts et des procédés issus des nanosciences (sciences qui visent à comprendre les propriétés de la matière à l'échelle nanométrique) en vue de multiples applications.

L'unité de référence du monde des nanotechnologies est donc le nanomètre (nm). Le préfixe nano vient du grec *nanos* qui signifie nain. Un nanomètre est une unité de mesure qui équivaut à un milliardième de mètre ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m} = 0,000\ 000\ 001 \text{ m}$). Un nanomètre correspond environ à la taille de 4 atomes de silicium mis côte à côte, à 1/100 de la largeur d'une molécule d'ADN, à 1/50 000 de l'épaisseur d'un cheveu humain.

La figure (II-1) ci-dessous permet d'illustrer la taille extrêmement fine d'un nanomatériau.

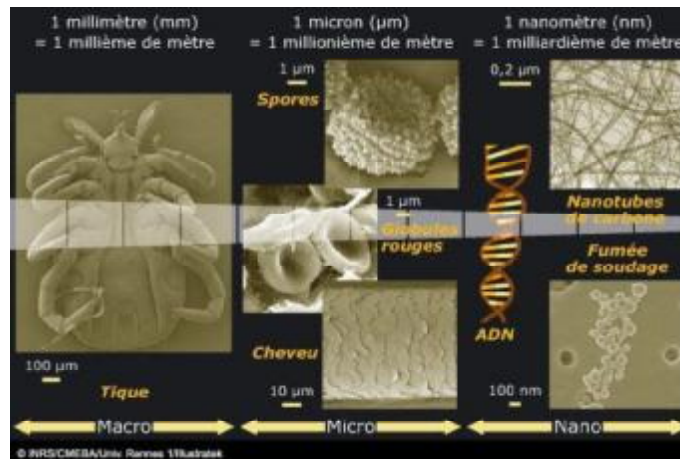


Figure II-1) domaine Du visible à l'invisible.

À de telles dimensions, la matière acquiert des propriétés inattendues et souvent totalement différentes de celles des mêmes matériaux à l'échelle micro ou macroscopique, notamment en terme de résistance mécanique, de réactivité chimique, de conductivité électrique ou de fluorescence. Les nanotechnologies conduisent donc à l'élaboration de matériaux dont les propriétés fondamentales (chimiques, physiques, thermiques, optiques, biologiques, mécaniques, magnétiques, etc.) peuvent être modifiées : il convient de les considérer comme de nouvelles substances chimiques. Par exemple, l'or est totalement inactif à l'échelle micrométrique alors qu'il devient un excellent catalyseur lorsqu'il prend des dimensions nanométriques. Toutes les grandes familles de matériaux sont concernées : les métaux, les céramiques, les diélectriques, les semiconducteurs, etc. [35].

II-1-2) Nanomatériaux

Un nanomatériau est un matériau possédant des propriétés particulières à cause de sa structure nanométrique. Les nanomatériaux sont des matériaux composés ou constitués pour tout ou partie de nano-objets qui leur confèrent des propriétés améliorées ou spécifiques de la dimension nanométrique. Cette structure est habituellement issue de la nanotechnologie.

II-1-3) Nano-objets

Le terme ne possède pas une définition unique. Pour certains, un nano-objet est un objet dont toutes les dimensions dans l'espace sont de l'ordre du nanomètre (on entend par là comprises entre 1 et 100 nanomètres). Pour d'autres, il s'agit d'un corps dont au moins une des dimensions (longueur, diamètre, épaisseur) est de cet ordre. Nous adopterons ici l'acception

large, à cause des nanotubes de carbone qui, bien qu'ayant un diamètre de quelques nanomètres, peuvent désormais atteindre une longueur de l'ordre du centimètre.

II-1-4) Nanoparticule

Une nanoparticule est un assemblage de quelques centaines à quelques milliers d'atomes, formant un objet de taille nanométrique (1 à 100 nm). Là encore, la définition n'est pas arrêtée. La plupart des nanoparticules sont des agrégats de petites molécules ou d'atomes.

II-2) DIFFERENTS TYPES DES NANOMATERIAUX

Les nano-objets peuvent être utilisés soit en tant que tels, soit en vue d'élaborer de nouveaux matériaux nommés nanomatériaux et habituellement regroupés en trois catégories :

Les matériaux nano-chargés ou nano-renforcés. Ces matériaux sont élaborés par incorporation de nano-objets dans une matrice organique ou minérale afin d'apporter une nouvelle fonctionnalité ou de modifier des propriétés mécaniques, optiques, magnétiques ou thermiques. Les nano-composites en sont un exemple. Divers nano-objets sont déjà utilisés dans de nombreuses applications industrielles [36-37].

Les matériaux nanostructures en surface. Ces matériaux sont recouverts soit d'une ou plusieurs nano-couches, soit de nanoparticules qui forment un revêtement bien défini, permettant de doter la surface de propriétés (résistance à l'érosion, résistance à l'abrasion, hydrophile, etc.) ou de fonctionnalités nouvelles (adhérence, dureté, aspect, etc.). De tels revêtements existent déjà, par exemple pour colorer des emballages en verre, apporter une fonction autonettoyante ou renforcer la surface de polymères.

Les matériaux nanostructures en volume. Ces matériaux possèdent une structure intrinsèque nanométrique (microstructure, porosité, réseau nanocristallin, etc.) qui leur confère des propriétés physiques particulières. Les nano-objets sont, dans ce cas, les éléments constitutifs du matériau massif [38].

II-3) NANOAGREGATS SEMI CONDUCTEURS

II-3-1) Définitions

Les nano particules semi conductrices représentent une nouvelle classe de matériaux de taille variant de 1 à 100 nm [39, 40,41]. Ils occupent l'interface entre les molécules et les solides massifs, et exhibent des propriétés physiques et chimiques différentes de celles des molécules et des solides.

Les nano semiconducteurs (NSC) occupent une place de choix parmi les nano particules (NPs) en raison de leur importance technologique. Selon leur taille, ils sont classés en trois types:

- Les nano fils sont des SC cylindriques de diamètre variant de 10 à 100 nm et de longueur de quelques microns.
- Les boîtes quantiques ont une base de $100 \times 100 \text{ nm}^2$ et une épaisseur de 10 nm.
- Les points quantiques se trouvent dans l'intervalle de taille de 1-10 nm.

Dans la dernière gamme de taille les propriétés optiques et électroniques sont considérablement modifiées par rapport aux semiconducteurs massifs.

Lorsque les dimensions du cristal, selon une ou plusieurs directions de l'espace, sont restreintes à des valeurs de l'ordre de la longueur d'onde de la fonction décrivant l'état d'un porteur (longueur d'onde de De Broglie λ_B), le mouvement de ce porteur est quantifié selon cette (ces) direction(s) : c'est le confinement quantique.

II-3-2) Effet quantique de taille

La diminution du nombre d'atomes dans un semiconducteur nanométrique induit une discrétisation de leurs niveaux d'énergie et une augmentation de la bande interdite. Cet effet se traduit par un effet quantique de taille. Lorsque la taille du semiconducteur est comparable à celle de rayon Bohr de l'exciton [42-43], il y a un effet de confinement appelé confinement quantique.

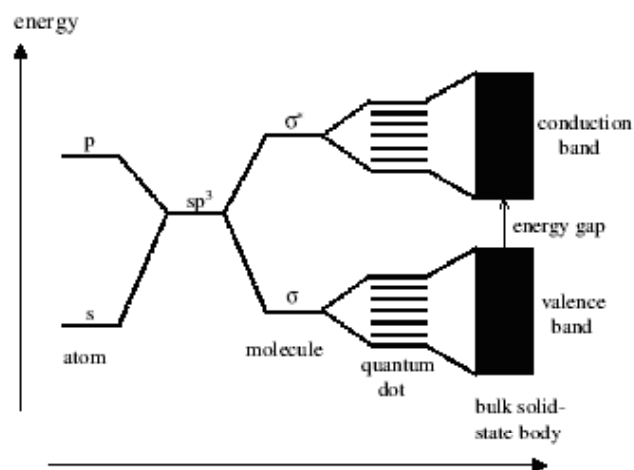


Figure II-2) Densification des niveaux d'énergie en fonction de la taille.

II-4) Effet du confinement quantique

Dans le volume d'un semiconducteur massif les porteurs de charge sont, d'après Félix Bloch, décrits par une onde de "Bloch" qui se propage librement dans un potentiel périodique ayant la symétrie de translation des atomes constituant le cristal infini. Lorsqu'une dimension (ou plus) du cristal est réduite à une échelle s'approchant du rayon de Bohr d'un exciton, les propriétés électroniques du semiconducteur sont changées. Le confinement quantique décrit l'effet de la réduction de la taille sur les propriétés électroniques des nanostructures. On parle ainsi de confinement 1D pour un puits quantique (matériau 2D), de confinement 2D pour un nanofil et de confinement 3D pour une boîte quantique.

II-4-1) Le concept des puits, fils et boîtes quantiques

Les méthodes de croissance de cristaux semiconducteurs par épitaxie, comme l'épitaxie par jet moléculaire (MBE, molecular beam epitaxy) ou le dépôt en phase vapeur à partir d'organométalliques (MOCVD, metal-organic chemical vapor deposition) permettent des dispositifs sur mesure dans lesquels les électrons sont confinés, dans une direction particulière, sur une très faible longueur. Pour cette direction particulière, les niveaux d'énergie sont discrets et bien séparés comme c'est le cas pour une particule confinée entre deux murs proches l'un de l'autre. Lorsque le confinement ne se fait que dans une dimension, alors que les deux autres dimensions ne sont pas contraintes sur de ces courtes longueurs, on a pratiquement un gaz bidimensionnel d'électrons ; on dit que l'on a un *puits quantique*. Si le confinement sur de très faibles longueurs se fait sur deux directions perpendiculaires, alors que la troisième direction n'a pas cette contrainte, on réalise *un fil quantique*. Enfin, une minuscule boîte à 3 dimension permet de créer une *boîte* ou *point quantique* [44].

Il a pour effet la discrétisation des niveaux d'énergie permis dans la direction de confinement, ainsi qu'un changement radical du profil de densité d'états en fonction de l'énergie. Les différents degrés de confinement sont illustrés sur la Figure (II-3).

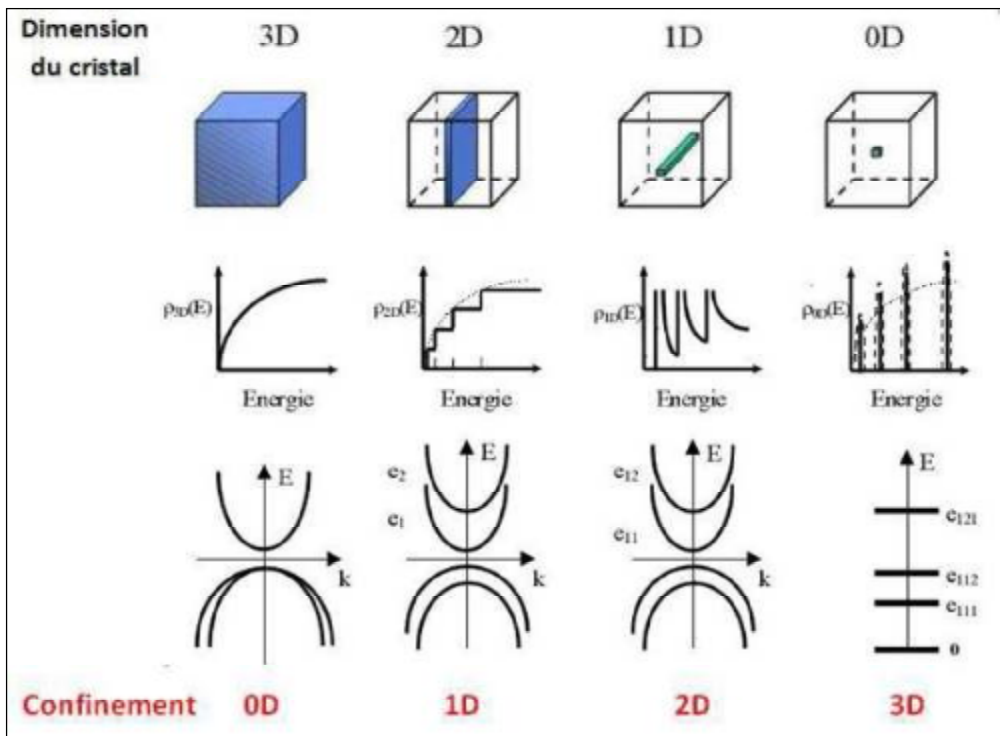


Figure II-3) Variation de l'énergie et de la densité d'états en fonction du degré de confinement.

II-5) Propriétés physiques des nanocristaux semiconducteurs

Les dispositifs semiconducteurs de basses dimensions permettent l'étude des propriétés électroniques dans des milieux confinés. Ils sont généralement regroupés, en trois classes, en fonction de la dimensionnalité du confinement spatial des électrons dans la structure:

- Le nom de puits quantique est associé au système dont le confinement est unidimensionnel.
- Les structures dont le confinement spatial est réalisé sur deux dimensions sont appelées des fils quantiques.
- Deux types de structures permettent un confinement spatial suivant les trois directions de l'espace.

II-6) MODELISATION DE L'EFFET QUANTIQUE DE TAILLE

II-6-1) Modélisation

Plusieurs études ont été faites pour comprendre le changement des propriétés électroniques et optiques des nanoparticules semi-conductrices aux faibles dimensions. Qualitativement on peut modéliser la variation de ces propriétés par le problème d'une

particule dans une boîte orthorhombique de dimensions L_X , L_Y et L_Z dans les trois dimensions de l'espace. L'énergie cinétique de particule est donnée par l'équation:

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2m} (K_X^2 + K_Y^2 + K_Z^2) \quad (\text{II-1})$$

Les projections du vecteur d'onde K sur les trois directions, K_X , K_Y et K_Z , ne peuvent prendre que certaines valeurs :

$$K_X = \frac{\pi n_X}{l_X} \quad (\text{II-2})$$

$$K_Y = \frac{\pi n_Y}{l_Y} \quad (\text{II-3})$$

$$K_Z = \frac{\pi n_Z}{l_Z} \quad (\text{II-4})$$

La différence entre deux valeurs permises de l'énergie est donnée par l'expression:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{1}{l_X^2 + l_Y^2 + l_Z^2} \right) \quad (\text{II-5})$$

L'énergie cinétique d'une particule de masse m dans une boîte de dimension d est:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m} \left(\frac{1}{d^2} \right) \quad (\text{II-6})$$

L'énergie minimum de la particule dans boîte quantique est donnée par :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \quad (\text{II-7})$$

Cette modélisation du confinement nous offre la possibilité de comprendre qualitativement les phénomènes suivants :

- L'augmentation du gap d'un semiconducteur avec la diminution de la taille.
- Le déplacement de l'énergie de particule vers les hautes énergies.
- La discrétisation des niveaux énergétiques autorisés.
- Le changement de la densité d'état en fonction de l'énergie.

II-6-2) propriétés électroniques

Les propriétés électroniques particulières des nano cristaux semiconducteurs sont dues à leur taille qui induit un effet de confinement des excitations. Un nanocristal se présente donc comme un état intermédiaire entre le cristal massif et la molécule. Il va ainsi hériter de propriétés originales.

Un cristal semiconducteur est défini par une discontinuité énergétique entre la bande de valence des électrons et leur bande de conduction. Cette discontinuité, appelée gap, est de l'ordre de l'électronvolt. Lors d'une excitation d'énergie supérieure au gap, comme une absorption de photon, un électron peut passer de la bande de valence à la bande de conduction. Il laisse alors place à un « trou » dans la bande de valence. La conservation de la charge électronique impose d'associer au trou la charge opposée de l'électron. Ces deux particules de charges opposées sont alors liées par l'interaction coulombienne pour former un exciton. Les porteurs de charge générés lors de l'excitation du système, sont libres de se déplacer dans tout le volume d'un cristal semiconducteur massif ; par contre dans un nano cristal, ils se trouvent limités par le confinement spatial. Comme dans un matériau massif, l'absorption d'un photon par un nano cristal peut conduire à la création d'un exciton ; cependant le confinement de ce quasi particule induit un décalage vers les hautes énergies du seuil d'absorption, se traduisant par un élargissement du gap. La figure (II-4) met en évidence les états énergétiques d'un électron et d'un trou dans les deux configurations ci-dessus considérées : à droite le cas d'un cristal massif et à gauche le cas d'un nanocristal ou d'une boîte quantique. Si dans un cristal massif, les énergies des deux particules, séparées par la discontinuité énergétique du gap (noté E_g), sont décrites par des fonctions continues, elles prennent des valeurs discrètes dans un milieu confiné sur les trois dimensions de l'espace. Les niveaux du trou (h) et de l'électron (e) sont alors caractérisés par des énergies discrètes. Le trou et l'électron sont en interaction coulombienne et forment un système hydrogénoïde.

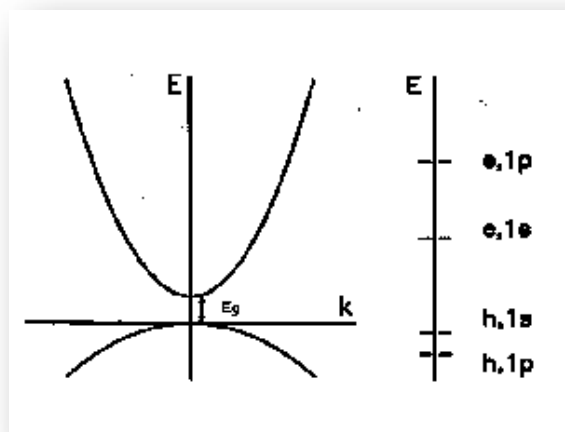


Figure II-4) énergies de l'électron (e) et du trou (h) dans un cristal massif (à gauche) et dans une boîte quantique ou un nanocristal (à droite).

Comme tout système hydrogénoïde, l'exciton est caractérisé par un rayon d'équilibre, le rayon de Bohr a_B . Lorsque ce dernier est plus grand que le rayon du nanocristal semiconducteur, on dira que l'excitation est fortement confinée. Dans cette hypothèse, l'énergie de la première bande d'absorption, associée à la formation d'un exciton, est donnée par la relation suivante [42] :

$$E_{1abs} = E_g + \pi \left(\frac{a_B}{a} \right)^2 R_y^* - 1,786 \frac{a_B}{a} R_y^* - 0,248 R_y^* \quad (\text{II-8})$$

où a est le rayon du nanocristal et R_y^* l'énergie de Rydberg, correspondant à l'énergie d'ionisation de l'exciton. de cette équation, il ressort que la position spectrale de la première bande d'absorption dépend de la taille du nanocristal ; la position sera d'autant décalée vers les hautes énergies que le rayon du nanocristal sera petit. Si l'on se place toujours dans le régime de fort confinement, il a été montré que la force d'oscillateur par unité de volume f de la première transition, augmente lorsque le volume du nanocristal diminue. La force d'oscillateur d'une transition donnée dans un nano cristal est alors exprimée par [43,45] :

$$f = \frac{3}{4} \left(\frac{a_B}{a} \right) f_{exm} \quad (\text{II-9})$$

où f_{exm} est la force d'oscillateur de l'exciton par unité de volume dans le cristal massif. Pour des confinements forts, la première bande d'absorption devient alors plus intense lorsque le rayon décroît. Les bandes d'absorption et d'émission d'une collection de nanocristaux sont caractérisées par un élargissement qui trouve son origine dans deux processus distincts :

- L'interaction d'un exciton avec le réseau ou les défauts présents dans le nano cristal conduit à un élargissement homogène.
- Le fait que les nanocristaux ne sont pas tous de la même taille génère un élargissement qui est inhomogène.

En effet, tout procédé d'élaboration génère une distribution de taille. Pour la plupart des nanocristaux, l'élargissement homogène est très inférieur à l'élargissement inhomogène, cette configuration est schématisée sur le graphique de la figure (II-5).

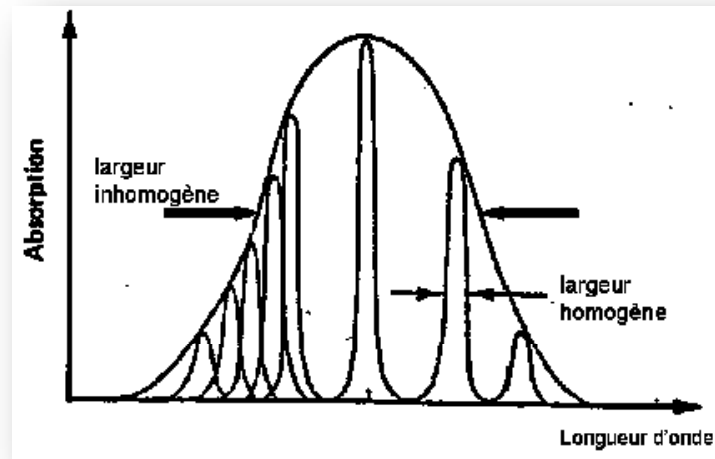


Figure II-5) largeurs homogènes et inhomogènes constituant une bande d'absorption en fonction de la longueur d'onde.

Dans de nombreuses études portant sur les nanocristaux, on voit que ces derniers sont insérés dans des matrices vitreuses, diélectriques ou semi-conductrices à large gap qui leur sert de support. Pour observer une désexcitation radiative, la bande interdite de la matrice hôte doit être énergétiquement plus large que celle du nanocristal et le gap de la matrice supérieur à celui du nanocristal [45-46]. Cette condition est schématisée sur la figure (II-6).

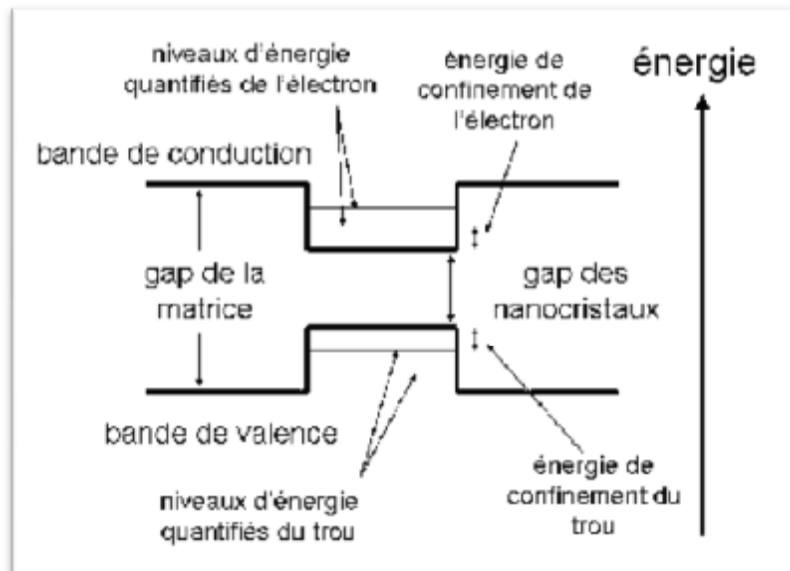


Figure II-6) diagramme énergétique de la conservation des propriétés de confinement quantique d'un nano cristal dans une matrice.

On change fortement les propriétés électroniques d'un matériau en «comprimant» le nuage des électrons et des trous par la réduction d'une ou de plusieurs de ses dimensions à l'échelle nanométrique. En renforçant par confinement l'énergie de liaison et la force d'oscillateur de résonance de type exciton, on renforce les propriétés optiques non linéaires d'un matériau [47-48].

II-6-3) Le confinement quantique

Les propriétés électroniques que possèdent les nanocristaux des semiconducteurs sont dues à leur très faible taille qui induit un effet de confinement des excitations optiques.

Les porteurs de charges générés lors de l'absorption d'un faisceau lumineux excitateur sont libres de se déplacer dans tout le cristal semiconducteur massif, par contre dans un nanocristal, ils se trouvent limités par les parois de la particule. Le confinement des excitations, en particulier de l'exciton, se traduit par deux effets [49] :

- L'apparition de transitions électroniques d'énergies discrètes au lieu de la structure de bande habituelle.
- Un déplacement du seuil d'absorption vers les hautes énergies, traduisant ainsi un élargissement du gap, de plus en plus important au fur et à mesure que la taille des cristallites diminue [49-50].

II-6-4) L'exciton dans le semiconducteur massif

Le gap dans un semiconducteur correspond à l'énergie minimale nécessaire à la création d'une paire électron-trou. Ces deux porteurs peuvent se déplacer indépendamment dans le cristal et contribuent ainsi à la conductivité électrique. Aussi ces deux porteurs peuvent être liés par l'interaction coulombienne et dans ce cas la paire électron-trou ainsi formée est appelée exciton. Elle représente une excitation élémentaire du cristal. L'état lié se forme par l'attraction électrostatique d'un électron et d'un trou, la force de cette attraction dépend essentiellement de deux paramètres :

- La constante diélectrique du milieu (plus elle est élevée plus l'attraction est faible).
- Les masses effectives de l'électron et le trou (plus elles sont faibles moins l'exciton est stable).

Pour les semiconducteurs à larges bandes et petits gaps, la constante diélectrique est élevée et les masses effectives sont faibles, nous avons donc des excitons faiblement liés avec une distance moyenne électron- trou grande devant le pas du réseau, ils sont dits excitons de Wannier (figure II-7).

Dans le cas d'un exciton fortement lié, l'excitation est localisée sur un seul atome ou dans un voisinage, on parle alors d'un exciton de Frenkel (figure II-8), il s'agit essentiellement d'un état excité d'un atome mais l'excitation peut sauter d'un atome à l'autre suivant la force de la liaison entre voisins [51].

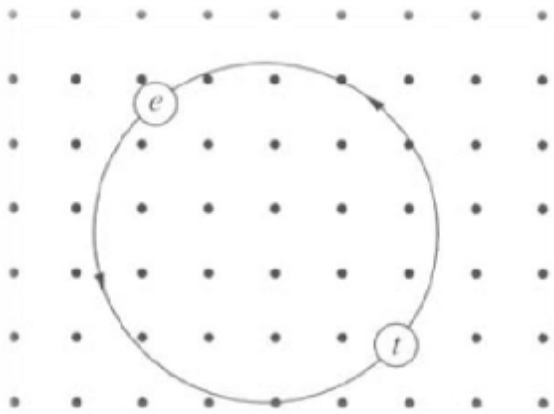


Figure II-7) Excitons de Wannier.

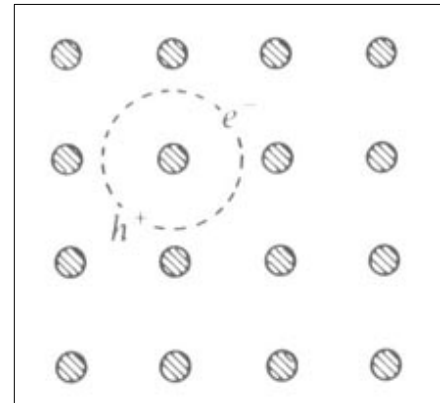


Figure II-8) Exciton de Frenkel.

L'exciton (dit de Wannier) est considéré comme un système hydrogénoïde décrit par le modèle de Bohr et possède donc des niveaux d'énergie quantifiés [52].

L'énergie de liaison du niveau $n=1$ (n est le nombre quantique principale) permet de définir le rayon de Bohr, le rayon de Bohr de l'exciton a_B (elle est donnée dans le modèle de Bohr par $(e^2/2r\epsilon)$, il vaut donc:

$$a_B = \frac{(h/2\pi)^2 \epsilon^2}{\mu e^2}$$

et correspond à l'extension spatiale de l'exciton. Il est d'autant plus petit que l'interaction coulombienne est plus grande.

Où :

μ : La masse réduite de l'exciton

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$$

m_e^* et m_h^* sont respectivement les masses effectives de l'électron et du trou.

ϵ : Est la constante diélectrique du semiconducteur aux fréquences optique.

h : la constante de Planck.

II-6-5) L'exciton dans le semiconducteur nanocristallin

La réduction de la taille du semiconducteur conduit l'exciton à un état de confinement. Les effets seront plus ou moins importants suivant la taille du nanocristal considéré, le rayon de Bohr étant «la longueur » de référence.

L'exciton confiné subit deux potentiels [52] :

- l'interaction coulombienne, qui lie les deux particules qui le forment, elle est caractérisée par l'énergie de liaison.
- le puits de potentiel qui quantifie son énergie critique $\propto \frac{1}{R^2}$.

Où R est le rayon de la particule.

Différents régimes de confinement existent alors selon l'importance de ces potentiels qui dépendent de la taille du nanocristal, de la constante diélectrique et des masses effectives que l'on trouve dans l'expression du rayon de Bohr de l'exciton.

✓ Le confinement fort ($R < a_B$)

C'est le cas où le confinement du puits est prépondérant ; le puits dissocie la paire électron trou et quantifie les mouvements des deux particules séparément. Les énergies des premières transitions sont données par la relation [53] :

$$E_n = E_g + \frac{(h/2\pi)^2}{2R^2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right)$$

✓ Le confinement faible ($R > a_B$)

C'est un cas proche de celui du cristal massif, les effets dus au puits sont faibles. L'énergie de L'exciton s'écrit :

$$E = E_g - E_x \left(\frac{(h/2\pi)^2}{2\mu R^2} \right)$$

E_x : l'énergie de liaison de l'exciton.

✓ Le confinement intermédiaire ($a_{Be} > R > a_{Bh}$)

a_{Be}, a_{Bh} sont les rayons de Bohr de l'électron et du trou et représentent leur extension spatiale. Les deux porteurs ne sont pas confinés de la même façon. L'énergie cinétique de

l'électron est plus grande que celle du trou, il se déplace donc plus rapidement. Le trou se localise plutôt au centre du nanocristal [52,53].

L'énergie de la première transition s'écrit :

$$E = E_g + \frac{(\hbar/2\pi)^2}{2R^2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) - \left(\frac{1,8e^2}{\epsilon R} \right)$$

II-6-6) Spectre d'énergie et densité d'état d'un électron

La très grande majorité des propriétés électronique et optique d'un matériau sont déterminées par l'énergie qui est associée aux différents états accessibles pour les porteurs de charge à l'intérieur d'un matériau. Il est donc impératif de pouvoir déterminer la distribution des états accessibles dans l'espace de vecteur d'onde (l'espace-k), ou en d'autres mots déterminer la densité d'état, et aussi de pouvoir calculer l'énergie de ces états.

Ces paramètres importants sont fortement dépendants du nombre de degrés de liberté des porteurs comme nous allons le montrer. Autrement dit, ils seront très différents pour un électron libre (trois degrés de liberté 3D) par rapport à un électron forcé de se déplacer seulement dans un plan (deux degrés de liberté-2D), ou seulement selon une droite (un degré de liberté-1D) ou encore par rapport à un électron complètement localisé (aucun degré de liberté-0D).

C'est le profil du potentiel vu par l'électron qui dicte à ce dernier les directions dans lesquelles son mouvement est permis et celles où il ne l'est pas. Pour confiner l'électron dans une direction donnée, et ainsi lui supprimer son degré de liberté selon z par exemple, il faut lui présenter un puits de potentiel d'une largeur L_z comparable à sa longueur d'onde de De Broglie (qui est généralement de l'ordre de nanomètre dans la direction z).

Dans les nanostructures, le cristal ayant une taille finie, est décrit en première approximation par un puits de potentiel infini. Les ondes des porteurs spatialement confinés sont réfléchies par les barrières de potentiel. Dans ce cas, les vecteurs d'onde d'une particule libre de masse effective m^* se trouvant dans ce puits de potentiel de largeur L , s'écrivent :

$$K_n = \frac{n\pi}{L} \quad \text{ou} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Son niveau d'énergie fondamental augmente d'une valeur ΔE appelée « énergie de confinement » et dont l'expression est :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 K_n^2}{2m^*} = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \text{ ou } n = 1, 2, 3, \dots$$

La réduction de la taille du cristal entraîne aussi un changement de la densité d'états en fonction du degré de confinement, tel que :

- ✓ Pour un semiconducteur massif (3D): $\rho(E) \propto \sqrt{E}$.
- ✓ Pour un puits quantique (2D) : $\rho(E) \propto cte$.
- ✓ Pour un fil quantique (1D) : $\rho(E) \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$.
- ✓ Pour une boîte quantique (0D): $\rho(E) \propto \delta E$.

II-7) Effet sur les propriétés structurales

La majorité des nanocristaux possèdent une forme sphérique néanmoins ils peuvent présenter des faces marquées ou posséder une forme elliptique. Dans d'autres cas, les nanocristallites peuvent développer des faces extérieures en leur donnant une forme prismatique ou octaédrique [54-51].

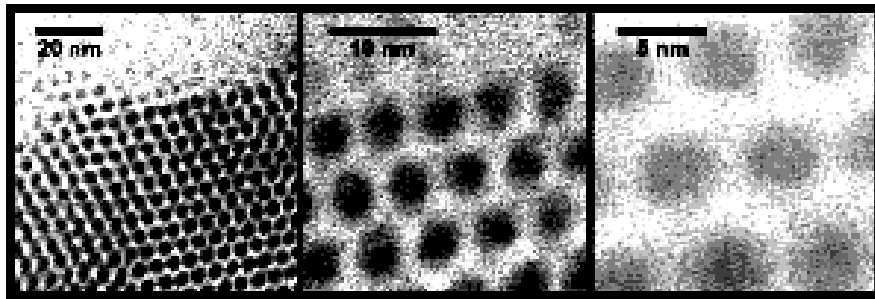


Figure II-9) Images par MET des nanocristaux de CdSe (diamètre 3.6 nm), préparés par évaporation du solvant d'une solution colloïdale dans du toluène.

II-8) Effet sur les propriétés optiques

II-8-1) L'absorption optique

Dans certains semiconducteurs, l'absorption optique est due à l'exciton (paire électron-trou liée). Mais, si le rayon de Bohr effectif de l'exciton est plus grand que la taille de la particule, l'exciton est confiné (confinement quantique) dans la particule, et son énergie se trouve augmentée.

D'un point de vue pratique ceci se traduit par un décalage aussi bien de l'absorption que de l'émission vers les hautes énergies lorsque la taille des particules diminue.

Les figures (II-10) montre, par exemple, la variation du gap d'absorption pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des nano cristaux. La modification des propriétés optiques avec la réduction de la dimension des particules a été également observée dans les nanométaux pour les quels, le phénomène le plus marquant est la modification des bandes d'absorption en fonction de la taille [55].

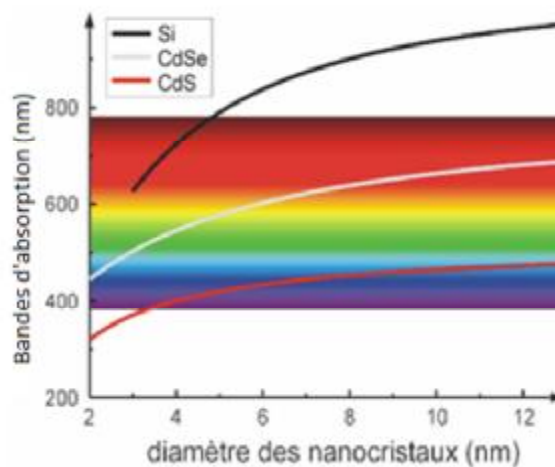


Figure II-10) Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des Nanocristaux.

II-9) Propriétés spécifiques des nanomatériaux

Les nanomatériaux ont des propriétés physiques différentes de celles que l'on peut trouver pour des matériaux à l'état massif. Ils ont un rapport surface-volume important par rapport à leurs homologues en massif. Par conséquent, une fraction importante des atomes est présentée sur la surface, ce qui les rend posséder différentes propriétés thermodynamiques, cette propriété implique que l'énergie de surface va augmenter lorsque la taille des particules diminue. L'augmentation d'énergie mène à une relaxation de surface (les atomes en surface se replacent afin de réduire l'énergie globale du système), cette dernière conduit à une modification des paramètres cristallins. Il est même possible que la structure cristalline change par exemple le titanate de baryum (BaTiO_3) passe d'une maille tétragonale à une maille orthodromique lorsque la taille des particules devient inférieure à 5nm [56].

A cet effet vient ajouter un effet de confinement dû à la réduction de taille. Ceci a comme conséquence le déplacement vers le bleu (longueurs d'onde plus faibles, ondes plus énergétiques) des spectres d'absorption et de photoluminescence de la particule. Ce déplacement est observable pour les isolants et pour les semiconducteurs.

Ce comportement quantique permet aussi le transfert d'électrons entre deux nanoparticules séparées par un isolant grâce à l'effet tunnel. C'est la raison de la grande conductivité des matériaux isolants lorsqu'ils sont renforcés avec des nanoparticules métalliques ou des nanotubes de carbone [57-58].

II-10) Différentes méthodes d'élaboration

La base de fabrication des nanomatériaux sont les « nano-objets » dont on peut distinguer trois grandes familles :

- Les nanoparticules ou particules ultrafines (PUF) dont aucune dimension n'est supérieure à 100 nanomètres.
- Les nanofibres, nanotubes, nano-filaments, et les nano-bâtonnets qui présentent une section de quelques dizaines de nanomètres et une longueur qui varie de 500 à 10 000 nanomètres.
- Les nanofilms, les nano-couches et les nano-revêtements, dont au moins deux de leurs dimensions sont supérieures à 100 nanomètres.

Il existe deux approches complémentaires pour fabriquer des nanomatériaux.

II-10-1) méthode « descendante » (ou top down)

Une voie descendante appelé "top down" (du haut vers le bas) où on part du massif pour arriver à la taille nanométrique. C'est une technique basée sur la division de la matière de plus en plus petite (encore et toujours plus petite). C'est la miniaturisation de la matière pour atteindre la taille d'une centaine de nanomètre et même moins jusqu'à quelques atomes. Donc cette méthode consiste à miniaturiser les systèmes actuels. Les structures sont ainsi graduellement sous dimensionnées jusqu'à atteindre des proportions nanométriques. Cette méthode fait appel à des procédés principalement mécaniques. (Figure II-11).

II-10-2) méthode « ascendante » (ou bottom up)

-La deuxième approche est une technique qui provient des laboratoires de recherche et des nanosciences. Elle va dans le sens inverse ascendant; elle est appelée "bottom-up" (du bas vers le haut). C'est une technique d'assemblage et de construction à partir de briques élémentaires de la matière (les atomes et les molécules) pour fabriquer des nanostructures de

quelques molécules aux démentions nanométriques allant jusqu'à la centaine de nanomètres (Figure II-11). L'assemblage des atomes, des molécules ou des agrégats s'effectue de façon précise et contrôlée permettant ainsi l'élaboration de matériaux fonctionnels dont la structure est complètement maîtrisée. L'intérêt grandissant accordé aux nanomatériaux pour leurs propriétés spécifiques a stimulé les chercheurs à développer divers procédés et techniques pour leur fabrication et pour procéder à leur caractérisation quelle que soit leur forme (couches minces; agrégats nanométriques, matrices dopées, solutions dopées....). Cet engouement a permis l'apparition d'un nombre assez impressionnant de techniques d'élaboration. Cette méthode permet l'assemblage ou le positionnement d'atome ou de molécules de façon précise permettant ainsi la fabrication de matériaux dont la structure est parfaitement maîtrisée. Cette méthode fait appel à des procédés d'élaboration principalement physiques et chimiques.

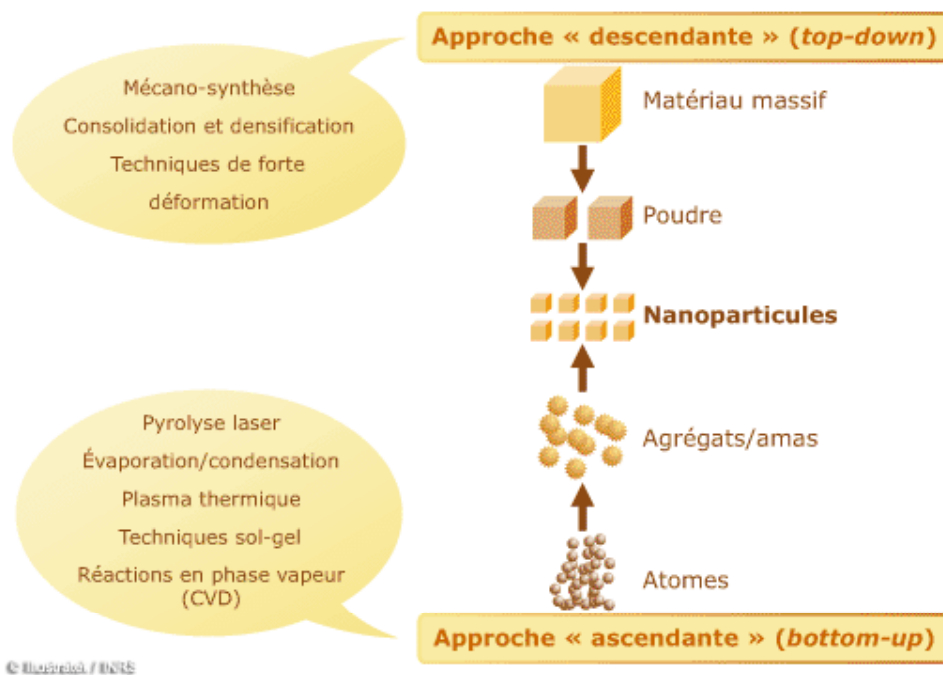


Figure II-11) Illustration représentant les approches pour atteindre des nanostructures.

II-10-3) Procédés par voie physique

L'élaboration des nanoparticules peut être réalisée à partir d'une phase vapeur obtenue à partir d'un matériau source par chauffage (fusion en creuset ou sans creuset) ou par bombardement (faisceau d'électrons, pyrolyse, laser). Dans la plupart des cas, la vapeur du

solide que l'on souhaite former est refroidie par collisions avec un gaz neutre et le matériau est collecté sur une paroi froide. Une autre voie d'obtention de nano poudres consiste à utiliser l'action de micro-ondes sur des poudres de taille millimétrique. Des couches minces d'épaisseur nanométrique peuvent également être réalisées par la voie PVD (Physical Vapor Deposition) ou par croissance épitaxiale.

II-10-4) Procédés par voie chimique

Par voie chimique, plusieurs techniques de fabrication sont couramment utilisées dans l'industrie. Dans les réactions en phase vapeur, les matériaux précurseurs vaporisés sont introduits dans un réacteur CVD (Chemical Vapor Deposition) dans lequel les molécules des précurseurs sont adsorbées à la surface d'un substrat maintenu à une température adaptée. Les réactions en milieu liquide donnent lieu à des synthèses et sont le plus souvent effectuées à partir d'une solution aqueuse ou organique contenant les réactants. La précipitation des nanoparticules est obtenue par une modification des conditions de l'équilibre physico-chimique, soit par Co-précipitation chimique, soit par hydrolyse. Enfin, les techniques sol-gel permettent de produire des nanomatériaux à base de précurseurs d'alkoxydes par le biais de réactions de polymérisation.

II-10-5) Les dépôts par voie sol-gel

Le procédé sol-gel est l'une des voies chimiques de préparation des matériaux de type oxyde métallique tels que les céramiques et les verres. [59] Il consiste tout d'abord en la mise au point d'une suspension stable (SOL) à partir de précurseurs chimiques en solution. Ces "sols" vont évoluer au cours de l'étape de gélification par suite d'interactions entre les espèces en suspension et le solvant pour donner naissance à un réseau solide tridimensionnel expansé au travers du milieu liquide. Le système est alors dans l'état GEL. Ces "gels" dits humides sont ensuite transformés en matière sèche amorphe par évacuation des solvants pour donner un aérogel ou par simple évaporation sous pression atmosphérique pour donner un xérogel. Le dépôt proprement dit peut être réalisé de deux manières différentes :

Le dépôt est ensuite séché puis recuit pour obtenir une cristallisation. L'épaisseur des dépôts obtenus peut être très variable et va de quelques nanomètres à plusieurs micromètres. Pour augmenter l'épaisseur, il suffit de répéter plusieurs fois l'opération. Par rapport aux techniques conventionnelles la technique sol-gel est une alternative basse température de préparation d'une grande variété d'oxydes sous différentes configurations (monolithes, films minces, fibres, poudres). Elle présente aussi l'avantage de produire des matériaux très purs et

stœchiométriques [60] qui lui confère une grande attractivité dans les domaines technologiques comme l'optique [61-62] l'électronique [63] et les biomatériaux [64].

Toutefois, cette méthode comporte quelques inconvénients, notamment.

✓ la difficulté de contrôler la réactivité des espèces en solution qui peut donner lieu à des problèmes d'évolution des caractéristiques physico-chimiques de la solution.

✓ les dépôts obtenus sont souvent poreux [65].

II-10-6) Procédés par voie mécanique

La technique dite « mécano synthèse » consiste généralement à broyer des poudres micrométriques (1à 30 μm). Elle permet l'obtention de nano-précipités ou nano-objets dispersés de façon homogène. Les techniques de densification consistent à convertir un matériau pulvérulent en une pièce massive et comporte 2 étapes : une opération de compactage mécanique et une opération de frittage. La compression isostatique à chaud permet de réaliser ainsi ces 2 opérations en une seule étape. Des techniques de forte déformation (torsion, extrusion...) sont également développées pour l'obtention de nanocristaux et de nanostructures.

II-11) Applications des nano semiconducteurs

Les nano semiconducteurs constituent un domaine d'application très important allant des dispositifs optoélectroniques, photovoltaïque, photonique à l'analyse biologique et le diagnostic médical.

II-11-1) Diodes électroluminescentes

Les propriétés de fluorescence des nano semiconducteurs ouvrent des nouvelles voies dans le domaine de l'optoélectronique. Ils sont susceptibles d'être à la base de diodes électroluminescentes. Ils ont la possibilité d'être incorporé dans des structures mixtes pour réaliser des matériaux organique/inorganique.

Bawandi et collaborateurs ont développé une structure hybride constituée par un fil monocouche de nanocristaux entouré par deux couches de composant organiques [58]. Le composant organique, sélectionné pour être excitable par le courant, transfère l'énergie au film monocouche de nanocristaux qui se désexcite radiative ment.

II-11-2) Lasers

Le principe du laser est de convertir l'énergie de pompage en énergie lumineuse par un amplificateur optique intégré dans une cavité résonante.

II-11-3) Photovoltaïque

Les cellules photovoltaïques convertissent la lumière en électricité avec l'exploitation de l'effet photovoltaïque. La découverte de l'effet photovoltaïque remonte à l'année 1839 quand le physicien français Edmond Becquerel [66] observa le changement de la tension d'une électrode de platine sous l'effet de l'illumination par la lumière. L'exploitation de cet effet a commencé à partir de 1950, lorsque les chercheurs de *Bell Laboratoires* aux Etats- Unis fabriquèrent la première cellule photovoltaïque au silicium cristallin. Les cellules solaires restant trop chères pour avoir une exploitation à grande échelle, le défi est aujourd'hui, de concevoir des matériaux moins onéreux. Une équipe de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne a développé un nouveau type de cellules basées sur des films semiconducteurs nanocristallins de dioxyde de titane TiO₂ [67]. L'absorption de la lumière est assurée par un colorant (S) bien choisi adsorbé chimiquement à la surface d'un semiconducteur nanocristallin de TiO₂.

II-11-4) Biologie

Les points quantiques sont utilisés en biologie comme des sondes fluorescences pour sonder les propriétés des molécules biologiques. En 1998 le groupe d'Alivistos effectua la première expérience sur l'emploi en biologie de nanoagrégats semiconducteurs de CdSe/ZnSe de type cœur - coquille. La voie chimique a été utilisée par Chan et al. Pour synthétiser des points quantiques de CdSe [68].

L'intérêt particulier de l'application des points quantiques en biologie vient du fait qu'ils sont préparés dans un milieu aqueux qui leur donne la capacité de s'accrocher sur des molécules biologiques, telles que les protéines et les acides nucléiques (ADN, ARN). Cette aptitude provient des ligands qui servent à faire des ponts entre les points quantiques et le milieu environnant. A cause de la nature cristalline des points quantiques ils présentent un avantage supplémentaire par rapport aux fluorophores organiques. Ces molécules sont capables d'émettre par fluorescence de lumière à des longueurs d'onde plus élevées, cependant ils sont sensibles au phénomène de phot destruction [69].

- ✓ Dans le secteur de l'énergie : électrodes de batteries, stockage de l'hydrogène.
- ✓ En nanoélectronique : équipement à rayons X, éléments d'éclairage, circuits et mémoires intégrés.
- ✓ Dans le secteur biomédical : muscles artificiels, transport de médicaments.

Pour prévoir le comportement de semiconducteur confiné dans un puits quantique en entame à la discussion du résultat.

Chapitre III :

Résultats et discussions

Introduction :

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.

Les porteurs de charges sont responsables des propriétés électriques et de la plupart des propriétés optiques des semiconducteurs, sont situés au voisinage des extrema de bandes. Il s'agit des électrons du bas de la bande de conduction et des trous (états non occupés) du sommet de la bande de valence. Dans ces régions énergétiques, les bandes peuvent, en première approximation, être décrites par une forme parabolique :

$$E_i(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad (\text{III-1})$$

avec $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h étant la constante de Planck, k la valeur du vecteur d'onde, et où la quantité m_i^* possède la dimension d'une masse et porte le nom de masse effective du porteur dans la n 'ième bande. Sa valeur, associée à la courbure parabolique de la bande, contient l'effet global du potentiel cristallin. Tout se passe comme si le porteur de masse m_i^* était plongé dans un potentiel uniforme égal à celui de l'extremum de bande $E_i(0)$. Cette approximation de la masse effective est fréquemment utilisée pour la modélisation des effets de confinement quantique dans les structures nanométriques.

En approximation de la masse effective, le confinement quantique se modélise par le puits de potentiel de largeur nanométrique que constitue le semiconducteur inséré dans un milieu de gap plus grand. Notons que, dans cette approximation, la masse effective contenant l'effet global du potentiel cristallin, les milieux puits et barrière sont implicitement traités comme continus et non plus cristallins. Dans chacun de ces milieux, la partie périodique de la fonction de Bloch n'intervient donc plus et les états des porteurs sont alors uniquement décrits par l'onde plane qui porte le nom de fonction enveloppe. Pour cette raison, le traitement des systèmes semiconducteur à confinement quantique en approximation de la masse effective porte souvent le nom de méthode ou approximation de la fonction enveloppe.

Dans la perspective du traitement des systèmes à confinement quantique en approximation de la masse effective, ils sont décrits par la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [70] qui est une

méthode de perturbation permettant d'exprimer chacun de ces états en $k \neq 0$ en fonction des quatre états en $k=0$.

En approximation de la fonction enveloppe, les états propres des porteurs et leurs niveaux de confinement sont obtenus par application des conditions aux limites assurant la continuité de la densité de probabilité de présence et celle de la densité de courant aux interfaces puits-barrière. La méthode de la fonction enveloppe doit s'appliquer en toute rigueur dans le cadre de la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [70-72]. En fait, de nombreux travaux sur les nanocristaux synthétisés par voie chimique (par exemple réfs [73,74]) ont montré que le traitement des états de conduction et de valence par deux bandes paraboliques indépendantes [75,76] constituait une approche convenable pour l'analyse des spectres optiques. Nous adopterons donc ici cette approximation.

III-1) Modèle de la masse effective (puits infini)

Le modèle du puits infini, proposé par Brus, est aussi appelé l'approximation de masse effective. En supposant que la forme des agrégats est sphérique et que les porteurs de charge sont indépendants, on peut résoudre le problème d'une particule dans un puits de potentiel infini. L'énergie d'excitation est donnée par la formule suivante:

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2} \left[\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] \quad (\text{III-2})$$

E_g^0 : est la largeur de la bande interdite d'un semiconducteur massif. Le deuxième terme présente les énergies cinétiques de l'électron et du trou dans une boîte sphérique de rayon R, constituant un puits de potentiel infini ; m_e^* et m_h^* sont les masses effectives respectives de l'électron et du trou. Cette expression ne donne pas de résultats en accord avec l'expérience. Afin de perfectionner ce modèle et rendre compte des résultats expérimentaux, les théoriciens ont rajouté un terme supplémentaire, V_c qui représente l'énergie Coulombienne de l'interaction de l'électron et du trou [76] :

$$V_c = -\frac{C e^2}{\epsilon R} \quad (\text{III-3})$$

Où ϵ est la constante diélectrique du matériau massif ; C est une constante de l'ordre de 1,8 (1,8 [77] ; 1,786[75]).

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left[\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] - \frac{1.8 e^2}{\epsilon a} \quad (\text{III-4})$$

Dans ce travail, nous avons adopté la relation (III-4) pour étudier l'effet de confinement à puits quantique sur le gap énergétique.

où E_g est le gap énergétique de nanostructure, E_g^0 est le gap énergétique d'un semiconducteur massif.

a : la largeur de puits quantique, ϵ la constante diélectrique effective, et m_e^* et m_h^* sont respectivement la masse effective des électrons et la masse effective des trous d'un semiconducteur massif. \hbar : Constant de Planck réduite.

En utilisant l'équation (III-4), pour déterminer le gap énergétique des composés binaires GaAs et InAs, InP, CdTe et ZnSe nanostructures aux point de haute symétrie Γ de la zone de Brillouin. Les composés que nous avons étudiés sont des semiconducteurs à gap direct, ce qui augmente la probabilité de transition optique.

Les valeurs des gaps d'énergie du GaAs et du InAs, InP, CdTe et du ZnSe aux points de haute symétrie Γ , les masses effectives des trous et des électrons ainsi que la constante diélectrique effective de chaque composés, sont illustrées sur le tableau (III-1).

Composé	E_{Γ}^{Γ} (eV)	ϵ_{eff}	Masses effectives des électrons m_e^*/m_0	Masse effectives des trous m_h^*/m_0
GaAs	1.42 ^{a)}	11.5 ^{a)}	0.067 ^{b)}	0.074 ^{b)}
InAs	0.36 ^{a)}	12.5 ^{a)}	0.023 ^{b)}	0.027 ^{b)}
InP	1.27 ^{a)}	12.1 ^{a)}	0.073 ^{b)}	0.089 ^{b)}
CdTe	1.44 ^{a)}	9.6 ^{a)}	0.09 ^{b)}	0.103 ^{b)}
ZnSe	2.67 ^{a)}	9.1 ^{a)}	0.17 ^{b)}	0.149 ^{b)}

Tableau III-1) Gaps d'énergie et les masses effectives des électrons et trous et les constants diélectrique effective des composé binaires.

a) Valeur théorique indiquée dans Ref [15].

b) Valeur théorique indiquée dans Ref [78].

Lorsque les dimensions du cristal, selon une ou plusieurs directions de l'espace, sont restreintes à des valeurs de l'ordre de la longueur d'onde de la fonction décrivant l'état d'un Porteur (longueur d'onde de De Broglie λ_B), le mouvement de ce porteur est quantifié selon cette (ces) direction(s) : c'est le confinement quantique. Il a pour effet la discrétisation des niveaux d'énergie permis dans la direction de confinement, ainsi qu'un changement radical du profil de densité d'états en fonction de l'énergie.

Afin de voir l'effet de confinement quantique sur les propriétés électroniques on a calculé le gap énergétique direct ($\Gamma - \Gamma$) en fonction de la largeur de puits quantique (a) pour les composés semiconducteurs GaAs et InAs, InP, CdTe et ZnSe à l'échelle nanométrique.

Pour cela nous avons effectué des calculs pour une large gamme de largeur de puits, de basses aux hautes largeurs, allant de (a=3nm) jusqu'à (a=100 nm). Nous traçons sur les Figure (III-1, III-2, III-3, III-4, III-5) respectivement les variations du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique.

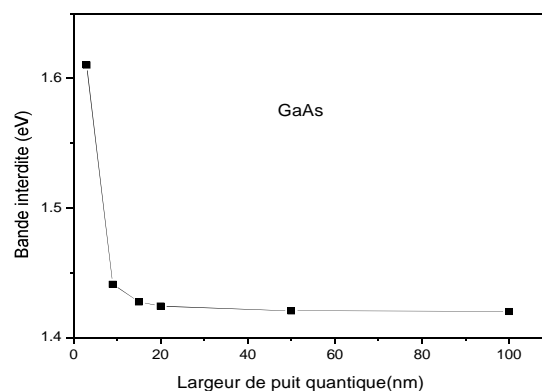


Figure III-1) Variation de la bande interdite (gap) en fonction de la largeur du puits quantique pour GaAs.

on remarque qu'on peut distinguer trois intervalles concernant la largeur de puit quantique :

Le premier intervalle correspondant aux largeurs allant de ($a=3\text{nm}$) jusqu'à ($a=5\text{nm}$), ou' nous observons une diminution rapide de gap énergétique (changement important de l'énergie de gap) tandis que l'énergie de confinement varie comme l'inverse du carré d'une distance $\propto \frac{1}{a^2}$.

Le deuxième intervalle correspondant aux largeurs allant de ($a=20\text{nm}$) jusqu'à ($a=50\text{nm}$) ou' on note une diminution lente de la valeur de E_g .

Le troisième intervalle correspond aux largeurs proches de 100nm ou' l'énergie de gap devenaient constante est ressemblant à celle de massif. On voit le même comportement qualitative pour tous les composés étudié. Quantitativement, il y'a une différence dans la largeur de la bande interdite.

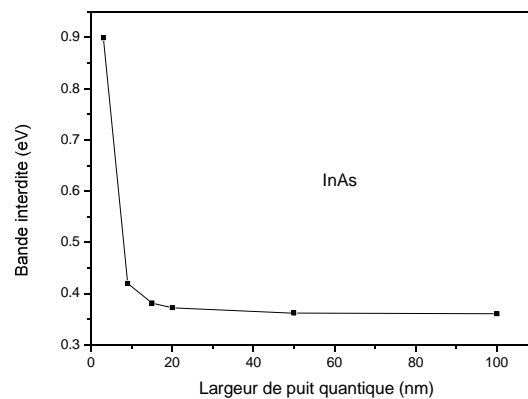


Figure III-2) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour InAs.

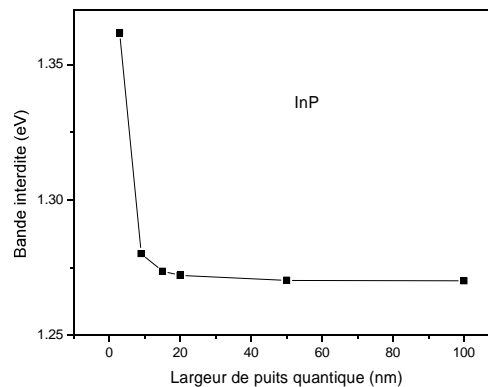


Figure III-3) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour InP.

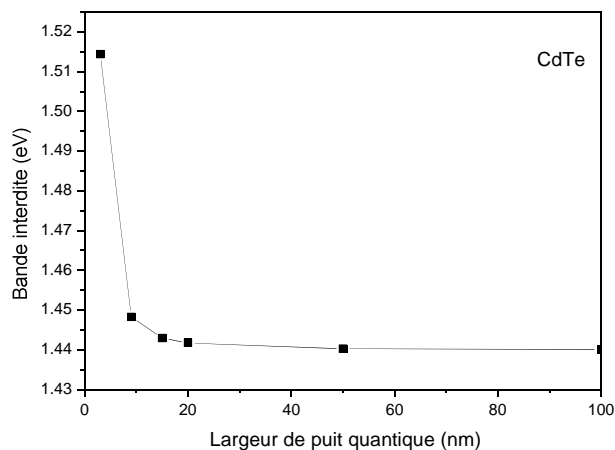


Figure III-4) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour CdTe.

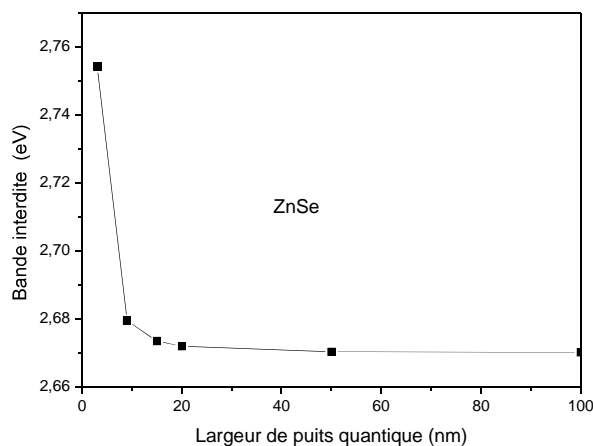


Figure III-5) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour ZnSe.

Nous remarquons une décroissance non linéaire de gap énergétique lorsque la largeur de puits quantique augmente. Plus la largeur de puits quantique est faible, plus l'énergie de la bande interdite est élevée.

Puisque on a remarqué que lorsque on dépasse la largeur de 20 nm on trouve une valeur presque fixe du gap énergétique proche de celle de massif et afin de voir les changements importants des propriétés nous avons pris un intervalle plus petit, Nos résultats sont mentionner sur les Figures (III-6, III-7, III-8, III-9, III-10 et III-11).

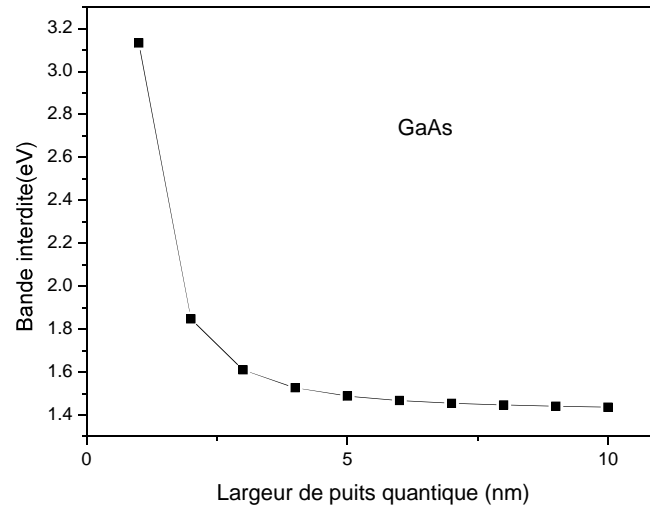


Figure III-6) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour GaAs.

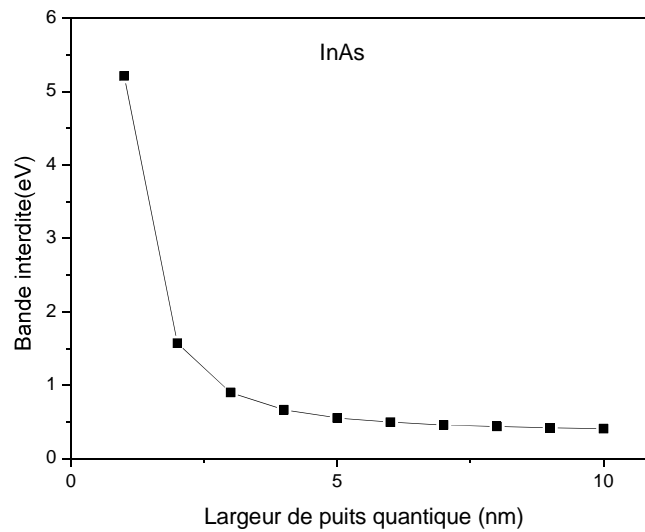


Figure III-7) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour InAs.

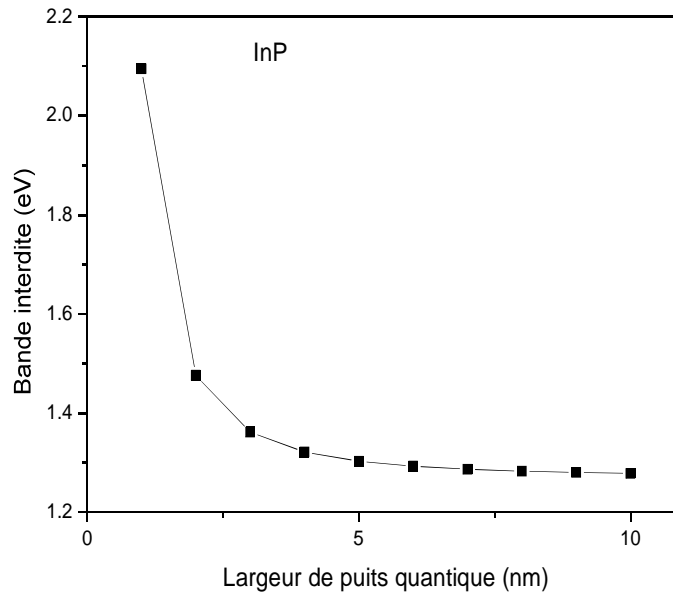


Figure III-8) Variation du gap énergétique d'InP en fonction de la largeur de puits quantique.

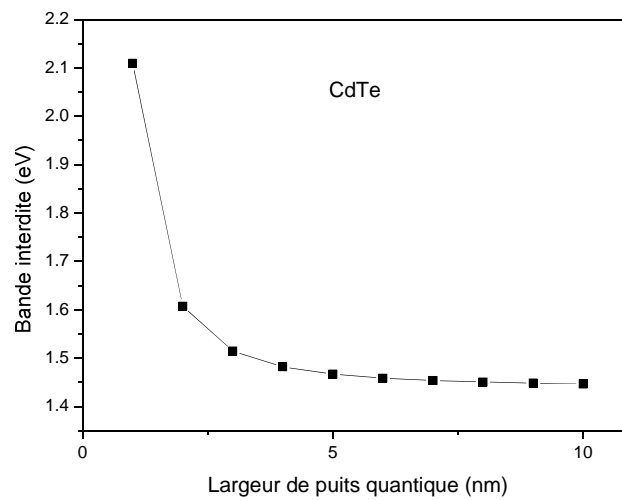


Figure III-9) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour CdTe.

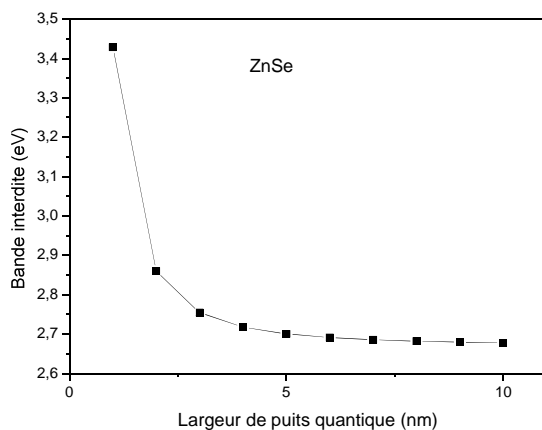


Figure III-10) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour ZnSe.

On remarque que la largeur de puits confiné possède un gap énergétique supérieur à celui du semiconducteur non confiné que signifie qu'il y a discrétisation des bandes d'énergie et augmentation de la largeur de la bande interdite du semiconducteur étudié.

La même tendance est observée pour tout les composé étudiée, la diminution de largeur de puits entraine une croissance de gap énergétique. L'augmentation importante de gap énergétique signifie que les semiconducteurs a tendance vers un isolant. Donc le confinement quantique augment le gap du semiconducteur et le matériau étudié devenu un bonne isolant.

Les semiconducteurs à grand gap, comme leur nom l'indique, sont ceux dont l'énergie de la largeur de la bande interdite est élevée. Cette énergie est reliée directement à L'émission/absorption d'une lumière de longueur d'onde caractéristique du matériau ou d'un assemblage de matériaux, utilisé pour la réalisation de composants optiques. Ces types de semiconducteurs présentent des longueurs d'ondes d'émission/absorption typiquement dans la gamme vert/bleu du spectre visible et dans le domaine de longueurs d'ondes plus courtes de la lumière, le violet/ultraviolet. Par exemple, la diode électroluminescente (DEL) bleu est une application bien connue des semiconducteurs à grand gap. Cependant, en général les Semiconducteurs à grand gap peuvent être définis comme ayant un seuil d'absorption optique fondamentale dont la longueur d'onde soit plus courte que celle de la couleur rouge. Des

exemples de composants optique sont : les diodes électroluminescente (DELs), les diodes laser, les photodiodes, les capteurs photoconducteur et les composants pour électro modulation.

Les composants électroluminescents à base de semiconducteurs sont très petits, très légers, très efficaces et ont des durées de vie très longues comparativement à d'autres sources de lumières. En particulier, les semiconducteurs à grand gap ont connus une attention importante et continuent croissante de la part de l'industrie électronique comme sources optiques pour l'affichage polychrome, pour l'émission (illumination) de lumière blanche, comme sources de lumière UV et UV/lointain, de diodes laser bleu-violet pour DVDs à haute densité, de composant électronique pour les applications de haute-puissance (haute tension), haute fréquence/haute puissance et de composants robustes dans des environnements difficile comme les hautes températures (quelques milliers de °C).

Comme E_g est fortement lié au paramètre de maille a_0 , une tentative a été faite pour mettre à l'échelle le paramètre de maille a_0 avec le gap E_g , pour $a=3\text{nm}$ et $a=100\text{nm}$.

Après avoir tracé la variation de E_g en fonction de a_0 , et on utilisant une interpolation quadratique, on obtient la relation suivante :

$$E_g = 198.64 + B_1 a_0 + B_2 a_0^2 \quad (\text{III-5})$$

ou'

$$B_1 = -64.30 \text{ Et } B_2 = 5.22$$

Pour $a=100 \text{ nm}$ on obtient la relation (III-6).

$$E_g = 6.007 + B_1 a_0 + B_2 a_0^2 \quad (\text{III-6}).$$

$$B_1 = 0.125 \text{ Et } B_2 = -0.093$$

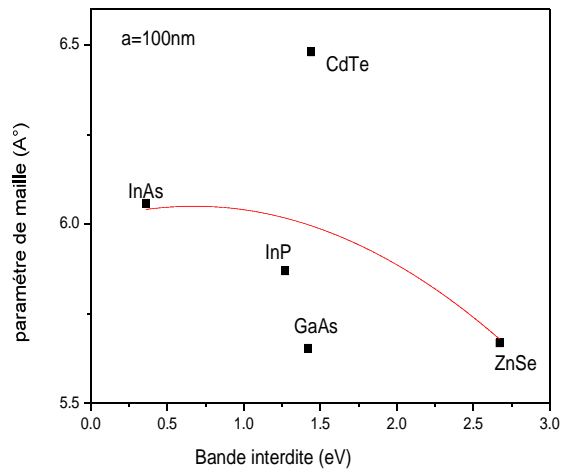


Figure III-11) La Variation d'Eg en fonction de paramètre de maille pour a=100 nm.

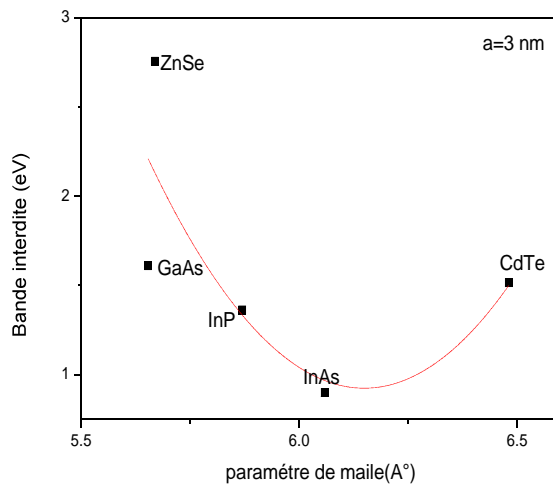


Figure III-12) La Variation de Eg en fonction de paramètre de maille pour a=3nm.

A fin de faire une comparaisons entre les valeurs de Eg pour nanosemiconducteur est celle de semiconducteur massif pour défèrent largeur de puits, Cette comparaison est représentée dans les Figures (III-13).

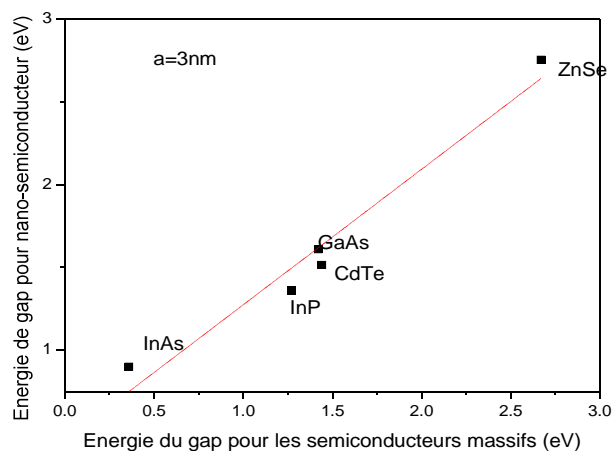


Figure III-13 (a) Gap énergétique pour les semiconducteurs composés nanométrique en fonction de celui des semiconducteurs massifs pour $a=3$ nm.

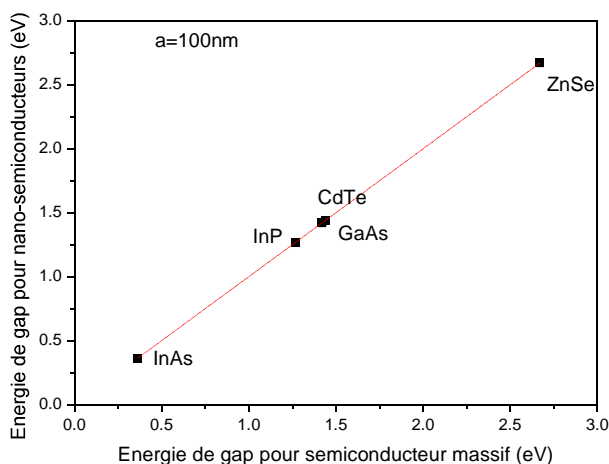


Figure III-13 (b) Gap énergétique pour les semiconducteurs composés nanométrique en fonction de celui de semiconducteurs massif pour $a=100$ nm.

L'énergie de la bande interdite des semiconducteurs à l'échelle nanométrique pour $a=100$ nm et coïncide bien avec celle des semiconducteurs massifs pour tout les composé d'intérêt ce qui suggère que les propriétés électroniques de semiconducteurs massifs ressemblent à celle des semiconducteurs à l'échelle nanométrique pour $a=100$, (aucun changement remarquable pour le gap).

Néanmoins, pour $a=3$ nm, on remarque qu'il y'a une déviation du gap énergétique à l'échelle nanométrique de celui du massif.

Cela indique qu'on passant du massif vers le nano, les propriétés électroniques des composé semiconducteurs changent, ce qui donne diverse opportunité pour le gap d'énergie.

III-2) Les propriétés optiques (indice de réfraction)

L'indice de réfraction (n) des semiconducteurs est d'un intérêt important pour des considérations à la fois fondamentales et appliquées. En outre, les dispositifs tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs, nécessitent une connaissance préalable de l'indice de réfraction [79].

Une corrélation entre n et E_g à des répercussions importantes sur la structure de bande des semiconducteurs, il serait utile de trouver une valeur acceptable de n d'un matériau quelconque à partir de cette relation. Dans le présent travail, l'indice n a été calculé en utilisant six modèles différents, qui sont tous directement liés à E_g (gap fondamental) .

1. La relation de Moss basée sur le modèle atomique [80-81-82].

$$n^4 E_g = k \quad (\text{III-6})$$

Ou'

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

2. La relation linéaire entre n et E_g représentée par Ravindra et Gupta et donnée par [83] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{III-7})$$

Ou'

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

3. L'expression empirique de Hervé et Vandamme donnée par [84]:

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2} \quad (\text{III-8})$$

4. La relation de Reddy et Anjaneyulu [85] :

$$E_g e^n = 36.3 \quad (\text{III-9})$$

5. La relation de Ravindra [86] :

$$n = 4.16 - 0.85E_g \quad (\text{III-10})$$

6. L'expression empirique de Reddy et Ahmmed [87] :

$$n^4(E_g - 0.365) = 154 \quad (\text{III-11})$$

III-2-1) Les semiconducteurs binaires III-V : GaAs, InAs, InP

Dans la figure (III-14) on montre la variation de l'indice de réfraction de GaAs en fonction de la largeur de puits quantique on utilisant les six modèles cités auparavant.

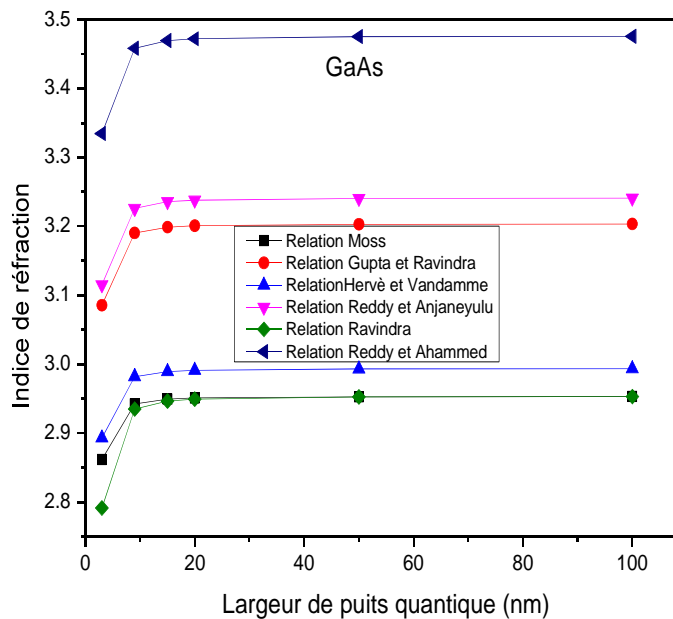


Figure III-14) Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.

Qualitativement on note que la même tendance de n en fonction de a est observée pour GaAs pour toutes les modèles utilisés. En effet, l'augmentation de la largeur de puits quantique entraîne une augmentation monotone de n .

Au point de vue quantitative, on remarque que la valeur de n calculer par le modèle de Reddy et Ahmmed est la plus proche de la valeur expérimentale reportée dans la référence [88] (voir tableau III-2).

Nous voyions clairement que pour le modèle de Reddy et Ahmmed, lorsque en augmente progressivement la largeur de puits de 3 à 9 nm, n augment de 3.33 pour ($a=3$ nm) jusqu'à 3.45 pour ($a=9$ nm), puis il augmente lentement jusqu'à 3.47 pour $a=20$ nm ensuite il devient constant a partir de $a=20$.

Matériau Semiconducteur (massif)	n calculer à partir de :						Littérature (exp)
	Relation de Moss	Relation de Ravindra et Gupta	Relation de Hervé et Vandamme	Relation de Reddy et Anjaneyulu	Relation de Ravindra	Relation de Reddy et Ahmmed	
GaAs	2.95	3.20	2.99	3.24	2.95	3.47	3.35 ^{c)}
InAs	4.16	4.08	3.75	4.61	3.85		3.51 ^{c)}
InP	3.03	3.29	3.07	3.35	3.08	3.61	3.1 ^{c)}
CdTe	2.92	3.19	2.98	3.22	2.93	3.45	2.72 ^{d)}
ZnSe	2.52	2.42	2.45	2.60	1.89	2.85	2.5 ^{d)}

Tableau III-2) calcul des indice de réfraction de semiconducteur étudiier pour ($a=100$ nm), comparée aux donnée expérimentale.

^{c)} valeur expérimental indiquée dans Ref [88].

^{d)} valeur expérimental indiquée dans Ref [89].

Il est important de noter qu'un changement significative de n se manifeste dans l'intervalle de a : 1nm-10nm.

A cet effet, nous avons tracé la variation de n en fonction de a (a varie entre 1et 10nm) en utilisent les différents modèle sur la figure (III-15).

pour le modèle de Reddy et Ahammed n augmente de 2.73 pour ($a=1\text{nm}$) jusqu'à 3.19 pour ($a=2\text{nm}$), la valeur de n est renforcée lorsque on augmente la largeur de puits quantique.

Ceci est un résultat attendu, puisque selon l'équation (III-6), plus le matériau a un gap fondamental petit plus la valeur de n est grande.

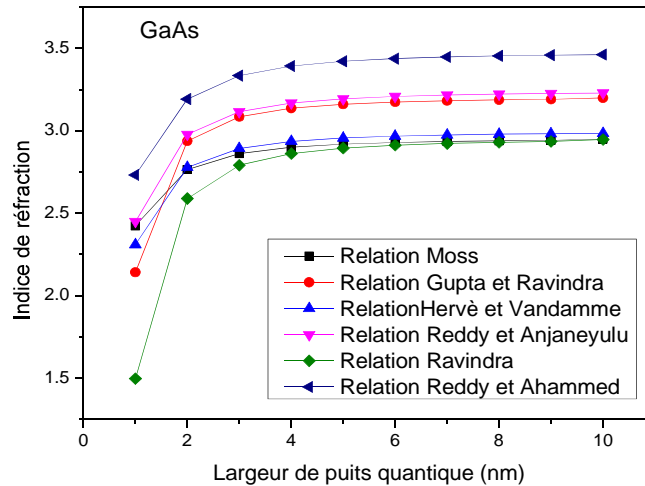


Figure III-15) Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.

Nous avons aussi représentés dans les figures (III-16) et (III-17) la variation de n en fonction de a pour l'InAs.

La valeur de n est renforcée lorsqu'on passe de nano vers le massif, pour le modèle de Hervé et Vandamme on remarque une augmentation non-linéaire de n de 3.31 pour ($a=3\text{nm}$) à 3.89 pour ($a=50\text{nm}$) puis diminue jusque 3.75 pour ($a=100\text{nm}$), cette valeur est en bonne accord avec le résultat de tableau (III-2).

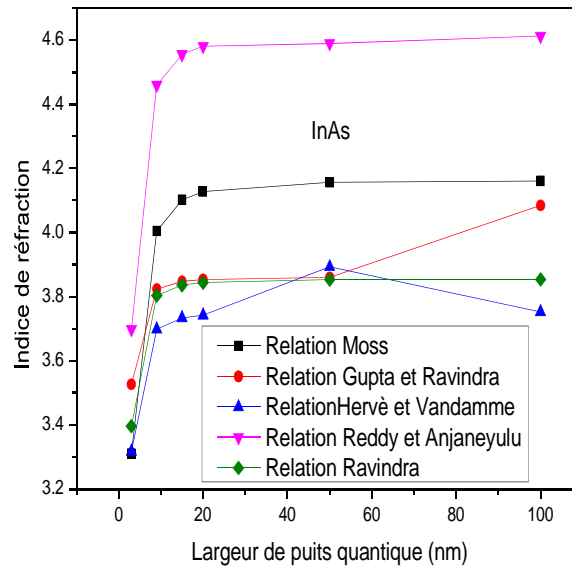


Figure III-16) Variation de l'indice de réfraction de l'InAs en fonction de la largeur de puits quantique.

Nous avons représenté dans la figure (III-17) la variation de n pour les largeurs de puits $0 \leq a \leq 10$ nm. La même tendance est observée pour tous les modèles utilisés, l'augmentation de la largeur de puits quantique entraîne une augmentation monotone de n , le modèle de Reddy et Ahmed nous permet d'obtenir une valeur différente par rapport à celle obtenue par les autres modèles pour ($a=10$ nm), elle est de l'ordre de 7.71.

Il est important de noter qu'à ($a=1$ nm) pour le modèle de Ravindra on obtient une valeur de l'ordre de -0.69. Ce qui indique que à cette valeur de puits l'InAs se comporte comme un métamatériau.

Mais il faut être attentif dans ce cas, car il est possible que le gap énergétique de matériau dans cet intervalle peut être indirect. Est dans ce cas on peut avoir un indice positif.

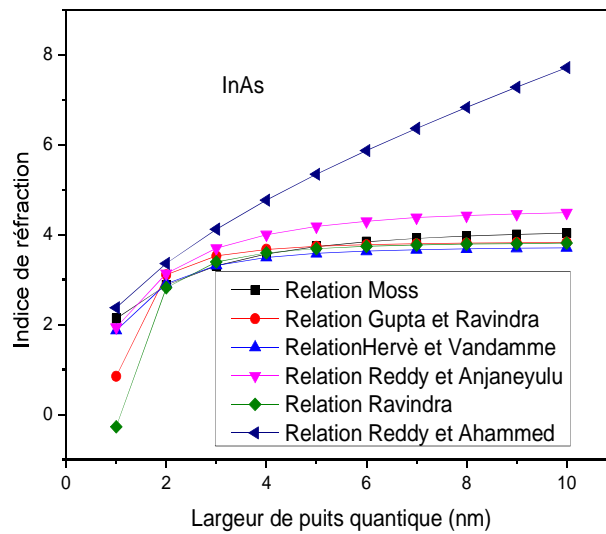


Figure III-17) Variation de l'indice de réfraction de l'InAs en fonction de la largeur de puits quantique.

Normalement pour les matériaux naturels, l'indice de réfraction est supposé avoir une valeur positive. Mais pour la première fois, le physicien russe Victor Vasselage a démontré que cet indice est supérieur ou égale à 1. Or, avec les métamatériaux, on peut obtenir un indice de réfraction inférieur à 1, voir même négatif, ce qui fait que le rayon transmis se retrouve du même côté de la normale que le rayon incident. Si un matériau avait des valeurs négatives à la fois pour les réponses électrique et magnétique.

Les métamatériaux sont des composites artificiels qui ont des propriétés électromagnétiques qu'on ne trouve pas dans la nature. Malgré des développements spectaculaires durant la dernière décennie, le potentiel de ces structures aux longueurs d'ondes optique n'est pas encore clairement défini en raison de problèmes technologiques et de contraintes physiques telles que les pertes dans les métaux entrant dans la composition des métamatériaux, les métamatériaux ont des propriétés très favorables dans le contexte de l'optique intégrée dans le proche infrarouge, par exemple des matériaux de camouflage permettant de rendre une personne ou un engin volant invisible à la détection. Les métamatériaux sont exploités par de nombreuses technologies de pointe comme les lentilles parfaites ou les antennes et les systèmes térahertz. Vu que leur champ d'application s'étend, il devient de plus en plus crucial

de pouvoir les modéliser, tâche difficile en raison de leur nature peu conventionnelle et de leurs propriétés délicates.

Nos résultats calculés de l'indice de réfraction pour InP est représenté sur les figures (III-18) et (III-19).

La même tendance est observée pour tous les modèles utilisés, l'augmentation de la largeur de puits quantique entraîne une augmentation monotone de n .

Toutefois, le taux de l'augmentation semble être dépendant du modèle utilisé, pour le modèle de Reddy et Ahmmed n prend une valeur de l'ordre de 3.61 pour ($a=100\text{nm}$). Cette valeur est mieux de 17%, pour le modèle de Reddy et Anjaneyulu et 9% et 1% pour Hervé et Vandamme.

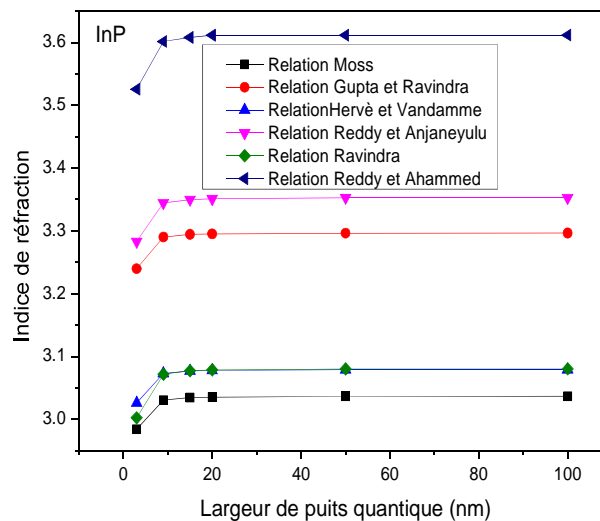


Figure III-18) Variation de l'indice de réfraction de l'InP en fonction de la largeur de puits quantique.

Il est important de noter qu'un changement significative de n se manifeste dans l'intervalle de a : 1nm-10nm.

A cet effet, nous avons tracé la variation de n en fonction de a (a varie entre 1et 10nm) en utilisant les différents modèle sur la figure (III-19).

La même tendance observée, augmentation de la largeur de puits quantique de 1nm à 2nm entraine une augmentation de l'indice de réfraction puis il devient constant jusqu'à 10nm, sauf pour celle obtenu par le modèle de Hervé et Vandamme, il augmente de 3.07 pour $a=8\text{nm}$ jusqu'à 3.73 pour $a=10\text{nm}$ puis il diminue.

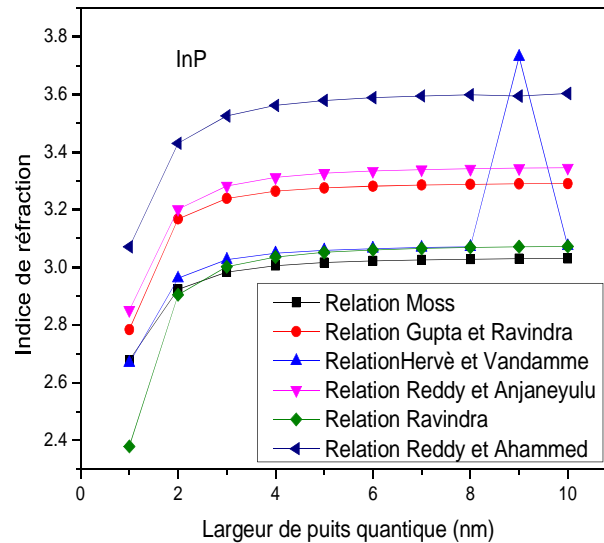


Figure III-19) Variation de l'indice de réfraction de l'InP en fonction de la largeur de puits quantique.

III-2-2) Les semiconducteurs binaires II-VI : CdTe, ZnSe

Dans la figure (III-20) on montre la variation de l'indice de réfraction de CdTe en fonction de la largeur de puits quantique on utilisant les six modèles cités auparavant.

Qualitativement on note que la même tendance de n en fonction de a est observée pour CdTe pour toutes les modèles utilisés. En effet, l'augmentation de la largeur de puits quantique entraîne une augmentation monotone de n .

Au point de vue quantitative, on remarque que la valeur de n calculer par le modèle de Moss est la plus proche de la valeur expérimentale reportée dans la référence [89] (voir tableau III-2). Nos résultats pour $a=100\text{nm}$ concordent avec les données connues de moins de 8%, 19% et 27% en utilisant les relations (III-6), (III-9) et (III-11) respectivement.

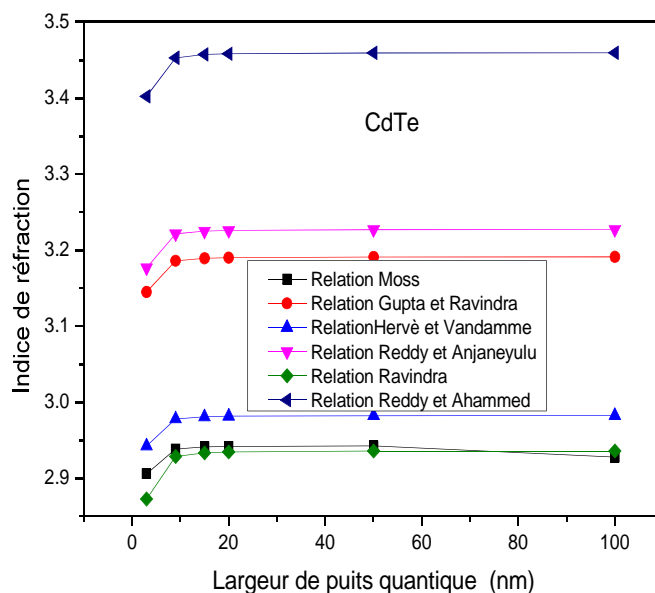


Figure III-20) Variation de l'indice de réfraction de CdTe en fonction de la largeur de puits quantique.

Changement important de la valeur de n pour la largeur de puits inférieure à 2nm, une diminution de la largeur de puits quantique entraîne une diminution de la valeur de n comme représenté la figure suivante :

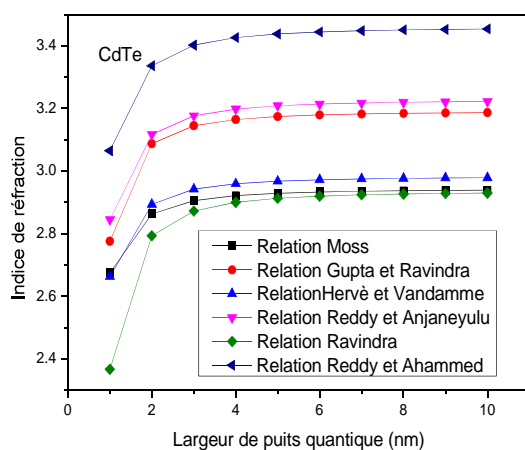


Figure III-21) Variation de l'indice de réfraction de CdTe en fonction de la largeur de puits quantique.

Pour le ZnSe, on remarque une augmentation de la valeur de n de ($a=3$ nm) jusqu'à ($a=9$ nm) puis elle devient constante lorsque on dépasse cette intervalle, prendre des valeurs respectivement de 2.83 jusqu'à 2.85 pour le modèle de Reddy et Ahmed, Ces résultats sont mentionnés dans la Figure (III-22).

Pour ($a=100$ nm) le modèle de Reddy et Ahmed est le meilleur par rapport aux autres modèles comparativement à l'expérience.

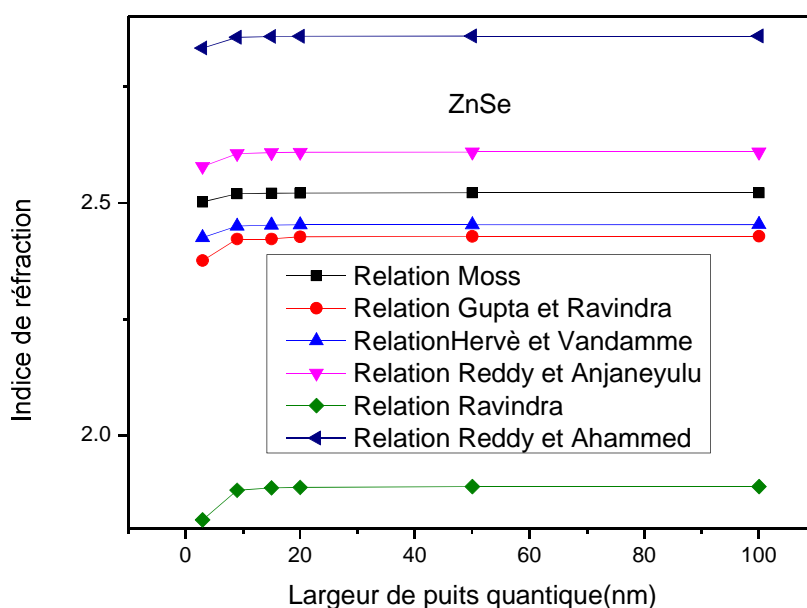


Figure III-22) Variation de l'indice de réfraction de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique.

La valeur de l'indice de réfraction peut diminuer lorsque la largeur de puits quantique augmente, diminue de 2.59 pour ($a=5$ nm) peut-il revenir à la même valeur, comme celle obtenue par le modèle de Reddy et Anjaneyulu, étant donné que n est fortement liée à E_g qui diminue avec la diminution de a comme (voir Figure (III-23)), le matériau qui a le plus petit gap a la plus grande valeur de n .

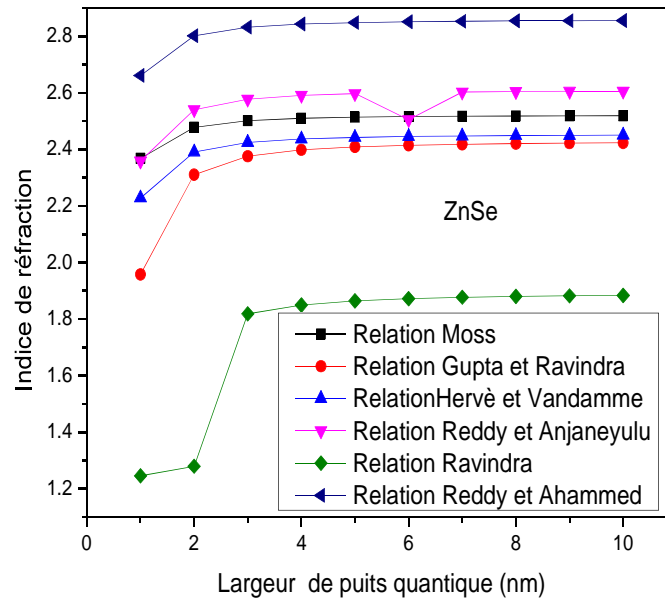


Figure III-23) Variation de l'indice de réfraction de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique.

Comme E_g est fortement lié à a_0 et le fait que n dépend de E_g , une tentative a été fait pour mettre à l'échelle n avec le paramètre de maille dans les nanosemi-conducteurs pour ($a=3nm$), notre calcul basent sur relation Moss.

Comme indiqué dans la Figure (III-24).cette échelle nous permet d'obtenir la relation suivante :

$$n = -95.26 + B_1 a_0 + a_0^2 B_2 \tag{III-12}$$

Ou'

$$B_1 = 32.15 \text{ et } B_2 = -62.$$

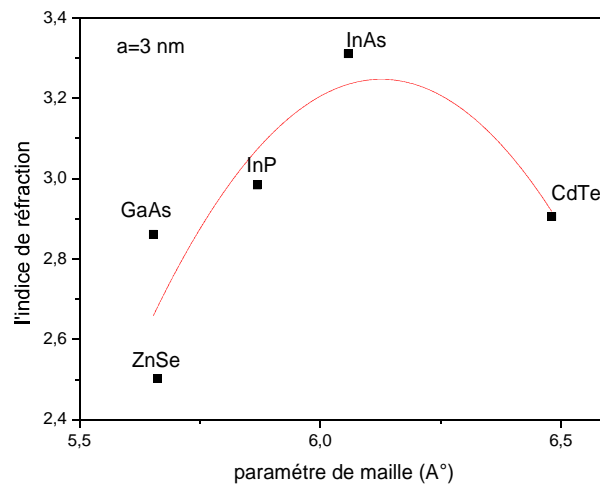


Figure III-24) Variation de l'indice de réfraction en fonction du paramètre de maille pour $a=3\text{nm}$.

III-3) Les propriétés diélectriques

III-3-1) La constante diélectriques de haute fréquence (ϵ_∞)

Basé sur les valeurs calculées de n obtenues à partir des relations précédentes, la constante diélectrique de haute fréquence (ϵ_∞) a été calculer pour différentes largeur de puits quantique dans l'intervalle 0-100 nm à l'aide de relation suivante :

$$E_\infty = n^2 \quad (\text{III-13})$$

III-3-1-1) Les semiconducteurs binaires III-V : GaAs, InAs, InP

Nos résultat consternent la variation de ϵ_∞ en fonction de a pour GaAs sont représentés les Figure (III-25) et (III-26).

Une augmentation remarquable de la constante diélectrique de haute fréquence pour les largeurs varient de 3nm à 9nm, A partir de $a=9\text{nm}$, elle devient presque constante.

Toutefois le taux d'augmentation semble être dépendant du modèle utilisé. Etant donnée que la constante diélectrique de haute fréquence est fortement liée à n qui augment avec l'augmentation de la largeur de puits quantique.

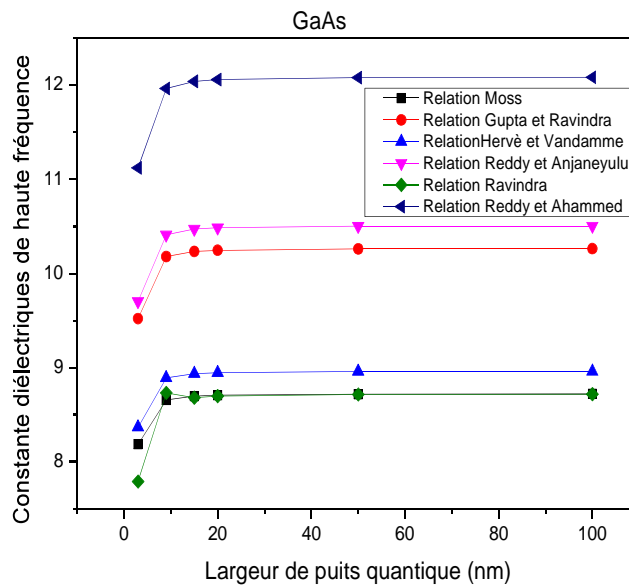


Figure III-25) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.

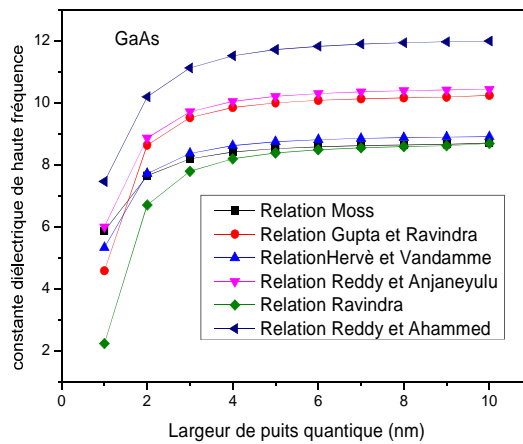


Figure III-26) Variation du constant diélectrique de haute fréquence du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.

La variation de ϵ_{∞} en fonction de la largeur de puits quantique pour InAs est montré dans la Figure (III-27). Nous observons que pour les valeurs de a allant de 3nm à 9 nm,

ϵ_{∞} augment de 13.67 pour ($a=3\text{nm}$) à 19.88 pour ($a=9\text{nm}$), puis elle devient presque constantes .

La situation est différente pour celle obtenu par le modèle de Hervé et Vandamme, qui augmente de 13.99 pour $a=20\text{ nm}$, pour $a=50\text{ nm}$, alors qu'elle diminue jusqu'à 14.07 pour $a=100\text{ nm}$.

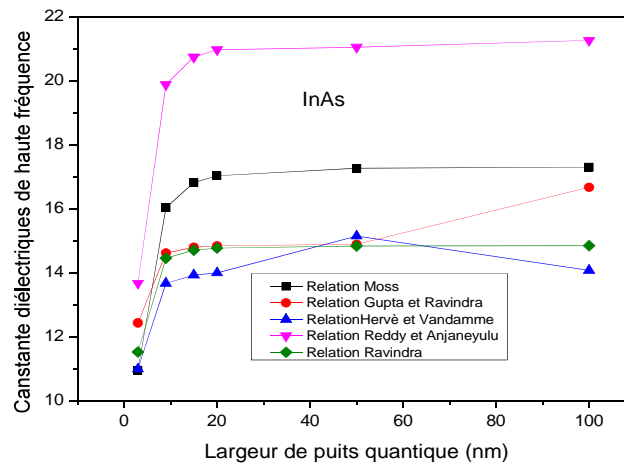


Figure III-27) Variation de la constante diélectriques de haute fréquence du InAs en fonction de la largeur de puits quantique.

Nous observons que pour les valeurs de a allant de 1nm à 10 nm , ϵ_{∞} augment de 5.63 pour $a=1\text{nm}$ jusqu'à 59.49 pour $a=10\text{ nm}$, pour $a=1\text{nm}$ elle est de l'ordre de 0.0724.

La tendance de ϵ_{∞} indique que la constante diélectrique augmente pour des grandes largeurs de puits. L'augmentation de la constante diélectrique conduit à l'augmentation de la densité de flux électrique. Cela permet à InAs de tenir leur charge électrique pendant de longues périodes de temps ayant ainsi des grandes quantités de charges. Généralement, les matériaux à haute constante diélectrique sont utilisés dans la fabrication de condensateurs de grandes capacités.

La variation de ϵ_{∞} en fonction de la largeur de puits quantique de InAs est montré dans Figure (III-28).

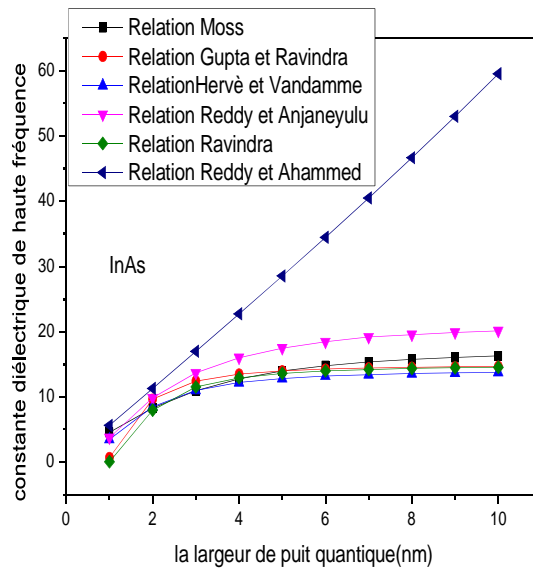


Figure III-28) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'InAs en fonction de la largeur de puits quantique.

La variation de ϵ_{∞} en fonction de la largeur de puits quantique pour InP est présentée dans la Figure (III-29). Nous observons que ϵ_{∞} varie non linéairement avec la largeur de puits quantique et suit le même comportement qualitatif pour les modèles adaptés.

Nous observons que pour les valeurs de a allant de 3 nm à 20 nm, ϵ_{∞} augmente de 12.43 pour $a=3$ nm à 13.04 pour $a=20$ nm, puis elle devient constante.

La tendance de ϵ_{∞} indique que la constante diélectrique diminue pour des petites largeurs de InP, ce qui rend le matériau un bon isolant.

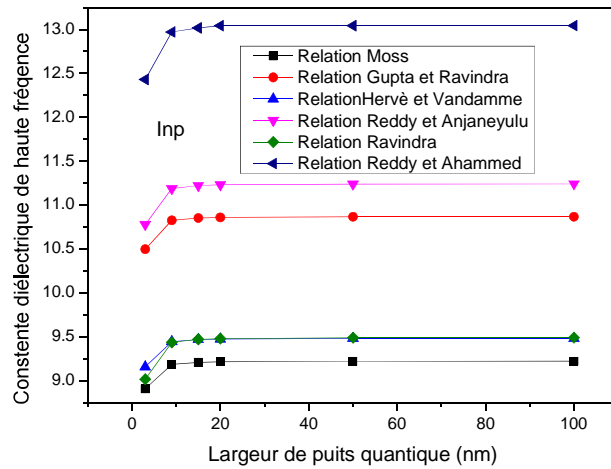


Figure III-29) Variation de la constant diélectrique de haute fréquence du InP en fonction de la largeur de puits quantique.

Remarquant, qu'en diminue la largeur de puits de 2 nm à 1nm, ϵ_{∞} décroît linéairement, ce n'est pas surprenant puisque selon l'équation (III-13), on peut s'attendre à un comportement de ϵ_{∞} qualitativement semblable à celui de n .

La dépendance de ϵ_{∞} de la largeur de puits pour InP est montré dans la Figure (III-30).

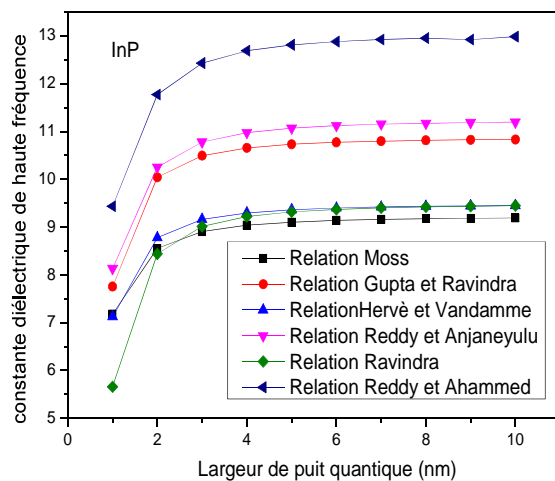


Figure III-30) Variation de la constant diélectrique de haute fréquence de l'InP en fonction de la largeur de puits quantique.

III-3-1-2) Les semiconducteurs binaires II-VI : CdTe, ZnSe

Les calculs des propriétés électroniques des composé ZnSe, CdTe, ont été effectués pour comprendre le comportement de ϵ_{∞} calculé au point Γ en fonction de différent largeurs de puits quantique.

On utilisant l'équation (III-13).la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} a été estimée pour différentes valeur de a basée sur les valeurs calculées de n.

La variation de ϵ_{∞} en fonction de la largeur de puits quantique pour CdTe est tracée sur la Figure (III-31). Remarquant, qu'en augment la largeur de puits quantique de 3nm à 9nm pour CdTe, la valeur de ϵ_{∞} dépend du modèle utilisé, pour modèle de Moss la valeur de ϵ_{∞} augment de 11.57 pour (a=3nm) jusqu'à 11.92 pour (a=9nm).pour celle obtenir par le modèle de Ravindra, elle augmente de 8.25 pour (a=3nm) jusqu'à 8.57 pour (a=9nm). A partir de cet intervalle la valeur de ϵ_{∞} devenir constant ressemblant à celle non confiné (massif).

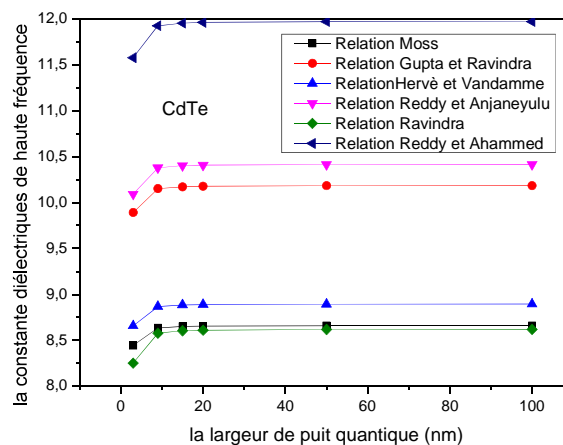


Figure III-31) la variation du constant diélectrique de haute fréquence du CdTe en fonction de la largeur de puits quantique.

Nous observons que pour les valeurs de puits allant de 1 à 10 nm, ϵ_{∞} augment de 9.39 pour (a=1nm) jusqu'à 11.82 à (a=5nm) pour modèle de Reddy et Ahammed puis elle devenait constant a partir cet intervalle, La même tendance est noté pour Ravindra, elle augment de 5.60 (a=1nm) jusqu'à 8.52 pour (a=5nm) puis elle se stabilise. Notre résultat est représenté sur la Figure (III-32).

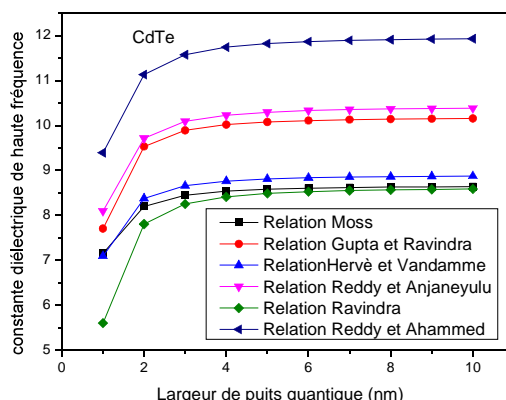


Figure III-32) Variation du constant diélectrique de haute fréquence de CdTe en fonction de la largeur de puits quantique pour $1 \leq a \leq 10 \text{ nm}$.

La tendance de ϵ_∞ pour ZnSe indique que la constante diélectrique augmente pour la largeur de puits allant de 3nm à 9nm, puis elle devenait constante lorsque en augment la largeur de puits quantique. Cette valeur varie d'un modèle à un autre par exemple, pour le modèle de Reddy et Ahammed elle est de l'ordre de 8.02 pour ($a=3\text{nm}$), pour ($a=9\text{nm}$) à une valeur égale à 8.15. La variation de ϵ_∞ pour $3 \leq a \leq 100 \text{ nm}$ est mentionnée sur la Figure (III-33).

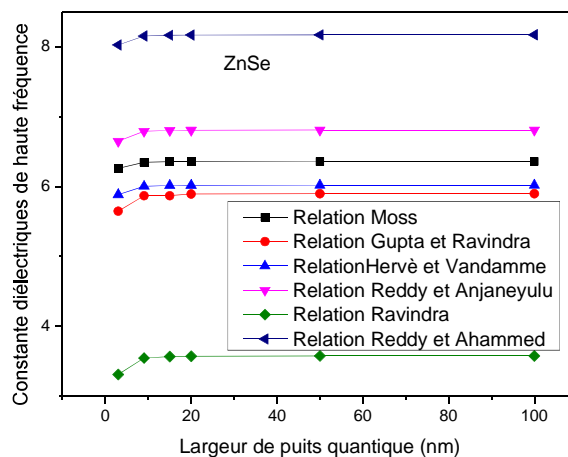


Figure III-33) Variation de la constant diélectrique de haute fréquence de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique pour $3 \leq a \leq 100 \text{ nm}$.

Par ailleurs, le même comportement est remarqué pour l'intervalle de confinement $0 \leq a \leq 10$ nm, Nos résultats concernent La variation de ε_{∞} en fonction de la largeur de puits quantique pour CdTe est tracée sur la Figure (III-34).

la valeur de ε_{∞} augment de 7.08 pour ($a=1$ nm) à 8.028 pour ($a=3$ nm), puis elle devin constante, sauf pour celle calculée par le modèle de Reddy et Anjaneyulu, on note une diminution de 6.75 pour ($a=5$ nm) jusqu'à 6.33 pour ($a=6$ nm) puis il augment pour ($a=7$ nm) pour se stabilise à 6.78.

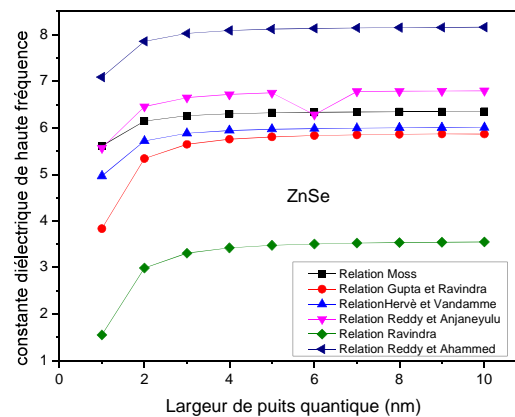


Figure III-34) Variation de constante diélectrique de haute fréquence de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique pour $1 \leq a \leq 10$ nm.

La valeur de ε_{∞} est renforcée a l'intervalle $0 \leq a \leq 10$, qui signifie que il devenu un isolant est peuvent être employés comme isolateur électrique le plus.

En conséquence, on peut conclure qu'en diminué la largeur de puits quantique la capacité de stocker de l'énergie électrique potentielle sous l'influence d'un champ électrique augment. L'augmentation de la constante diélectrique conduit à l'augmentation de la densité de flux électrique. Cela permet aux semiconducteurs étudiés de tenir leur charge électrique pendant de longues périodes de temps ayant ainsi des grandes quantités de charge.

Généralement, les matériaux à haute constant diélectrique sont utilisés dans la fabrication de condensateur de grandes capacités.les condensateur sont des composants important dans la plupart des circuits électriques. Les circuits utilisés en haute fréquence sont

réalisés sur des substrats spécifiques. Un substrat ayant une constante diélectrique élevée vous permettra d'obtenir un bon confinement des ondes électromagnétiques, une réduction des pertes par rayonnement, une diminution de la valeur de la longueur d'onde et donc une diminution de la taille de votre circuit. L'épaisseur du substrat est aussi à prendre en compte. Une faible épaisseur de substrat entraîne une suppression des modes de propagation d'ordre supérieur (autre que TEM), une réduction des pertes par rayonnement et une réduction des dimensions du circuit. Plus l'épaisseur est faible, plus la fréquence de travail peut être élevée.

Comme n est fortement lié à a_0 et le fait que ϵ_∞ dépend de n , une tentative a été faite pour mettre à l'échelle ϵ_∞ avec le paramètre de maille dans les nano-semiconducteurs pour ($a=3\text{nm}$). On utilise le modèle Moss.

Comme indiqué dans la Figure (III-35), cette échelle nous permet d'obtenir la relation suivante :

$$\epsilon_\infty = -574.23 + 190.93a_0 - 15.58a_0^2$$

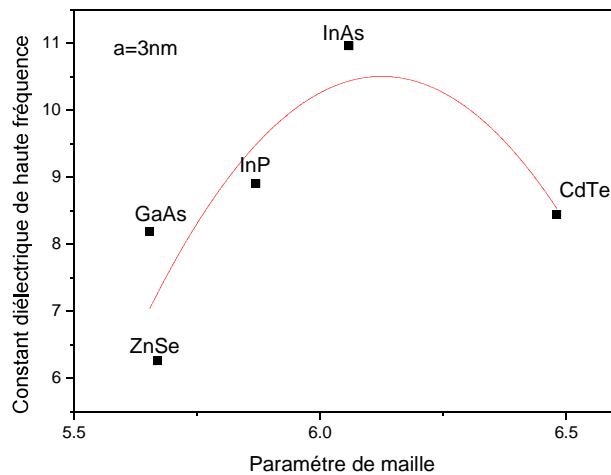


Figure III-35) Echelle de variation de ϵ_∞ en fonction de paramètre de maille pour $a=3\text{nm}$.

Elle peut exprimer la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de paramètre de maille d'une façon approximative.



CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

En conclusion, dans ce présent travail nous avons étudié l'effet des confinement quantique sur les propriétés optoélectronique des semiconducteurs à puits quantique, a savoir GaAs, InAs, InP, CdTe et ZnTe. Pour cela nous avons utilisé l'approximation de la masse effective qui permet de donner la description la plus économique des bandes d'énergie dans les semiconducteurs ce qui est également connu comme étant l'approche k.p, elle utilise un ensemble minimal de paramètres qui sont déterminés empiriquement à partir de l'expérience. Par l'emploi de la théorie de perturbation, elle fournit une continuité des bandes d'énergies, en un vecteur d'onde k au voisinage de certains points de haute symétrie ($\Gamma - \Gamma$). En trouve un changement considérable des propriétés physiques lorsqu'on passe de l'état massif à l'état nanométrique, pour les largeurs de puits inférieure à 5 nm.

Une variation non linéaire pour les propriétés électroniques, par contre la variation des propriétés optique est monotone. Un élargissement de la bande interdite signifiée l'importance de ces matériaux pour l'application optoélectronique.

Pour les largeurs de puits inférieure à 3nm, l'InAs est devenu un métamatériau (par l'utilisation du modèle de Ravindra), ces matériaux sont récemment connus.

La diminution de la valeur du constant diélectrique à haute fréquence indique que les semiconducteurs étudiés sont des bons semiconducteurs à l'intervalle $2 \leq a \leq 10$ nm.

On obtient des bonnes résultats qui sont en bon accord avec l'expérimental pour ($a=100$ nm) par le modèle de Reddy et Ahmmed.

Une tentative a été faite pour le gap E_g , n et ϵ_∞ , a fin de représenter ces quantité dans les nanosemiconducteurs en fonction de paramètre de maille.

La présente étude peut aider à la découverte de nouvelles propriétés souhaitées lors du passage du massif aux semi-conductrices nanostructures. Ainsi, les propriétés dépendant de la taille de cristal peuvent fournir plus diverses opportunités pour le développement de dispositifs de petite taille, l'évolution des propriétés optiques des nanomatériaux semiconducteurs en fonction de la taille des nanocristallites. Vu l'importance des propriétés aboutir par rapport à la jeunesse de ce domaine on peut prédire que les nanomatériaux sont la clé de future. Autrement dit les nanomatériaux constituent les briques élémentaires des matériaux de future.



Références bibliographiques

Références bibliographiques

- [1] C.Kittel. Introduction to solid state physics, 6th Ed, Wiley, New, 1986.
- [2] John Wiley and sons, S.M.SZE, physics of semiconductor Derices; 1981.
- [3] C. Fèlix, G. Vadoni, C. Mossobrio, R. Monot, J. Buttet and W. Harbich ; Phys. Rev. B volume 57, N°7 (1998), 4048-4052.
- [4] <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>.
- [5] LT.Canham, Appl.Phys.lett.57, 1046(1990).
- [6] Formation de bandes d'énergie par interaction de niveaux atomiques (2005 Encyclopædia Universalis France S.A.).
- [7] Julien Bok, « semiconducteurs », Encyclopædia Universalis, Paris, 2014.
- [8] www.creea.u-bordeaux.fr/physique_tecnologie_composants_puissance.pdf.
- [9] MEZRAG Fadila, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteur, thèse de Doctorat, 2012, Université, BISKRA.
- [10] S.M.SZE, physics of semiconductor Derices, John Wiley and sons; 1981.
- [11] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College: Philadelphia (1976).
- [12].H.Mathieu, Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques, 4Ed, Masson, (1998).
- [13] R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski, et M. Ilegems, Phys. Rev. B 4, 1211 (1971).
- [14] Hervé Fanet, « Micro et Nanoélectroniques » _ Bases, composants, circuits, DUNOD, Paris, 2006.
- [15] Henry Mathieu et Hervé Fanet, « physique des semiconducteurs et composants électroniques », 6 Ed, DUNOD, paris, 2009.
- [16] Charles Kittel, « physique de l'état solide », 7 Ed, DOUNOD, Paris, 1998.
- [17] E .Mooser, «Introduction à la physique du solide»,1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [18] C.Ngô-Hélène Ngô, physique des semi-conducteurs ,3 Ed .Dunod ,(2007).
- [19] F. W. Wise, Accounts of Chem. Res. 33 (2000) 11.

- [20] Semi-conducteurs – rappels théoriques -3Plate-forme Matière Condensée et Cristallographie (MCC) --- C.E.S.I.R.E. Université J.Fourier Grenoble.
- [21] H. J. Monkhorst , J. D. Pack, Phys. Rev. B 13, 5189 (1976).
- [22]Beiser A.physique Appliquée :cours et problèmes.McGrawHill,série Schaum .
- [23]www.phytem.ens-cachan.fr/semicond_transp05_06.pdf.
- [24]Q.Tridoan, thèse de doctorat,université de Reims, Champagne .Ardenne,(2011).
- [25]G.Roosen , « Matériaux semiconducteurs III-V,II-VI et nitrures pour l'optoélectronique », Ed.Hermes Science (2003).
- [26] R. S. Mulliken, J. Chem. Phys., 23, 1833-1846 (1955).
- [27] M. Segall, M. Probert, C. Pickard, P. Hasnip, S. Clark, K. Refson, M. Payne, CASTEP version 3.2 Ab Initio Total Energy Program (2004).
- [28] www.sbarbati.wordpress.com.
- [29]J.Boucher, J . Simonne, « Principes et fonctions de l' électronique intégrée »,Ed Cepadues ,(1977).
- [30] Semi-conducteur, Diode électroluminescente , Semi-conducteurs III-V Diode L.A.S.E.R.
- [31]F. Mezrag, N Bouarissa, M Boucenna and L Hannachi phys.scr.82(2010)035702.
- [32] A.Pourghazi, M. Dadsetani, Physica B 370 (2005) 35.
- [33]C.Kittel, « physique de l'état solide»,Ed. Dunod Université(1983).
- [34] E.L. Wolf, Nanophysics and Nanotechnology An introduction to modern concepts in Nanoscience, Wiley Ed. (2004).
- [35] HERVE-BAZIN B. « Les dangers des particules ultrafines ». Préventique sécurité, mars-avril 2005, pp. 12-16.
- [36]D. Charlac'h, Y. Hemery, Etude prospective sur les nanomatériaux, DIGITIP synthèse, France (2004).
- [37] P. M. Ajayan, L. S. Schadler, P. V. Braun, “Nanocomposite Science and Technology”, Wiley – VCH (2003).
- [38] Les Nanomatériaux, “Effet sur la santé de l'homme et sur l'environnement”, AFSSET, France (2006).
- [39] P. Knauth, Nanostructured Matériaux: Selected Synthesis Methods Properties and Applications, Kluwer Academic Publishers (2004)
- [40] J. J. Ramsden, S. E. Webber J. of Phys. Chem. 89 (1985) 13.
- [41] M. L. Steigerwald, L. E.Brus Acc.Chem res.23 (1990) 183.
- [42] « Optical Properties of Semiconductor Nanocrystals », S.V. Gaponenko, Cambridge University Press, Cambridge (1998).
- [43] Y. Kagaruma, Phys. Rev. B 38, 14, 9797 (1988).
- [44] C.et H. Ngô, Introduction à la physique des semi-conducteurs, P215, Dunod, 1998.
- [45] « Fundamentals of semiconductors physics and material properties », P. Yu, M. Cardona, 3 rd rev. and enlarged Ed. Berlin, New, York, Springer (2001).
- [46] Christophe BOURGOGNON, Thèse de Doctorat d'état, Université Joseph Fourier-Grenoble 1 (1999).

- [47] Y.Kayaunuma, Solid state comm.,59, 405 (1985).
- [48] Richard W .Siegel, Kluwer academic publishers, Dordrecht, Netherlands series E, applied science233, p 509(1994).
- [49] H.Wweller. Colloïdal semiconductor q-particles: chemistry in the transition between solid state and molecules,Angew.chem.int,Engl.32.41.(1993).
- [50] V.Albe, C.jouanin, D.Bertho, influence of II-VI- nanocrystals shapes on optical properties, journal of crystal growth 184-185, 388-392 (1998).
- [51] Pascal ANDRE, thèse de doctorat d'état, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI) (2001).
- [52] U.Woggon bo, Excitons in quantum dots. Phys.stat.sol(b), 189-285, (1995).
- [53] A. Chellouche, thèse de Magister, Université Mentouri , Algérie, (2001)
- [54] Claude.J.A.monty, "Nanomaterials :The state of the art ". CNRS/LEA Simap Font. Romeu, France p.1.13 (1994).
- [55] C. Louis, Synthèse et caractérisation de nanoparticules hybrides à coeur d'oxyde de gadolinium, Thesis, UCBL, Lyon I, (2004).
- [56] G. Cao, Nanostructures & Nanomaterials. Synthesis, properties & Applications. Imperial College Press (2004).
- [57] D. Bera, S.C. Kuiry, and S. Seal, 'Synthesis of nanostructured materials using templateassisted electrodeposition', Jom .56(1) 49–53 (2004).
- [58] AFSSET. Les nanomatériaux. Effets sur la santé de l'homme et sur l'environnement. Agence Française de Sécurité Sanitaire de l'Environnement et du Travail (2006).
- [59] C.J. Brinker, G.W Scherer., sol-gel sciences ,the physics and chemistry of sol- gel processing ,San Diego : Academic press, 1990.
- [60] J.P Boilot., F Chaput., Malier., Bruna ., Y.,Levy , J.-P ..Galup ..des hybrides organo-minéraux pour l'optiques ,images de la physique. 1998, p.44-51.
- [61] B Darracq., F. Chaput, K.Lahlil, J.P., Boilot , Y .Levy, V.Alain ,Ventelon L.Blanchard-M.Desc , l .Nove. photo refractive sol-gel materials ,Optical materials. 1998, Vol.9 n1-4 ,p.265-270.
- [62] D.B.Wolfe , J.C .Love, K.E. Paul, M.L.Chabynec, G.M.Whitesides,Fabrication of palladium-based microlctronic devices by microcontact printing,Appl.Phys.Letters.2002,vol 80, n 12,p.2222-2224.
- [63] Li B .Zhang, Z. Wang ,Cheng ., S .Dong ,functionalized inorganic –organic composite material derivated sol-gel for construction of mediated amperametric hydrogen peroxide biosensor. Analytica Chimica Acta. 1999. Vol.388, n 1-2, p. 71-78.
- [64] E. Dien - Elaboration par voie chimique et caractérisations physiques de films minces à base de matériaux ferroélectriques du type Ba1-xSrxTiO3 - *Th : Matériaux Céramiques et Traitements de Surface: Limoges : 1999.*
- [65] F. Hochepped, Introduction aux nanomatériaux. Ecole des Mines de Paris, Centre d'Energétique. 2000.
- [66] M.Graetzel, Coord. Chem Re. 111 (1991) 167.
- [67] P. V. Kamat, D. Meisel, C. R. Chem. 6 (2003) 999.

- [68] C.J. Murrphy, J. L. Coffey, *Appl. Micros.* 56 (2002) 1.
- [69] J.O. Winter, PHD Thesis, University of Texas (2004).
- [70] Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, G. Bastard; Les Editions de Physique, Les Ulis, (1988).
- [71] J. B. Xia, J. Li, *Phys. Rev. B.*, 60, 11540 (1999).
- [72] J. Li, J. B. Xia, *Phys. Rev. B.*, 62, 12613 (2000).
- [73] A. D. Yoffe, *Advances in Physics*, 42, 173 (1993).
- [74] D. D. Lovingood, R. E. Oyler, G. F. Strouse, *J. Am. Chem. Soc.*, 130, 17004 (2008).
- [75] L. E. Brus, *J. Chem. Phys.*, 79, 5566 (1983).
- [76] Brus, *J. Phys. Chem.*, 90, 2555 (1986).
- [77] N.H.M. Al Wadiy, N. Bourissa. *Physica Scripta*, pp 1-5, 2011.
- [78] S. Adachi, *Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Wiley, Chichester, 2005.
- [79] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [80] M.S. Al-Assiri, N. Bourarissa, *Superlattices and Microstructures* 59 (2013) 144–154
- [81] T.S. Moss, *Proc. Phys. Soc. B* 63 (1950) 167.
- [82] N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, *Infrared Phys.* 19 (1979) 603.
- [83] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715.
- [84] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [85] R.R. Reddy, S. Anjaneyulu, *Phys. Stat. Sol. (b)* 174 (1992) K91.
- [86] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [87] R.R. Reddy, Y.N. Ahammed, *Infrared Phys. Technol.* 36 (1995) 825.
- [88] Handbook series on Semiconductor parameters, Vol.2, M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds), World Scientific, Singapore, 1999.
- [89] D.W. palmer, www.semiconductors.C.O.U.K, 2008.03.



Tables des illustrations

(Figures et tableaux)

Liste des figures et des Tableaux

Figures :

Figure I-1) Evolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température.....	5
Figure I-2) Diagramme des bandes d'énergie des semiconducteurs.....	6
Figure I-3) Le gap d'énergie "bande interdite".....	7
Figure I-4) Structure des bandes d'énergie dans un isolant, un semiconducteur et un conducteur.....	7
Figure I-5) Le gap direct.....	8
Figure I-6) Le gap indirect.....	8
Figure I-7) Répartition des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence à la température T. (le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre des trous dans la bande de valence).....	10
Figure I-8) Représentation schématique de la substitution d'un atome d'Arsenic à un atome de silicium (exemple du dopage N avec la structure de bande énergétique relative.....	12
Figure I-9) Représentation schématique de la substitution d'un atome de bore à un atome de silicium (exemple du dopage P) avec la structure de bande énergétique relative.....	13
Figure I-10) Structure cristalline Diamant.....	14
Figure I-11) Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.....	14
Figure I-12) L'onde électromagnétique.....	16
Figure I-13) Le spectre électromagnétique.....	17
Figure I-14) Cellule photoconductrice.....	21
Figure I-15) Spectre d'émission des différents alliages.....	23
Figure II-1) domaine Du visible à l'invisible.....	26
Figure II-2) Densification des niveaux d'énergie en fonction de la taille.....	28
Figure II-3) Variation de l'énergie et de la densité d'états en fonction du degré de confinement.....	30
Figure II-4) énergies de l'électron (e) et du trou (h) dans un cristal massif (à gauche) et dans une boîte quantique ou un nanocristal (à droite).....	32
Figure II-5) largeurs homogènes et inhomogènes constituant une bande d'absorption en fonction de la longueur d'onde.....	34

Figure II-6) diagramme énergétique de la conservation des propriétés de confinement quantique d'un nano cristal dans une matrice.....	34
Figure II-7) Excitons de Wannier.....	36
Figure II-8) Exciton de Frenckel.....	36
Figure II-9) Images par MET des nanocristaux de CdSe (diamètre 3.6 nm), préparés par évaporation du solvant d'une solution colloïdal dans du toluène.....	39
Figure II-10) Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des Nanocristaux.....	40
Figure II-11) Illustration représentant les approches pour atteindre des nanostructures.....	42
Figure III-1) Variation de la bande interdite (gap) en fonction de la largeur du puit quantique pour GaAs.....	49
Figure III-2) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour InAs.....	50
Figure III-3) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour InP.....	50
Figure III-4) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour CdTe.....	51
Figure III-5) Variation de la bande interdite en fonction de la largeur de puits quantique pour ZnSe.....	51
Figure III-6) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour GaAs.....	52
Figure III-7) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour InAs.....	52
Figure III-8) Variation du gap énergétique d'InP en fonction de la largeur de puits quantique.....	53
Figure III-9) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour CdTe.....	53
Figure III-10) Variation du gap énergétique en fonction de la largeur de puits quantique pour ZnSe.....	54
Figure III-11) Variation d'Eg en fonction de paramètre de maille pour a=100 nm.....	56
Figure III-12) La Variation de Eg en fonction de paramètre de maille pour a=3nm.....	56
Figure III-13 (a)) Gap énergétique pour les semiconducteurs composés nanométrique en fonction de celui des semiconducteurs massifs pour a=3 nm.....	57

Figure III-13 (b)) Gap énergétique pour les semiconducteurs composés nanométrique en fonction de celui de semiconducteurs massif pour $a=100$ nm.....	57
Figure III-14) Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	59
Figure III-15) Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	61
Figure III-16) Variation de l'indice de réfraction de l'InAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	62
Figure III-17) Variation de l'indice de réfraction de l'InAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	63
Figure III-18) Variation de l'indice de réfraction de l'InP en fonction de la largeur de puits quantique.....	64
Figure III-19) Variation de l'indice de réfraction de l'InP en fonction de la largeur de puits quantique.....	65
Figure III-20) Variation de l'indice de réfraction de CdTe en fonction de la largeur de puits quantique.....	66
Figure III-21) Variation de l'indice de réfraction de CdTe en fonction de la largeur de puits quantique.....	66
Figure III-22) Variation de l'indice de réfraction de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique.....	67
Figure III-23) Variation de l'indice de réfraction de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique.....	68
Figure III-24) Variation de l'indice de réfraction en fonction du paramètre de maille pour $a=3$ nm.....	69
Figure III-25) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	70
Figure III-26) Variation du constant diélectrique de haute fréquence du GaAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	70
Figure III-27) Variation de la constante diélectriques de haute fréquence du InAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	71
Figure III-28) Variation de la constant diélectrique de haute fréquence de l'InAs en fonction de la largeur de puits quantique.....	72
Figure III-29) Variation de la constant diélectrique de haute fréquence du InP en fonction de la largeur de puits quantique.....	73

Figure III-30) Variation de la constant diélectrique de haute fréquence de l'InP en fonction de la largeur de puits quantique.....73

Figure III-31) la variation du constant diélectrique de haute fréquence du CdTe en fonction de la largeur de puits quantique.....74

Figure III-32) Variation du constant diélectrique de haute fréquence de CdTe en fonction de la largeur de puits quantique pour $1 \leq a \leq 10 \text{ nm}$75

Figure III-33) la variation de la constant diélectrique de haute fréquence de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique pour $3 \leq a \leq 100 \text{ nm}$75

Figure III-34) Variation de constante diélectrique de haute fréquence de ZnSe en fonction de la largeur de puits quantique pour $1 \leq a \leq 10 \text{ nm}$76

Figure III-35) Echelle de variation de ϵ_{∞} en fonction de paramètre de maille pour $a=3\text{nm}$77

Tableaux :

Tableau I-1) constantes diélectriques statique et optique de quelques matériaux semiconducteurs à 300 K° 20

Tableau III-1) Gaps d'énergie et les masses effectives des électrons et trous et les constants diélectrique effective des composé binaires.....48

Tableau III-2) calcul des indice de réfraction de semiconducteur étudié pour ($a=100\text{nm}$), comparée aux donnée expérimentale.....60

Effet de confinement quantique sur la structure de bande des semiconducteurs à puits quantiques

ملخص:

أن الهدف من هذا العمل هو دراسة تأثير الحجز الكمومي على عصابة الطاقة لأشباه الموصلات المركبة في السلم النانو متري في حالة البئر الكمومي, لقد تمت دراسة هذا التأثير على الخواص الالكترونية و الضوئية لأشباه الموصلات الثنائية حيث استعملنا فيها طريقة الكتلة الفعالة التي مكنتنا من حساب بعض المعايير الفيزيائية. بينت نتائجنا بأن الخواص المدروسة تتغير بشكل ملحوظ عند المرور من اشباه الموصلات الحجمية الى اشباه الموصلات النانوية مما يجعل الأخيرة لها تطبيقات هامة جدا في مجال التكنولوجيا المستقبلية .

الكلمات المفتاحية: الحجز الكمومي - عصابات الطاقة- أشباه الموصلات - بئر كمومي.

Abstract:

The present work deals with the investigation of the quantum confinement effect on the band structure of quantum well semiconductors, namely GaAs, InAs, InP, CdTe and ZnTe. The calculations have been made using the effective mass method. Our results showed that when one proceeds from bulk to nanostructured materials of interest, the electric and optical properties change significantly suggesting thus that nanometerils may give sure diver opportunities for obtaining new materials with new fundamental properties.

Keywords: Quantum confinement; Band structure; Semiconductors, Quantum wells.

Résumé:

Notre travail consiste à l'étude de l'effet de confinement quantique sur la structure de bande des semiconducteurs à puits quantiques a savoir GaAs, InAs, InP, CdTe, ZnSe, Nous examinons cette effet sur les propriété électronique et optique lorsque on passe du massif à l'échelle nanométrique, nous avons utiliser dans nos calculs la méthode de masse effective.

Nos résultats montrant que lors du passage du massif au nanostructure, un important changement peut être observer sur les propriétés électronique et optique suggèrent ainsi que les nanomatériaux peuvent offrir plus d'opportunité pur obtenir des nouveaux matériaux avec des nouvelles propriétés fondamentales.

Mots Clés : Confinement quantique, Structure de bande, Semiconducteur, Puits quantique.