

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

FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° : PhAPP 02/2019



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : Physique Appliquée

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique

Réalisé par: Wahiba Baghdadi

Intitulé

**Structure de bandes électroniques et propriétés  
dérivées des quasi-binaires  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$**

**Soutenu le 4 /07 /2019 devant le jury composé de:**

N. Bouarissa	Université Mohamed Boudiaf- M'sila	Président
F. Mezrag	Université Mohamed Boudiaf- M'sila	Rapporteur
S. Saib	Université Mohamed Boudiaf- M'sila	Examinatrice
Dr N.-E .H. Fares	Université B.B.A	Invitée

**Année universitaire : 2018/2019**

**Remerciements**

*Je commence par le remerciement du bon "DIEU" pour la santé, la volonté et la Patience qui m'a donné pour accomplir ce modeste travail.*

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

*Je tiens à remercier, le président de jury, Professeur **Nadir Bouarissa** et l'examineur Mme **Saïb Salima**, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail.*

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

*Je voue une immense gratitude à toute ma famille pour le soutien qu'elle m'a apporté pendant toutes ces années, en particulier mes très chers parents.*

*Je remercie enfin tous mes amis(es) et tous ceux et celles qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.*

# *Dédicace*

Je dédie ce modeste travail à:

*Mes beaux-parents: **Houcine et Elgeia Zabi***

*Je ne pourrais jamais exprimer le respect que j'ai pour vous. Vos prières, vos encouragements et votre soutien m'ont toujours été d'un grand secours. Puisse dieu, le tout puissant vous préserver du mal, vous combler de santé, de Bonheur et vous procurer une longue vie.*

*A mes beaux-frères et soeurs :**Ismail, djamal, Amina et Souhaila***

*Une dédicace special pour le plus cher a mon Coeur et ma vie **Zabi Massoud***

*A mes cher cousins : **soumia, Afaf** et ma belle tante **Zoulika***

*A mes amis : **sekhriya, Nour, Smah, Souad, Halima, khalissa***

<b>Tables des matières</b>	
Remerciement.....	i
Dédicace.....	ii
Tables des matières.....	iii
Introduction Générale.....	1
Chapitre I : notion fondamentals sur la physique des semi conducteur et leurs alliage	
I.1. Introduction .....	4
I.2. Définition d'un semi-conducteur .....	5
I.3. la notion de band d'énergie dans un semi-conducteurs .....	5
I.3.1. Bande interdite (gap énergétique).....	6
I.3.2. Gap direct et gap indirect.....	7
I.3.2.a. Les semi-conducteurs à gap direct .....	7
I.3.2.b. Les semi-conducteurs à gap indirect .....	7
I-4 Différentes types des semi-conducteurs.....	8
I.4.1 Semi-conducteur intrinsèque.....	8
I.4.2. Les semi-conducteurs extrinsèques.....	8
I.5. Le dopage des semi conducteur .....	9
I.5.1. Semi-conducteur de type N.....	9
I.5.2. Les semiconducteurs extrinsèques dopés P.....	9
I.6.Conclusion.....	10
Références bibliographiques citées dans le chapitre I.....	11
Chapitre II: la théorie des bandes d'énergie et des alliages semiconducteurs	
II.1.Introduction.....	12
II.2. les composes binaires.....	12
II.3. Les alliages semi-conducteurs.....	13
II.3.1. Classification des alliages semi-conducteurs.....	13
II.4. L'approximation du cristal virtuel (V.C.A).....	14
II.4.1. Le cas d'un alliage ternaire.....	15
II.4.1.a. Le paramètre de maille des alliages ternaire.....	15
II.5. L'Hamiltonien du cristal.....	15
II.5.1. L'Hamiltonien total du cristal.....	16

II.6. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).....	17
II.6.1. Le cas d'un alliage quaternaire.....	17
II.6.1.1. Constante du réseau de l'alliage quaternaire.....	18
II.7. Les modèles du pseudopotentiel.....	18
II.7.1. le pseudopotentiel local (EPM local).....	18
II.8. Les alliages quasi-binaires.....	20
II.9. Conclusion.....	20
Références bibliographiques citées dans le chapitre II .....	21
Chapiter III: les proprietes physiques des semicondcteur	
III.1. Introduction.....	22
III.2. Propriétés électroniques.....	22
III.2.1. Structure de bande d'énergie électronique.....	23
III.3. Les propriétés structurales des semiconducteurs.....	24
III.3.1. Les semiconducteurs cristallins.....	25
III.3.2. La constante de maille.....	26
III.4. Propriétés optique.....	29
III.4.1. Interaction électron - photon (Transition radiative).....	29
III.4.2. Interaction rayonnement matière.....	30
III.4.2.1. Absorption fondamentale.....	30
III.4.2.2. Emission spontanée.....	31
III.4.2.3 Emission stimulée.....	32
III.4.3 Les transitions directes et indirectes.....	32
III.4.4. L'indice de refraction.....	33
III.5. Propriétés diélectriques.....	34
III.5.1. La constante diélectrique statique et de hautes fréquences .....	35
III.6. Conclusion.....	36
Références bibliographiques citées dans le chapitre III .....	37
Chapitre IV: Résultats et discussions	
IV.1. Introduction.....	38
IV.2. Étude des propriétés électroniques.....	38
IV.2.1. L'alliage quasi-binair $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	39
IV.2.2. Structure de bandes d'énergie.....	39
IV.2.3. Gap énergétique de quasi-binair $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	42
IV.3. Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction) .....	47
IV.4. Etude des propriétés diélectriques.....	52
IV.4.1. La constante diélectrique de haute fréquence.....	52
IV.4.2. La constante diélectrique statique .....	54

IV.5.Conclusion.....	57
Références bibliographiques citées dans le chapitre IV.....	58
<b>CONCLUSION GENERALE.....</b>	<b>59</b>
ABSTRACT	
LISTE DES FIGURES ET TABLEAUX	

<b>Figures :</b>	
<b>Fig.I.1.</b> La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux.....	4
<b>Fig.I.2.</b> Les groupes des semiconducteurs.....	5
<b>Fig. I.3</b> Structure des bandes d'énergie dans un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.....	6
<b>Fig 1.4 :</b> gap directe et gap indirecte.....	8
<b>Fig.I.5 :</b> Semi-conducteur intrinsèque.....	8
<b>Fig.I.6.</b> Les semiconducteurs extrinsèques type N( exemple silisium dope n).....	9
<b>Fig.I.7.</b> Les semiconducteurs extrinsèques dopés P( exemple silisium dope p).....	10
<b>Fig. II.1. :</b> La fonction d'onde et le potentiel.....	20
<b>Fig.III.1.</b> Structure de bande de GaAs.....	23
<b>Fig.III.2.</b> La relation entre la structure cristalline et la structure de bandes des matériaux semiconducteurs.....	24
<b>Fig.III.3.</b> Structure cristalline Diamant et Zinc Blende.....	25
<b>Fig.III.4.</b> La maille élémentaire.....	25
<b>Fig.III.5:</b> les processus d'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur.....	28
<b>Fig.III.6.</b> L'absorption fondamentale de la lumière par les porteurs.....	29
<b>Fig.III.7.</b> Les différents types L'émission spontanée.....	30
<b>Fig.III.8.</b> L'émission stimulée.....	30
<b>Fig.III.9.</b> Transition à gap indirect (Si).....	31
<b>Fig.III.10.</b> Transition à gap direct (GaAs).....	31
<b>Fig.III.11.</b> L'indice de réfraction d'un matériau.....	32
<b>Fig III.12.</b> L'effet d'un champ électrique à l'échelle à microscopique .....	33
<b>Fig IV-1:</b> La structure de bandes électroniques pour $x=0$ .....	38
<b>Fig IV-2:</b> La structure de bandes électroniques pour $x=0.3$ .....	38
<b>Fig IV-3:</b> La structure de bandes électroniques pour $x=0.5$ .....	39
<b>Fig.IV.4:</b> La structure de bandes électroniques pour $x=0.7$ .....	39
<b>Fig.IV.5:</b> La structure de bandes électroniques pour $x=1$ .....	40

<b>FigIV-6)</b> La variation du gap fondamental $E_F^\Gamma$ en fonction de la composition x de l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	42
<b>Fig.IV.7.</b> La variation du gap $E_F^X$ en fonction de la composition x de l'alliag $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	43
<b>Fig.IV.8.</b> La variation du gap $E_F^L$ en fonction de la composition x de l'alliag $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	44
<b>Fig.IV.9.</b> La variation du gap direct $E_F^\Gamma$ et des gaps indirects( $E_F^X$ ), ( $E_F^L$ ) en fonction de la composition x de l'alliage semi-conducteur $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	45
<b>Fig.IV.10.</b> La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la composition x de l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ des six modèles.....	48
<b>Fig.IV.11.</b> La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x, calculé par les différentes relations .....	49
<b>Fig.IV.12.</b> La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ des six modèles.....	51
<b>Fig.IV.13.</b> La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	54
<b>Fig.IV.14.</b> La variation des constant diélectrique statique et de haute fréquence de l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ en fonction de la composition x de modèle Herve et Vandamme .....	55
<b>Tableaux</b>	
<b>Tableau I-1)</b> Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique.....	7
<b>Tableau II-1)</b> Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K .....	13
<b>Tableau III-1)</b> Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs III-V .....	26
<b>Tableau III-2)</b> Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs IV-IV.....	26
<b>Tableau III-3)</b> Le paramètre de maille et la structure cristalline des quelques Semiconducteurs II-VI.....	27
<b>Tableau III-4)</b> L'indice de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs à T=300k.....	32
<b>Tableau III -5)</b> La constante diélectrique statique et optique de quelques matériaux semi-conducteurs à 300k.....	34

<b>Tableau VI-1)</b> Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés CdTe et InSb et les Paramètres De réseau.....	37
<b>Tableau IV-2)</b> Les variations des gaps énergétique de l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	41
<b>Tableau IV-3)</b> Calcul des indices de réfraction de l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ en fonction de la composition x.....	47
<b>Tableau IV-4)</b> La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ à partir des différents modèle.....	50
<b>Tableau IV-5)</b> La variation de la constante diélectrique statique $\epsilon_0$ en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ .....	53

## Introduction générale

Parmi tous les matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe importante, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux,

Les composés semi-conducteurs sont considérés comme une classe bien définie des matériaux et cela grâce à la richesse de leur propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectroniques. [2]

Ils sont au cœur de nombreuses technologies électroniques de pointe qui façonnent les réseaux du futur. Ces matériaux semiconducteurs utilisés présentent des caractéristiques fixes, qu'elles répondent aux besoins ou non. Pour avoir plus de liberté dans les propriétés, l'emploi des alliages semiconducteurs s'avère une solution miracle. En mélangeant les éléments entre eux, nous pouvons fabriquer tout type d'alliages, des binaires, des ternaires, des quaternaires, des pentaires et même des quasi binaires, tout dépend des propriétés que nous voulons obtenir.

Ainsi les propriétés des alliages s'étendent sur un intervalle de valeurs de la composition  $x$  allant du premier composé jusqu'au deuxième, permettant ainsi, un choix de roi des paramètres voulus selon l'application donnée.[1]

Dans la théorie des alliages, plus le nombre de composés utilisés est grand plus on élargit l'éventail d'ajustement des paramètres mais en parallèle, on voit croître la complexité des modèles qui les régissent. Pour garder le plus grand nombre de composés tout en bénéficiant de la simplicité des binaires, une nouvelle classe a été explorée c'est celle des quasi binaires, un mélange ouvrant plus de liberté dans le choix des propriétés en mixant différentes classes, profitant des avantages des uns et palliant les inconvénients des autres. Ainsi le monde des matériaux semiconducteurs est toujours en expansion et ne cesse de modifier et de se diversifier contrôlé par un marché hautement concurrentiel et sans cesse en mutation, tout ceci exige un suivi et un développement continu des connaissances à la fois sur la structure des matériaux et sur les relations entre cette structure et les propriétés d'emploi.[1]

Notre travail se base sur la méthode du pseudo-potentiel empirique local couplée avec l'approximation du cristal virtuel VCA. Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électronique, diélectrique et optique des solides.

Pour développer toutes ces notions dans ce mémoire, nous avons suivi un plan présentant quatre chapitres, débuté par une introduction générale exposant toutes les données associées au sujet étudié tout en dévoilant les failles existantes pour en procurer une solution à débattre.

Après une introduction générale, dans le premier chapitre nous essayerons de donner quelques généralités sur les matériaux semi-conducteurs et leurs alliages.

Dans le deuxième chapitre sera présentée la théorie des alliages semi-conducteurs et la méthode du pseudo-potentiel.

Le troisième chapitre englobe un rappel des principales propriétés physiques des semi-conducteurs, notamment, les propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs.

Enfin nous présentons au dernier chapitre les résultats obtenus dans cette étude et leurs interprétations et leur comparaison aux travaux théoriques et expérimentaux. Finalement, nous terminerons par une conclusion générale.

## **Références bibliographiques citées dans l'introduction générale**

[1] KARA MOHAMED Wahiba, Thèse de doctorat Univ Mohamed Khider Biskra (2012).

[2] Benatmane Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V. Mémoire de magister. Université de Batna, (2011).

# **Chapitre I**

## **Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs et leurs alliages**

## Chapitre I: Notions fondamentales sur la physique des semiconducteurs et leurs alliages

### I .Introduction

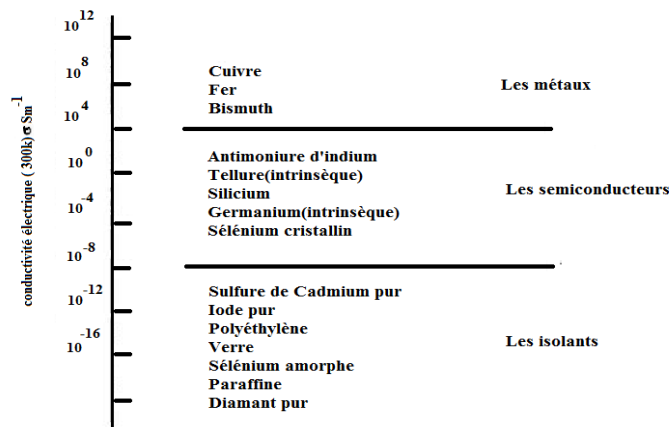
Les matériaux sont présentés dans de multiples domaines et prennent une place plus importante dans le système que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour. Ils sont subdivisés en trois classes: Conducteurs, semiconducteurs et isolants.

Les trois types des matériaux contiennent une bande basse en énergie appelée bande de valence (BV) et une bande haute d'énergie appelée bande de conduction (BC), la différence entre les trois types des matériaux est la distance qui sépare la bande de valence de la bande de conduction ou ce qu'on appelle la bande interdite.

Les matériaux semiconducteurs sont actuellement très importants et peuvent être utilisés dans la fabrication des dispositifs électroniques les plus modernes.

Ainsi, toute étude complète et approfondie de ces matériaux dans le but de comprendre leur comportement électrique devrait commencer par la structure atomique du matériau et son objectif est d'identifier les modèles atomiques les plus importants.

Dans ce chapitre nous allons donner une définition de semiconducteur et la notion de bandes d'énergie, ainsi que le gap énergétique, puis les différents types de semiconducteurs et leur structure cristalline et nous terminerons par une conclusion.



**Fig.I.1.** La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux.

### I-2 Définition d'un semiconducteur

Les semiconducteurs sont donc des matériaux dont la Conductivité est intermédiaire entre celles des isolants et des conducteurs. 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).[1]

III- V				
Groupe II	Groupe III	Groupe IV	Groupe V	Groupe VI
	B	C	N	O
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te
Hg	Ti	II- VI		

**Fig.I.2.** Les groupes des semiconducteurs

### I-3 La notion de band d'énergie dans un semiconducteur

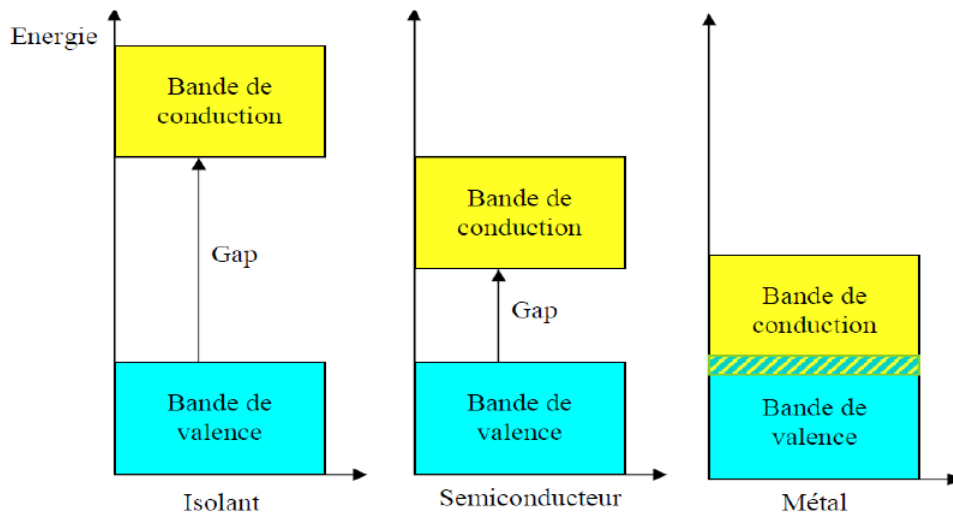
Le comportement électrique des semiconducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes qui est un modèle quantique en physique des solides, déterminant les énergies permises des électrons dans un solide et permet de comprendre la notion de conductivité électrique, Cette théorie est issue de la théorie des orbitales moléculaires.

Dans ce modèle les énergies possibles pour un électron dans un solide forment ce qu'on appelle des bandes permises, séparées par d'autres bandes appelées bandes d'énergies interdites ou gap. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

Les bandes de faible énergie sont complètement occupées; ce sont des bandes dites de valence, par contre les bandes de haute énergie sont vides ; sont appelées bandes de conduction [2].

Un matériau semiconducteur se caractérise par sa structure de bande :

- ✓ La bande de valence: c'est la bande qui correspond à la bande d'énergie la plus élevée entièrement remplie d'électrons.
- ✓ La bande de conduction: est définie comme le premier niveau énergétique au-dessus de la bande de valence où accèdent les électrons excités.
- ✓ La bande interdite: cette bande représente l'énergie qu'il faut fournir à un électron pour qu'il passe de la bande de valence à la bande de conduction.



**Fig. I.3.** Structure des bandes d'énergie dans un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.

### I-3-1 Bande interdite (gap énergétique)

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

L'énergie de bande interdite correspond à la différence entre le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence, c'est à dire:[3]

$$E_g = E_c - E_v \quad (\text{I.1})$$

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction.

Alors que pour les semi-conducteurs, cette bande est suffisamment petite pour qu'une excitation adéquate, permette aux électrons de la bande de valence de rejoindre la bande de conduction.

Ainsi le semi-conducteur peut transporter de l'électricité et donc devenir conducteur. Par contre dans les métaux, on rencontre un chevauchement des bandes, les électrons peuvent passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circulent dans tout le solide [4].

Le tableau suivant présente quelques exemples de largeur de bande interdite ainsi que la distance interatomique.

**Tableau I-1)** Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique.

Atom	$E_g$ (eV)	Type de matériau	$d(\text{Å})$
C(Carbone)	5.5	Conducteur	3.567
Si(Silicium)	1.12	Semiconducteur	5.431
Ge(Germanium)	0.7	Semiconducteur	5.646
Sn(étain)	0	Isolant	6.489

### I-3-2 Gap direct et gap indirect

Pour un cristal semiconducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie  $E$  et un vecteur d'onde  $k$ .

Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [5].

#### I-3-2-a Les semi-conducteurs à gap direct :

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde  $k$  le semiconducteur est dite à gap direct

#### I-3-2-b Les semi-conducteurs à gap indirect :

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde  $k$  le semiconducteur est dite à gap indirect.

La distinction entre les semi-conducteur à gap direct et indirect est très importante, notamment, dans les processus radiatifs, les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [6]

Les structures de bandes représentées sur la figure (I-4) font apparaitre deux types fondamentaux de semi-conducteurs :

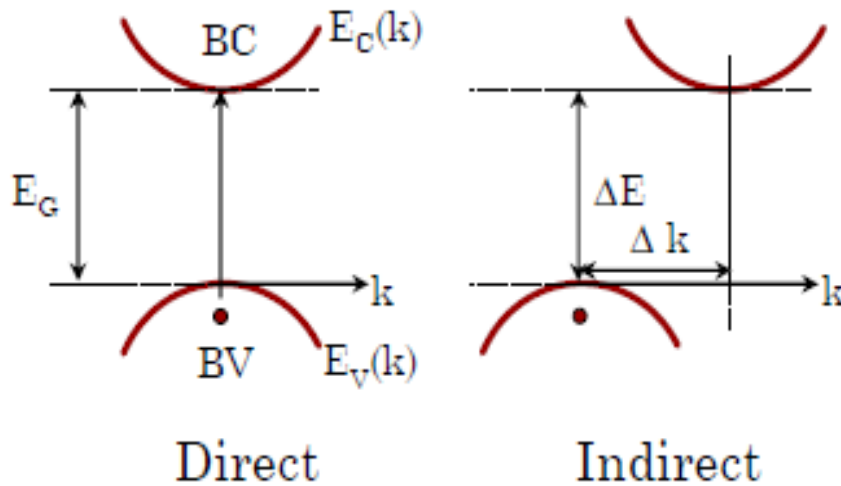


Fig 1.4 : Gap directe et gap indirect

**I-4 Différentes types des semi-conducteurs**

**I-4-1 Semi-conducteur intrinsèque :**

Un semi-conducteur dit intrinsèque est un matériau idéal ne possédant ni défaut physique ni défaut chimique .

Dans un semi-conducteur intrinsèque la concentration des électrons est identique à la concentration des trous.[4]

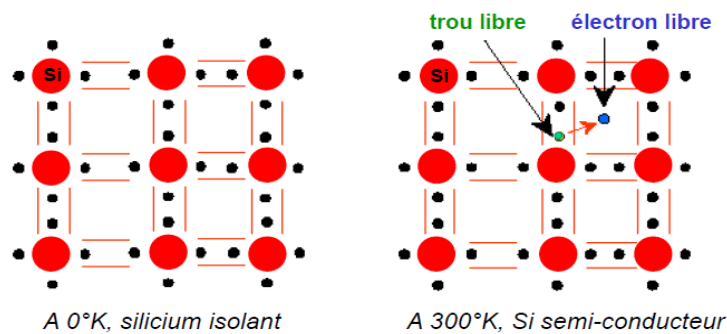


Fig.I.5 : Semi-conducteur intrinsèque

**I.4.2. Les semi-conducteurs extrinsèques:**

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

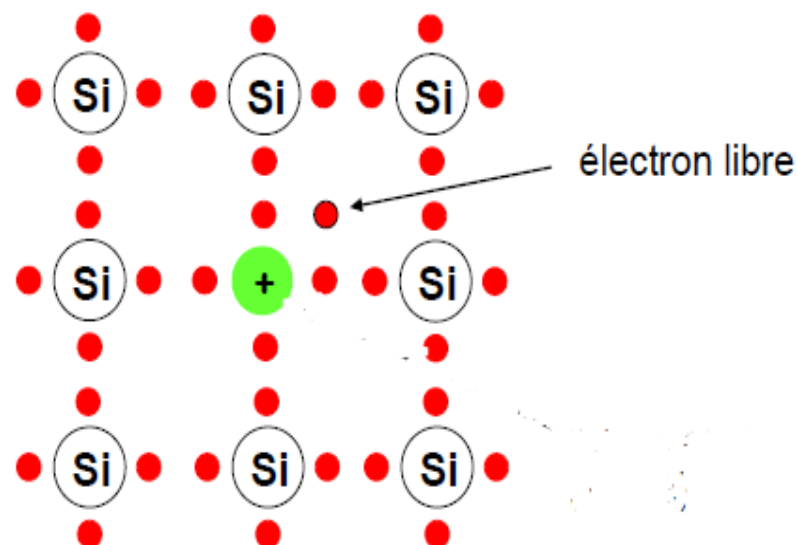
## I.5. Le dopage des semi conducteur

### I.5.1. Semi-conducteur de type N:

En introduisant des atomes pentavalents tels que le phosphore P, l'arsenic As (dopage N) dans un cristal, certaines liaisons se casent laissant place à ces extra atomes qui ont cinq électrons de valence, ce qui comble les liaisons en laissant un électron libre dans le cristal peu lié au noyau et passe aisément dans la bande de conduction.[7]

Les atomes pentavalents ou donneurs deviennent des ions positifs après le passage des électrons excédentaires dans la bande de conduction.

Ce ci qui augmente considérablement la conductivité du matériau dopé. Les charges négatives (électrons) sont dits majoritaires, comme on peut le voir dans la figure suivante.



**Fig.I.6.** Les semiconducteurs extrinsèques type N ( exemple Cilisium dopé n).

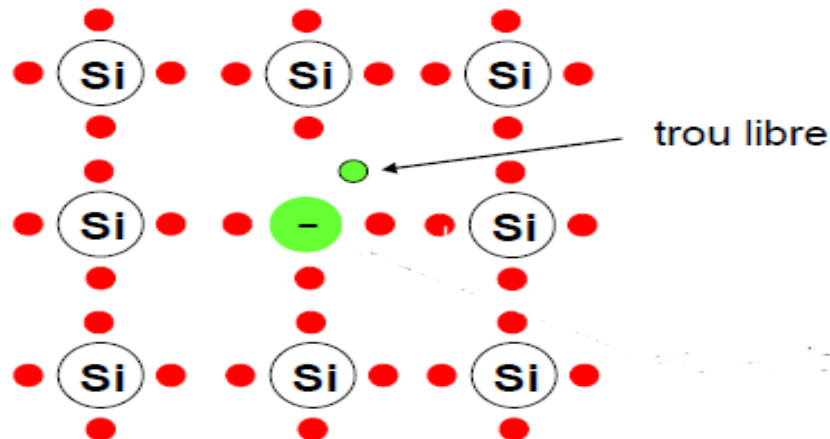
### I.5.2. Les semiconducteurs extrinsèques dopés P

Dans ce cas on introduit des atomes trivalents tels que gallium Ga, l'indium In, le bore B, l'aluminium Al. Il manque, alors, à l'impureté un électron de valence pour assurer les 4 liaisons avec les atomes de silicium voisins.

Un faible apport d'énergie (0.05eV) suffit pour qu'un électron d'un silicium voisin soit capté par l'impureté : il y a formation d'un trou peu lié et donc mobile.

Les atomes trivalents (accepteurs) deviennent des ions négatifs par capture d'un électron. Compte tenu des taux de dopage, ces trous sont beaucoup plus nombreux que les porteurs intrinsèques du cristal pur.

La conduction extrinsèque de type P (positive) augmente et est assurée par des trous, les trous deviennent majoritaires. La figure ci-dessous explique clairement le phénomène.



**Fig.I.7.** Les semiconducteurs extrinsèques dopés p ( exemple silicium dope p)

### I-6 Conclusion:

La réalisation de dispositifs adaptés aux exigences repose sur les atouts des domaines étendus de la variation de la composition chimique. L'avenir des matériaux semiconducteurs se voit très prometteur et on est dans l'axe de la fabrication de petits dispositifs plus puissants et plus rentables, vers une technologie plus rapide, plus efficace et en plus moins chère, c'est la nanotechnologie de l'avenir.

**Références bibliographiques citées dans le chapitre I :**

- [1]. louazani ahmed, Mémoire de de Master, Université Dr. Tahar Moulay de Saida
- [2]. C. Ng-Hélène Ng, physique des semi-conducteur, 3 Ed.Dunod, (2007).
- [3] N. Le Sech, "Photocathodes à base de nanotubes de carbone sur substrats semi-conducteurs de type III-V Application aux amplificateurs hyperfréquence", Thèse doctorat, école polytechnique, 2010.
- [4]. C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod université (1983).
- [5]. B.N. Brahmi, Thèse Doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013).
- [6]. A. Aouina, Mémoire de Magister en physique, Univ Mentouri Constantine.
- [7]. Michel Sauzade, " Introduction à l'électronique analogique " , Paris sud, 1995

**Chapitre II**  
**la théorie des bandes d'énergie et des alliages**  
**semiconducteurs**

## Chapitre II La théorie des bandes d'énergie et des alliages semiconducteurs

### II.1. Introduction

Les alliages semiconducteurs, avec la richesse de leurs structures électroniques et autres propriétés, ont trouvé une large application dans les dispositifs optiques et électroniques. La littérature sur les propriétés fondamentales de ces matériaux a rapidement augmenté. Ces dernières décennies, beaucoup de progrès et de découvertes majeures ont été réalisés. Cependant, étant devant une difficulté majeure pour traiter le désordre dans ces matériaux, la théorie des alliages semiconducteurs prendra probablement une autre décennie pour être au même niveau de maturité que la théorie actuelle des cristaux semiconducteurs.

Par alliage, on entend un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux. Il fut un temps où le mot alliage était uniquement réservé aux métaux, pourtant cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux, notamment la céramique et les polymères.

Peu après le développement des techniques modernes de la croissance cristalline et la purification des semi-conducteurs, il a été réalisé plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires. L'utilisation de ces derniers dans les domaines de la microélectronique et l'optoélectronique a encouragé les chercheurs à développer le côté théorique ainsi que l'expérimental. [1]

### II.2. les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée.

Les composés contenant du Bore, de l'Aluminium ou de l'Azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces .

A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le Thalium ou le Bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium ( InP, InAs,InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes.[2]

**Tableau II-1)** Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K

Composés III-V	Eg (eV)	$m^*/m_0$	a(A°)
BN	7.5		3,6150
AlP	2.45		5,4510
AlAs	2,16		5,6605
AlSb	1.58	0,12	6,1355
BP	2.00		4,5380
GaN	2.36	0,19	a=3,189 (b=5,185)
GaP	2.26	0,82	5,4512
GaAs	1.42	0,067	5,6533
GaSb	0.72	0,042	6,0959
InP	1.35	0,077	5,8686
InAs	0.36	0,023	6,0584
InSb	0.17	0,0145	6,4794

### II.3. Les alliages semiconducteurs

Une mention particulière est donnée aux alliages semi-conducteurs, vu leur application dans le domaine de l'optoélectronique. L'élaboration de ces alliages se fait à partir du composé binaire dont en fait varié leur composition, ils peuvent être binaires, ternaires, quaternaires suivant qu'ils renferment deux, trois, quatre éléments respectivement [3].

#### III.3.1. Classification des alliages semi-conducteurs

Les alliages semiconducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant le nombre de constituants [4]:

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

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

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

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

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

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

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

$A^I B^{VI}$ : CuS, CuO, Cu<sub>2</sub>O ...

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

- Alliage ternaire anionique :  $A^N B_x^{8-N} C_{1-x}^{8-N}$ .

- Alliage ternaire cationique:  $A_x^N B_{1-x}^N C^{8-N}$ .

Ces alliages sont caractérisés par la présence du coefficient stœchiométrique x. Cependant, il existe également un autre type d'alliages semi-conducteurs : il s'agit des matériaux "quaternaires". Ce type d'alliages semi-conducteurs fait intervenir quatre composés binaires et sont caractérisés par la présence de deux coefficients stœchiométriques x et y.

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

Ces alliages peuvent être divisés en deux classes [5,6] :

- Les solutions quadratiques : ces alliages ont la forme  $A_{1-x}^N B_x^N C_y^{8-N} D_{1-y}^{8-N}$ .

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

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

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

#### II.4. L'approximation du cristal virtuel (V.C.A)

Cette approche est la plus utilisée pour sa simplicité d'application tout en Assurant des résultats s'accordant aux données expérimentales.

La V.C.A considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique monoatomique (virtuel) avec un potentiel atomique moyen.

Le semi-conducteur est supposé macroscopiquement uniforme, cependant, les fluctuations microscopiques de la composition  $A_xB_{1-x}$  sont inévitables. Le potentiel microscopique est donné par [7] :

$$V(r) = \sum_R [(1 - \theta_R)VA(r - R) + \theta_RVB(r - R)] \quad (\text{II -1})$$

#### II.4.1. Le cas d'un alliage ternaire

Dans le cas d'un alliage ternaire  $A_x^{\text{III}}B_{1-x}^{\text{III}}C^{\text{V}}$ , même en supposant le cristal parfait, le désordre peut être dû à la différence des potentiels intrinsèques des atomes A et B qui se substituent mutuellement sur les sites correspondant aux atomes du groupe III dans la blende [8].

Cet alliage est composé des molécules AC avec une fraction molaire (1-x) et des molécules BC avec une fraction molaire (x).

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter cette alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [9].

##### II.4.1.a. Le paramètre de maille des alliages ternaire

Les travaux expérimentaux montrent que la constante du réseau du ternaire obéit à la loi de Vegard à l'exception de certains alliages où des très petites déviations ont été observées.[10]

La constante du réseau « a » est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires (AC et BC) qui forment l'alliage.

Le paramètre de réseau donné par la loi de Vegard [11] :

$$a(x)_{A_xB_{1-x}C} = x a_{AC} + (1 - x)a_{BC} \quad (\text{II-2})$$

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

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

x est la concentration molaire

#### II.5. L'Hamiltonien du cristal

Un cristal est constitué de particules, ions et électrons interagissant entre eux par des forces électrostatiques attractives ou répulsives donnant naissance à ce qu'on appelle l'Hamiltonien du cristal s'écrivant comme suit :

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

Avec :

- $T_e$  l'énergie cinétique des électrons,
- $T_n$  l'énergie cinétique des noyaux,
- $V_{ee}$  l'énergie de répulsion électron - électron,
- $V_{en}$  l'énergie d'attraction électron - noyau
- $V_{nn}$  l'énergie de répulsion noyau - noyau

La résolution de l'équation de Schrödinger avec cet Hamiltonien total du cristal ne se fait qu'avec certaines approximations.

### II.5.1. L'Hamiltonien total du cristal

La méthode EPM, couplée à l'approximation du cristal VCA, permet d'écrire l'Hamiltonien du cristal sous la forme suivante :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta V^P(r) \quad (\text{II.4})$$

Avec:

$$V^P(r) = V_{VCA}(r) + V_{dés}(r)$$

$V^P(r)$  : Le potentiel du cristal

$V_{VCA}(r)$ : Le potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}(r)$ : Le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel

Ce potentiel du désordre  $V_{dés}$  s'écrit d'après Baldereschi et Maschke comme suit:

$$V_{dés}(r) = \sum_{J_{AC}} \Delta(r - R_j) - x \sum_{J_{BC}} \Delta(r - R_j) \quad (\text{II.5})$$

Où :

$$\Delta(r) = V_{BC}(r) - V_{AC}(r) \quad (\text{II.6})$$

$j_{BC}$  et  $j_{AC}$  indiquent que la sommation est sur les sites des molécules BC et AC respectivement.

La VCA considère les approximations suivantes :

$$\sum_{J_{BC}} \Delta(r - R_j) = x \sum_j \Delta(r - R_j)$$

Et (II.7)

$$\sum_{J_{AC}} \Delta(r - R_j) = x \sum_j \Delta(r - R_j)$$

Alors, si on considère ces approximations, le potentiel dû au désordre  $V_{dés}(r)$  devient nul ce qui explique que l'effet du désordre n'est pas pris en considération dans cette approche et par conséquent on obtient un désaccord entre les résultats calculés et ceux de l'expérience.[9]

## II.6. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)

Dans les années soixante-dix, Baldereschi et Maschke ont traité l'effet du désordre compositionnel comme une perturbation mais restant toujours incapable d'expliquer le paramètre de courbure [12]. Les efforts requis pour cette méthode sont importants rendant son application assez difficile. Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel dû au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système devient [13] :

$$V(r) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (II.8)$$

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

Où :

$V_{VCA}$  le potentiel périodique du cristal virtuel.

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

### II.6.1. Le cas d'un alliage quaternaire

Les alliages quaternaires sont d'intérêt particulier dans la technique actuel à cause de l'avantage qu'il offrent pour la conception des dispositifs aux propriétés souhaitées, ils ajoutent un degré de liberté du gap énergétique, couvrant ainsi, une gamme de longueur d'onde.

Ces alliages quaternaires sont de la forme,  $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$  composé de quatre binaires AC, BC, AD et BD est caractérisé par la présence de deux coefficients stœchiométriques  $x$  et  $y$ , permettant d'ajuster de façon indépendante les propriétés physiques de l'alliage quaternaire, en utilisant les propriétés physiques de ses composés binaires en particulier son potentiel et son paramètre de maille. La propriété physique  $F(x, y)$  de ce type d'alliage est calculé par une interpolation linéaire des paramètres de ses composés binaires :

$$F_{ABCD}(x, y) = xyF_{AC} + (1-x)yF_{BC} + x(1-y)F_{AD} + (1-x)(1-y)F_{BD} \quad (II-10)$$

### II.6.1.1 Constante du réseau de l'alliage quaternaire $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$

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

$$a_{\text{alliage}} = xy a_{AC} + (1-x)y a_{BC} + x(1-y) a_{AD} + (1-x)(1-y) a_{BD} \quad (\text{II-11})$$

$a_{AC}, a_{BC}, a_{AD}, a_{BD}$  sont les constantes des réseaux des composés binaires formant l'alliage quaternaire [14].

### II.7. Les modèles du pseudopotentiel:

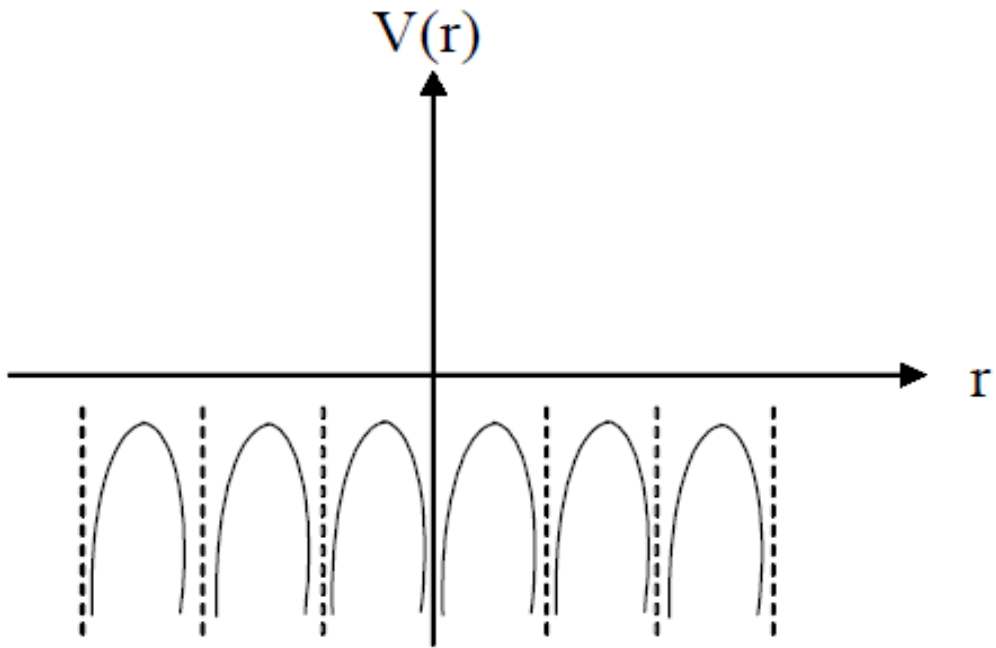
La théorie du pseudopotentiel a été mise au point par Herring en 1940 [15], qui a montré que le cœur n'a aucun effet sur les électrons de valence. Il déduit ensuite que l'énergie totale de l'électron dans le cœur était presque nulle d'une part et, d'autre part, la taille du cœur avait peu d'influence sur l'énergie des électrons de valence. Le pseudopotentiel a une large application comme une méthode du calcul pour obtenir la structure de bandes d'un cristal. Ce qui fait que des modèles et des potentiels empiriques furent utilisés pour «ajuster» les propriétés observées et résoudre ensuite l'équation de Schrödinger [16].

Il existe deux modèles du pseudopotentiel:

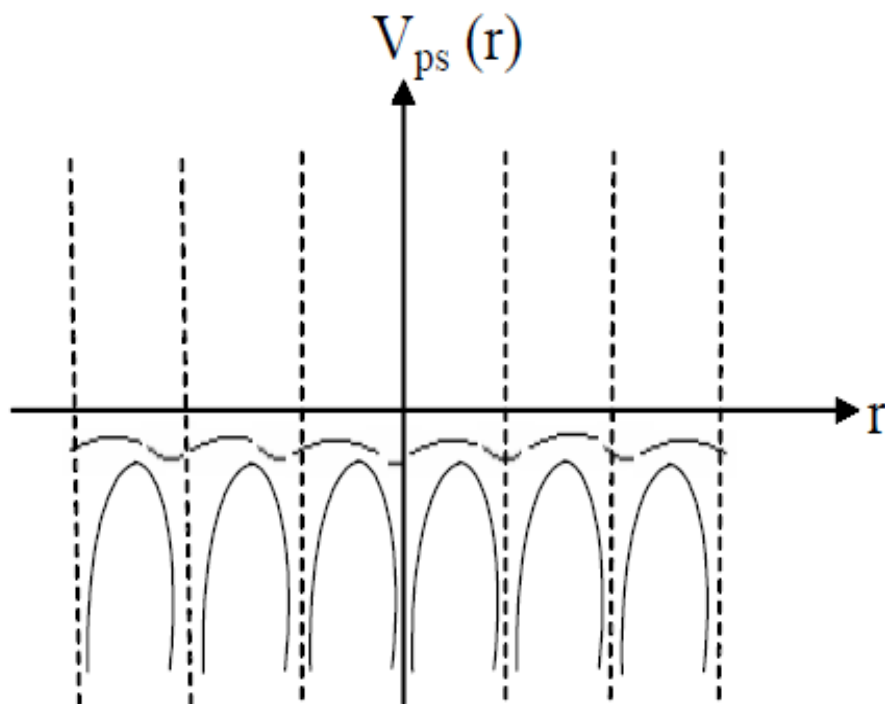
- le pseudopotentiel local (EPM local)
- le pseudopotentiel non local (EPM non local).

#### II.7.1. le pseudopotentiel local (EPM local)

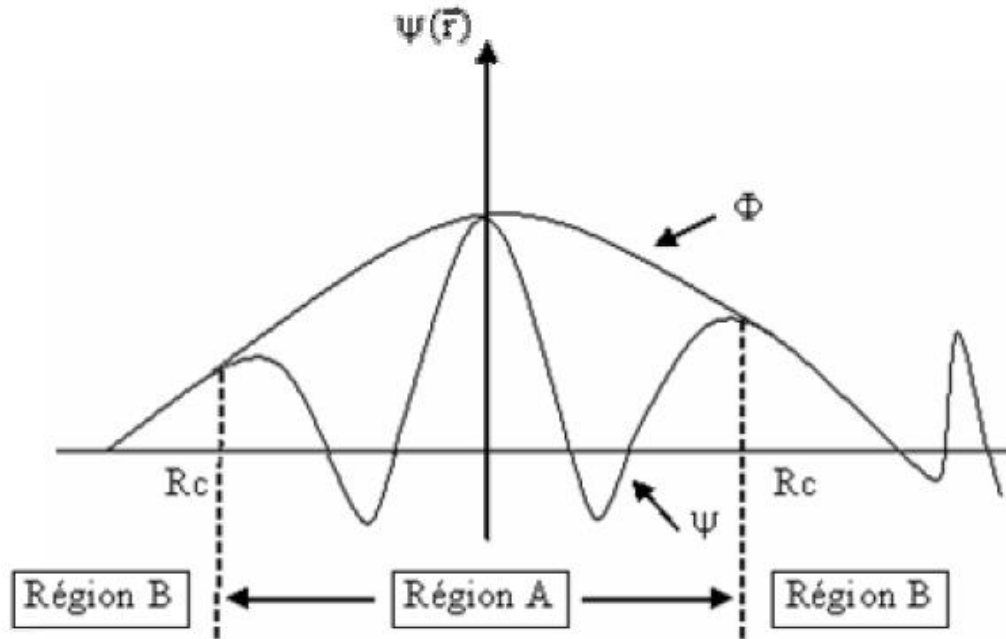
Cette méthode empirique est très exploitée dans le calcul des structures de bandes des semi-conducteurs, elle ne tient pas compte de la dépendance énergétique du pseudopotentiel avec les états du moment angulaire représentant les états du cœur [8].



(a) Potentiel cristallin



(b) Pseudo-potentiel



(c) Fonction d'onde

Fig II-1 : La fonction d'onde et le potentiel.

### II.8. Les alliages quasi-binaires

Les alliages semi-conducteurs quasi-binaires peuvent être obtenus en mélangeant des composés (III-V et III-V) ou (III-V et II-VI).

Les cristaux en vacissus de la fusion ont été rapportés par Dutta et Ostrogorsky. leur enquête était axée sur le quasi-binaire  $(\text{GaSb})_{1-x}(\text{InAs})_x$  cristaux. Brodovoi et al. ont rapporté la croissance de  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ , tandis que Glicksman et al. ont rapporté le comportement des bandes d'énergie des électrons dans des solutions de  $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$ . Les alliages quasi-binaire présentent des bandes interdites, une qualité structurale, propriétés optiques et vibratoires significativement différentes de celles des systèmes quaternaires classiques. [17]

### II.9. Conclusion

Le choix de la méthode des pseudopotentiels empirique l'EPM est basé essentiellement sur le fait d'obtenir les états de valence sans calculer pour autant les états du cœur qui ne sont pas nécessaires pour la description de propriétés physiques d'un système.

**Références bibliographiques citées dans le chapitre II :**

- [1]. R. Castagné et all. Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [2]. S.Laval .Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique (2002).
- [3]. C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod université (1983).
- [4]. P. Kiréev, « La Physique des semiconducteurs », édition Mir, Moscou (1975).
- [5]. F. Aymerich, Phys. Rev. B26, 1968 (1982).
- [6]. H. Abid, Thèse de doctorat d'état, Université de Sidi Bel-Abbes, (1997).
- [7]. Abderrachid BECHIRI, Effet du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs Thèse de doctorat d'état, Université de Constantine2006
- [8]. Abderrachid BECHIRI, Effet du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteursThèse de doctorat d'état , , Université de Constantine2006
- [9]. F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [10]. KARA MOHAMED Wahiba, Thèse de doctorat Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [11]. M. Labidi, Thèse Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011).
- [12]. A. Baldereschi, E. Hese, K. Maschke, H. Neumann, K.-R. Schulze and K. Unger: J. Phys. C :Solid State Phys. 10, 4709 , 1977.
- [13]. S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter 2 , 3253,1990.
- [14]. L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [15]. C. Herring, Phys. Rev. 57, 1169 (1940).
- [16]. Saheb Hadjer, Mémoire de MAGISTER ,Etude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du semiconducteur ternaire  $Al_xIn_{1-x}As$ , Université de Tébessa(2012).
- [17]. W. Kara Mohameda, F. Mezragb, N. Bouarissa .Elsevier. 47 (2010) 341\_348

**Chapiter III**  
**les proprietes physiques des semiconducteur**

## Chapitre III Les propriétés physiques des semiconducteur

### III. Introduction:

Les matériaux semi-conducteurs possèdent un champ d'application très élargi, ils sont actuellement utilisés dans plusieurs composants électroniques très importants.

Le développement de nouveaux dispositifs électroniques et optoélectroniques exigent une connaissance profonde des propriétés des matériaux utilisés, pour bien évaluer leur domaine d'application.

Dans ce chapitre nous allons donner quelques propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs, les propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques.

### III.2. Propriétés électroniques

Les matériaux semi-conducteurs III -V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétérostructures. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome comme exemple le Gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As et forment des liaisons covalents tétraédriques de type  $sP^3$  : 4 orbitales liantes et 4 orbitales antillanités. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bande d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence.

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]

Cette bande est pleinement occupée par des électrons à  $T=0k$  pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antillanités donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur  $E_g$  (gap). Pour les semi-conducteurs à gap direct le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point  $\Gamma$ , et pour les semi-conducteurs à gap indirect le maximum

de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde  $k$  [2].

Les propriétés électroniques des semi-conducteurs sont gouvernées par celles des électrons qui sont soumis à un potentiel périodique généré par les ions situés aux nœuds du réseau cristallin. Dans un cristal infini les porteurs de charges sont libres de se mouvoir dans les trois directions de l'espace et le vecteur d'onde  $k$  de l'électron peut prendre toutes les valeurs possibles dans la première zone de Brillouin [3].

### III.2.1. Structure de bande d'énergie électronique

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin.

Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction (Fig III.1). Ce sont la bande de valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute, et la bande interdite qui les sépare déterminant principalement les propriétés de transport du semi-conducteur.[4]

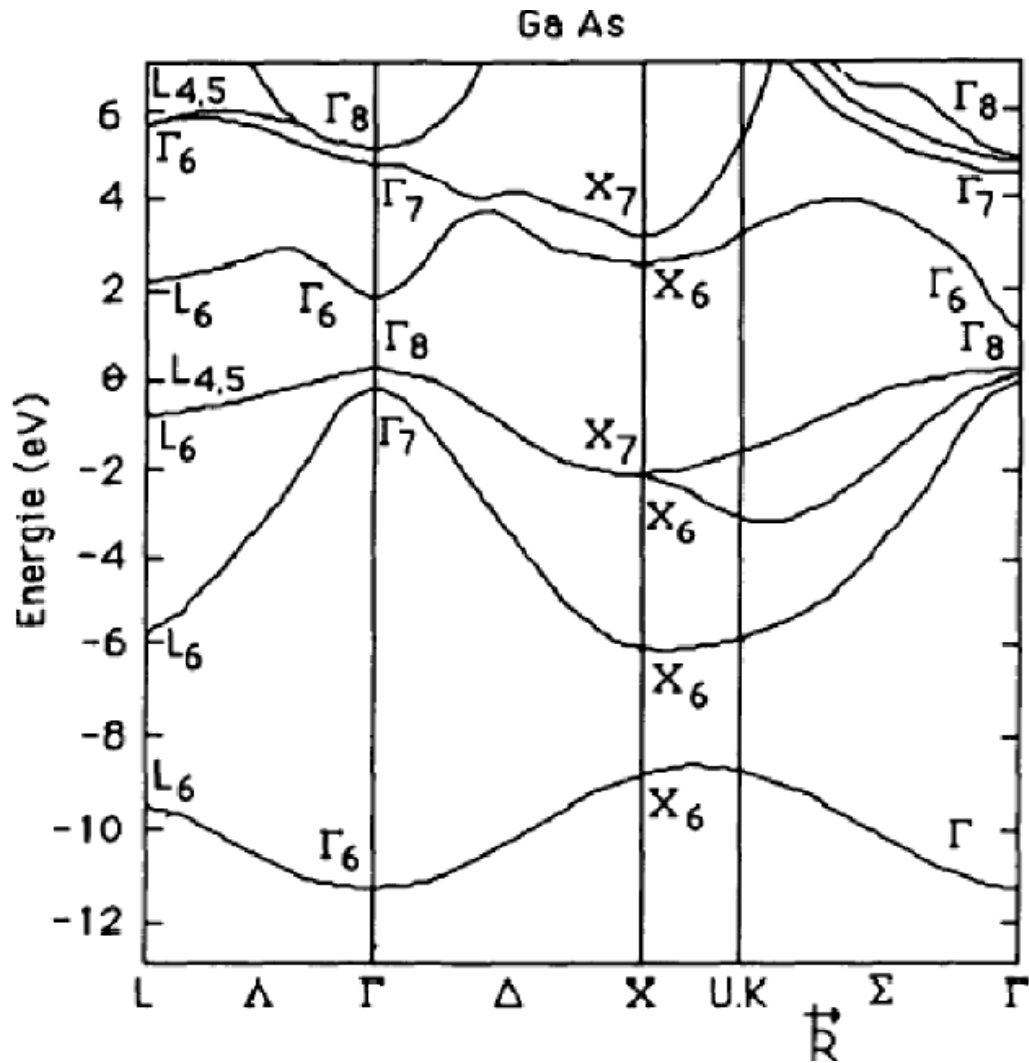
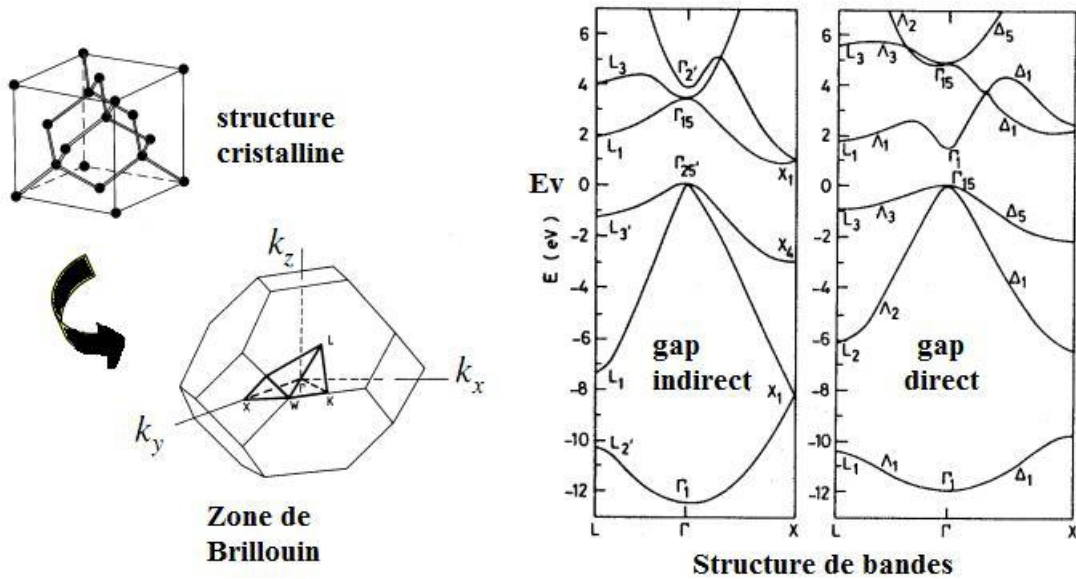


Fig. III.1. Structure de bande de GaAs.

### III.3. Les propriétés structurales des semiconducteurs

La formation d'un matériau est une structure complexe dans l'espace réciproque dont la première zone de Brillouin qui est représentée ci-dessous. De cette complexité de structure découle une complexité de la structure de bandes d'énergie des semiconducteurs comme illustré ci-dessous dans la même figure.[ III.2]



**Fig. III.2.** La relation entre la structure cristalline et la structure de bandes des matériaux semiconducteurs.

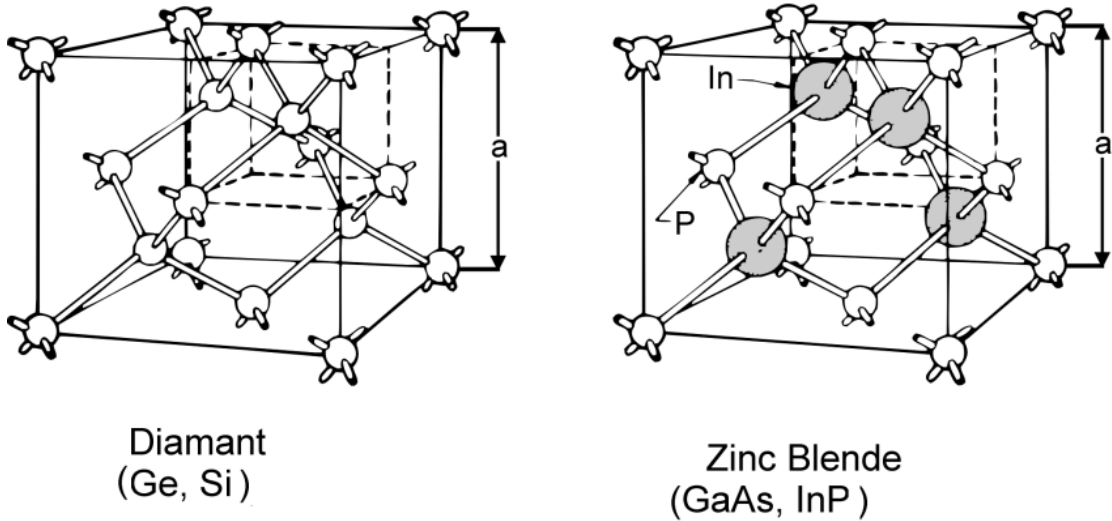
Les bandes peuvent avoir plusieurs extrema et peuvent être dégénérées à certains endroits de la zone de Brillouin. Et delà, on obtient les semiconducteurs à un gap direct ou indirect. [5]

### III.3.1. Les semiconducteurs cristallins

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.

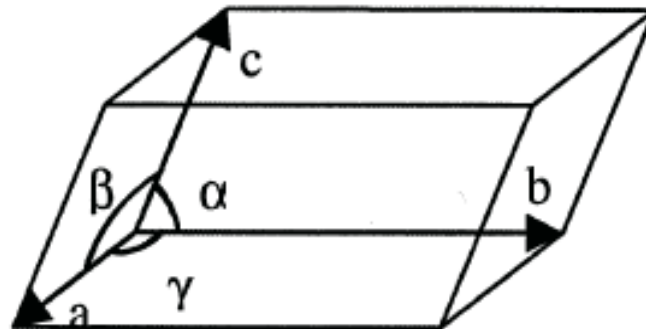
L'immense majorité des semiconducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si,Ge) ou optoélectroniques (GaAs, InP), sont basés sur la même structure cristalline, celle de diamant (Si , Ge ) ou la structure Zinc blende (GaAs, InP). Ces deux structures sont présentées sur la figure si contre [6] :



**Fig III.3.** Structure cristalline Diamant et Zinc Blende.

**III.3.2 La constante de maille**

la maille cristalline est définie par trois paramètres  $a, b, c$  et par trois angles qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur figure III-4 suivant les valeurs relatives de six grandeurs on définit les différentes structures cristallines.



**Fig. III.4.** La maille élémentaire

Dans le cas de système cubique  $a=b=c$  et  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

La constante de maille est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives. La détermination de la constante de maille est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. La connaissance de cette constante de maille permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique, il

peut varier en fonction de la température et de la pression. Les tableaux suivants présentent la structure cristalline et la constante de maille des matériaux semiconducteurs des groupes III-V, IV-IV et II-VI :

**Tableau III-1)** Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs III-V [7]

Le composant	a(A°)	Structure
AlP	5,462	W
AlN	3,111	Zb
AlAs	5,66	Zb
AlSb	6,33	Zb
GaP	5,45	Zb
GaN	3,189	Zb
GaAs	5,653	Zb
GaSb	6,478	Zb
InN	6,058	W
InP	3,615	Zb
InSb	6,478	Zb
InAs	6,058	Zb
BN	3,6155	Zb
Bas	4,777	Zb
BSb	5,252	Bz

**Tableau III-2)** Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs  
IV-IV [7]

Le composant	a(A°)	Structure
SiC	3,08	W
SiGe	5,45	Bz
SiSn	5,9	Bz
GeSn	6,22	Bz

**Tableau III-3)** Le paramètre de maille et la structure cristalline des quelques  
Semiconducteurs II-VI[7]

Le composant	a(A°)	Structure
ZnO	3,21	W
ZnS	5,41	Zb
ZnSe	5,6686	Zb
ZnTe	6,103	Zb
CdO	4,7	Rs
CdS	4,1	W
CdSe	6,5	Zb
CdTe	6,4816	Zb
HgS	5,852	Zb
HgSe	6,084	Zb
HgTe	6,461	Zb
MgS	5,91	Rs
MgSe	5,62	Rs
MgO	4.203	Rs
MgTe	6,42	W

### III. 4. Propriétés optique

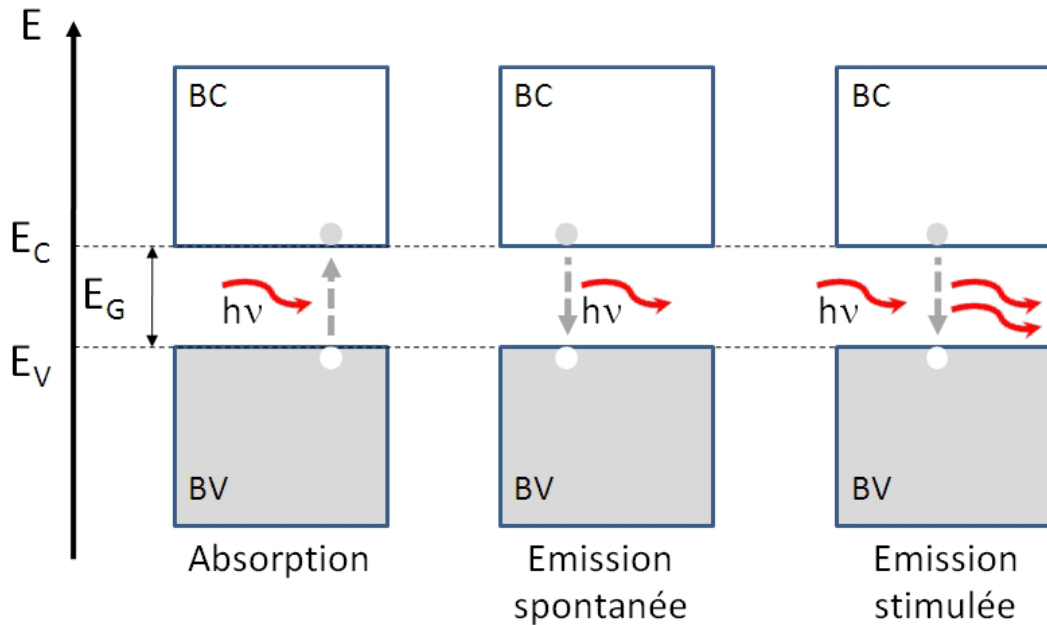
Dans cette partie, nous verrons que notre connaissance du comportement des électrons va jusqu'à nous expliquer la réflexion de la lumière par certains solides, alors que quelques-uns l'absorbent et que d'autres sont transparents. Elle nous apporte aussi l'explication pour certains solides de pouvoir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

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux[8].

#### III.4.1 Interaction électron - photon (Transition radiative):

L'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur se manifeste selon trois processus distincts:

- ✓ Un photon peut induire le saut d'un électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, c'est l'absorption fondamentale. Ce processus sera mis à profit dans les capteurs du rayonnement.
- ✓ Un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec l'émission d'un photon, c'est l'émission spontanée. Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs des rayonnements tels que les diodes électroluminescentes.
- ✓ Un photon présent dans le semiconducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence avec l'émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semiconducteurs [9].



**Fig. III.5.:** les processus d'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur.

### III.4.2 Interaction rayonnement matière:

La lumière interagit beaucoup avec la matière, elle peut être absorbée, réfléchie, déviée ou émise par la matière.

L'interaction avec les atomes et plus particulièrement avec les électrons du semiconducteur, peut se faire selon trois processus : l'absorption, l'émission instantanée et l'émission stimulée [1].

#### III.4.2.1 Absorption fondamentale

Lorsque le photon absorbé provoque un saut d'électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état vide de la bande conduction, on dit qu'il y a absorption. Ce phénomène présente sur la figure (III-6)

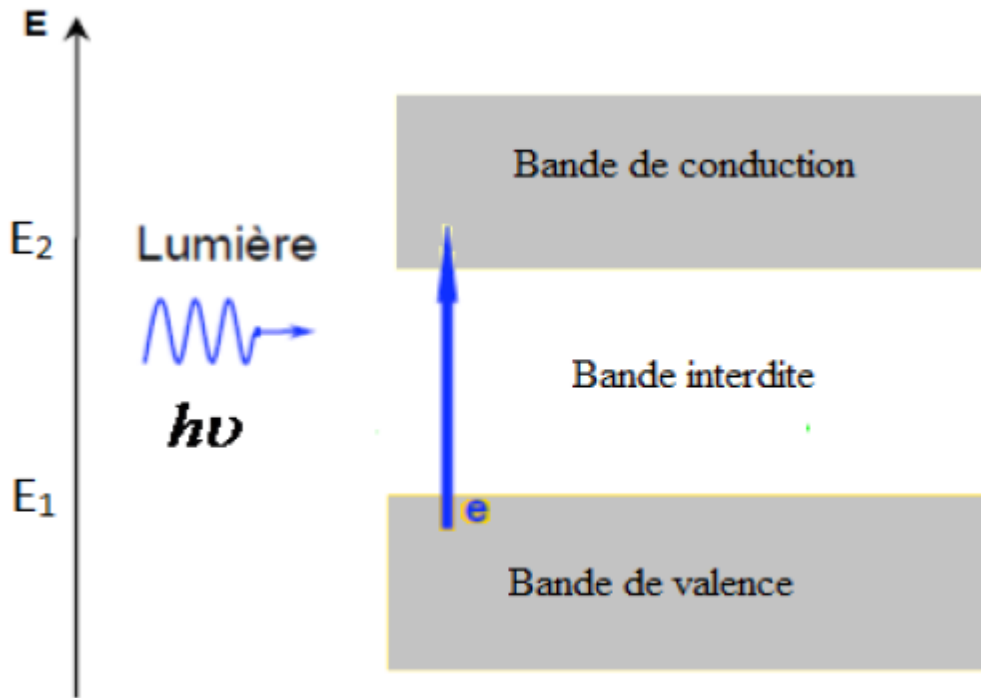


Fig.III.6. L'absorption fondamentale de la lumière par les porteurs

III.4.2.2 Emission spontanée

Lorsqu'un électron de la bande de conduction retombe spontanément sur un état vide de la bande de valence, il y'a émission spontanée. Les différents types Ce phénomène est présenté sur la figure suivante:

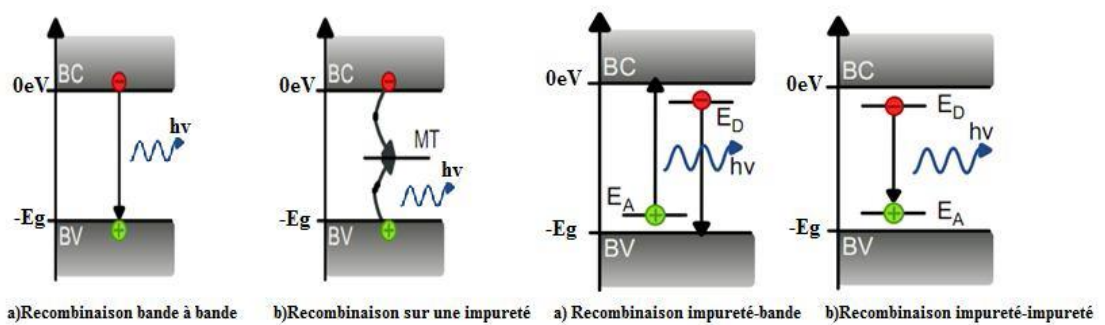
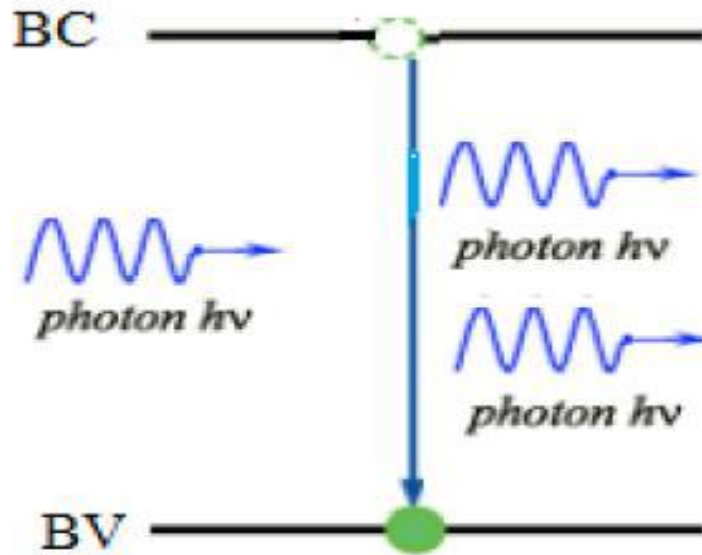


Fig.III.7. Les différents types L'émission spontanée.

### II.4.2.3. Emission stimulée

Si le photon absorbé induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de bande de valence avec émission d'un photon, l'émission est dite stimulée [10]. Ce phénomène est présenté sur la figure ci-contre.



**Fig.III.8.** L'émission stimulée.

### III-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) [11].

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  $\mu\text{m}$ .

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

Les Figure (III -9) et (III -10) représentent les structures de bandes du silicium (à gap indirect) et du GaAs (à gap direct) [1].

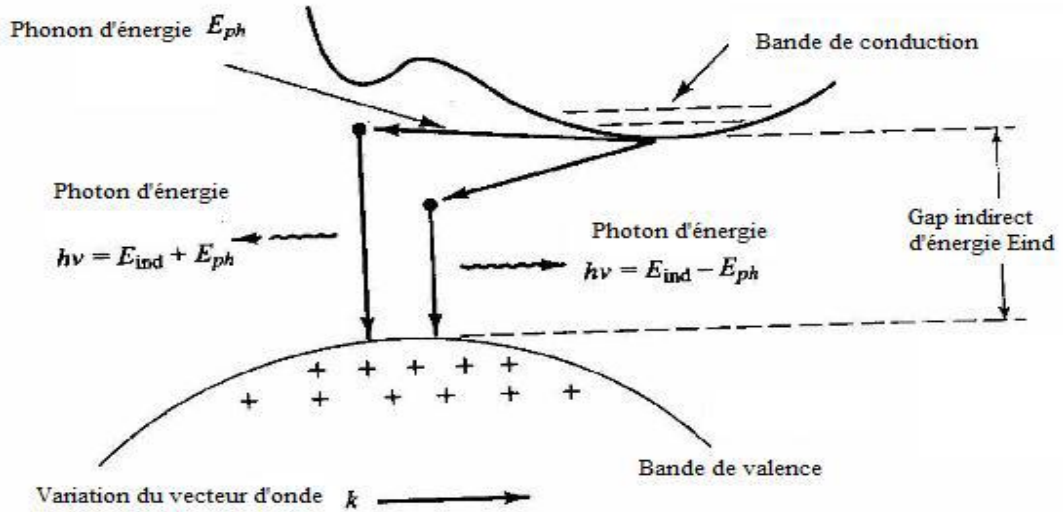


Fig III -9) Transition à gap indirect (Si).

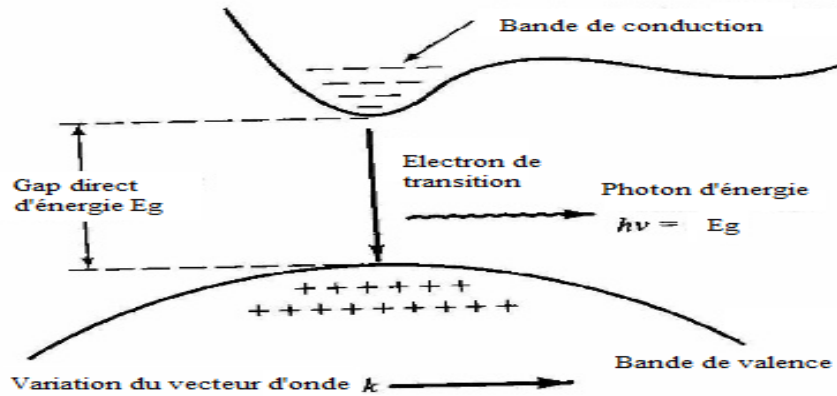
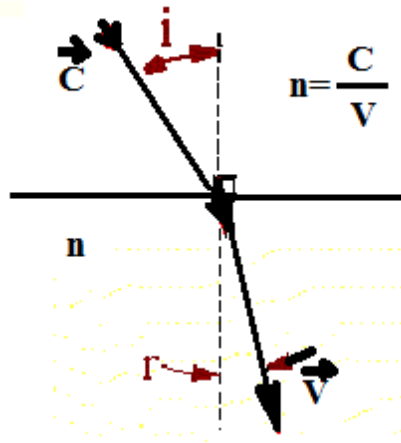


Fig.III.10. Transition à gap direct (GaAs).

**III.4.4. L'indice de refraction:**

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



**Fig.III.11.** L'indice de réfraction d'un matériau

L'indice de réfraction dépend du type de matériau utilisé qu'il soit monocristallin, polycristallin ou amorphe et du taux d'impuretés dans le matériau. En général, il est lié au gap énergétique du matériau, plus le gap est grand, plus l'indice est petit.[5]

Le tableau (III-4) présente les indices de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs :

**Tableau III-4)** L'indice de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs à T=300k

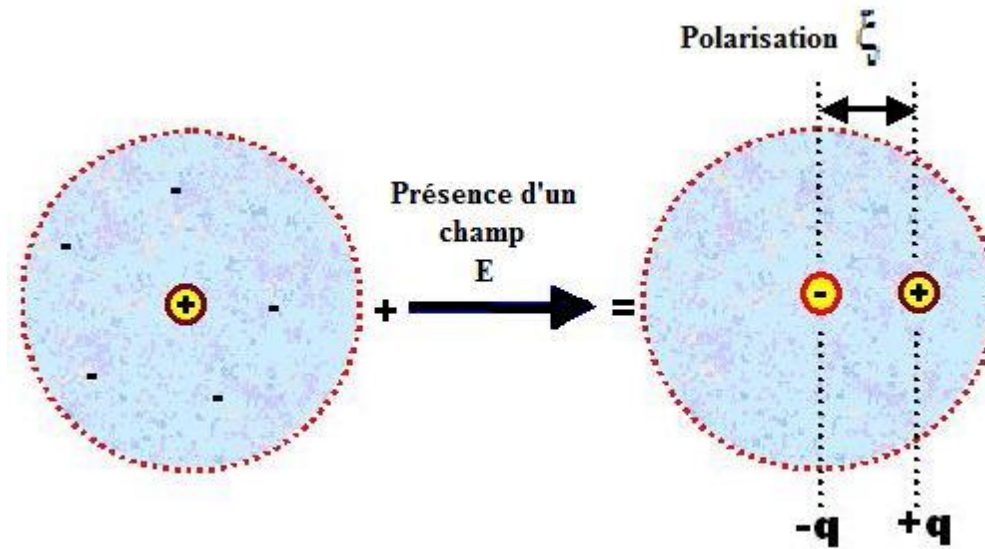
Matériau	n
GaP	2,92
InP	3,1
GaAs	3,3
InAs	3,5

### III-5 Propriétés diélectriques

Un matériau est dit diélectrique si ses électrons ne peuvent pas, par définition, se déplacer sur des grandes distances (de façon macroscopique). Autrement dit, c'est un milieu ne pouvant pas conduire le courant électrique. De ce point de vue, on l'appelle parfois isolant électrique tels que le vide, le verre et de nombreux plastiques.[5]

La réponse d'un cristal à un champ électrique appliquée  $\vec{E}$  est complètement décrite par la fonction diélectrique complexe  $(\omega, K)$ , Cette fonction a des conséquences importantes sur les propriétés physiques des solides[12].

La propriété la plus importante d'un diélectrique est la polarisation sous l'action d'un champ électrique externe. Comme le montre clairement la figure ci-dessous.



**Fig.III.12.** L'effet d'un champ électrique à l'échelle microscopique

### III.5.1. La constante diélectrique statique $\epsilon(0)$ et de hautes fréquences $\epsilon(\infty)$

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

Autrement dit, les excitations propres d'un matériau sont décrites par la fonction diélectrique,  $\epsilon(\omega, \vec{K})$  cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur d'onde  $\vec{K}$  [13].

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

Elle a été définie pour tenir compte de la contribution du cortège électronique des ions. Le tableau III-5, présente des valeurs expérimentales de  $\epsilon(0)\epsilon(\infty)$  pour quelques matériaux semiconducteurs [13].

**Tableau III -5)** La constante diélectrique statique et optique de quelques matériaux semi-conducteurs à 300k.

Matériau	Constante diélectrique statique $\epsilon(0)$	Constante diélectrique $\epsilon(\infty)$ Optique
GaP	10,7	8,5
GaAs	12,9	10,9
InP	12,4	9,6
InAs	14.9	12.3

### III-6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons regroupé quelques propriétés générales des matériaux semi-conducteurs. La connaissance de ces propriétés représente un intérêt fondamental dans la détermination des structures électroniques et atomiques de ces semi-conducteurs.

**Références bibliographiques citées dans le chapitre III :**

- [1]. F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [2]. S. Datta and B. Das, Appl Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [3]. M. Labidi, Thèse Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011)
- [4] N. Baghdadli, these de magister, Univ. Abou-Bakr Belkaid, TLEMEN. (2010)
- [5]. KARA MOHAMED Wahiba, Thèse de doctorat Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [5]. S. Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur », Wiley, Chichester, (2009).
- [7]. H. Mathieux, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 6 Ed. DUNOD (2009)
- [8]. Saheb Hadjer Mémoire de MAGISTER Université de Tébessa (2012)
- [9]. Adachi S. Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors .Department of Electronic Engineering. Gumma University, Japon, (2005).
- [10]. B.N. Brahmî, Thèse doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013).
- [11]. J. Boucher, J. Simonne, « Principes et fonctions de l'électronique intégrée », Ed Cepadues ,(1977).
- [12]. F. Mezrag, Mémoire de magister, Univ Mohamed Boudiaf de M'sila. (2003)
- [13]. C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod Université (1983).

**Chapitre IV**  
**Résultats et discussions**

## Chapitre IV: Résultats et discussions

### IV-1 Introduction

Le progrès scientifique est très lié au développement de la physique des semiconducteurs en mettant à profit leurs propriétés électroniques pour réaliser certains dispositifs électroniques.

Les propriétés des composés binaires sont les plus connues néanmoins elles sont fixes tels que le gap énergétique, le paramètre du réseau etc. Alors que certaines applications exigent des propriétés intermédiaires à celles des composés binaires [1]

Les composés semiconducteurs sont principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, structurales et optiques, ils interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques donc en optoélectronique.

Une connaissance précise de ces propriétés électroniques, structurales et optiques du matériau étudié est nécessaire pour l'évaluation de son domaine d'application.

### IV-2 Étude des propriétés électroniques

Dans l'EPM, le potentiel du cristal est représenté par une superposition linéaire des potentiels atomiques qui sont modifiés et ajustés pour avoir les mêmes valeurs du gap d'énergie connus aux points choisis dans la zone de Brillouin.

La nature empirique de la méthode du pseudo-potentiel consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques. [2]

Ces facteurs de forme, initialement pris de la théorie, sont ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [3], dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée, de l'écart des niveaux d'énergie définit par :

$$\delta = \left[ \sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m-N} \right]^{1/2} \quad (\text{IV.1})$$

Ou:

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{exp} - E_{ij}^{cal} \quad (\text{IV.2})$$

$E_{ij}^{exp}$  et  $E_{ij}^{cal}$  sont respectivement, les énergies observées et calculées entre l'état  $i$  avec  $k = k_i$  et l'état  $j$  avec  $k = k_j$  de la même paire  $(i, j)$  et  $N$  le nombre de paramètre du

pseudo-potentiel empirique. Les valeurs des facteurs de formes sont modifiées par interaction jusqu'à minimiser le  $\delta$ . [4]

#### IV-2-1 L'alliage quasi binaire $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

Dans le présent travail, les propriétés électroniques des alliages quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  ont été investies.

Les facteurs de forme pseudo-potentiels symétriques  $V_s$  et antisymétriques  $V_A$  ajustés, ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires utilisés, sont donnés dans le tableau (VI-1).

**Tableau VI-1)** Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés CdTe et InSb et leurs paramètres de réseau

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Les Paramètres de réseau a (Å)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
CdTe	-0.396388	0.198275	0.459548	0.1311	0.28	0.708145	6.48
InSb	-0.201294	0.01	0.028338	0.06449	0.03	0.015	6.49

Pour le quasi-binaire étudiés  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ , l'Hamiltonien est décrit par une composante due au cristal virtuel et une autre décrivant sous forme de fluctuations autour de ce cristal, de telle manière que les facteurs de forme symétriques et antisymétriques soient déterminés selon l'équation suivante [5] :

$$V_G^{S,A} = (1 - x) V_{\text{InSb}}^{S,A} + x V_{\text{CdTe}}^{S,A} \quad (\text{IV.3})$$

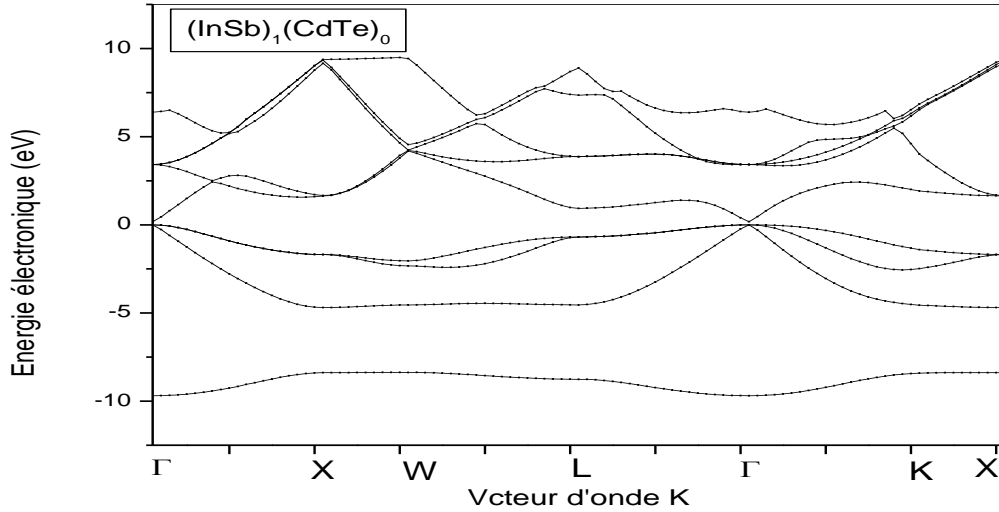
La constante du réseau est calculée en utilisant la loi de Vegard [6].

$$a(x) = (1 - x)a_{\text{InSb}} + xa_{\text{CdTe}} \quad (\text{IV.4})$$

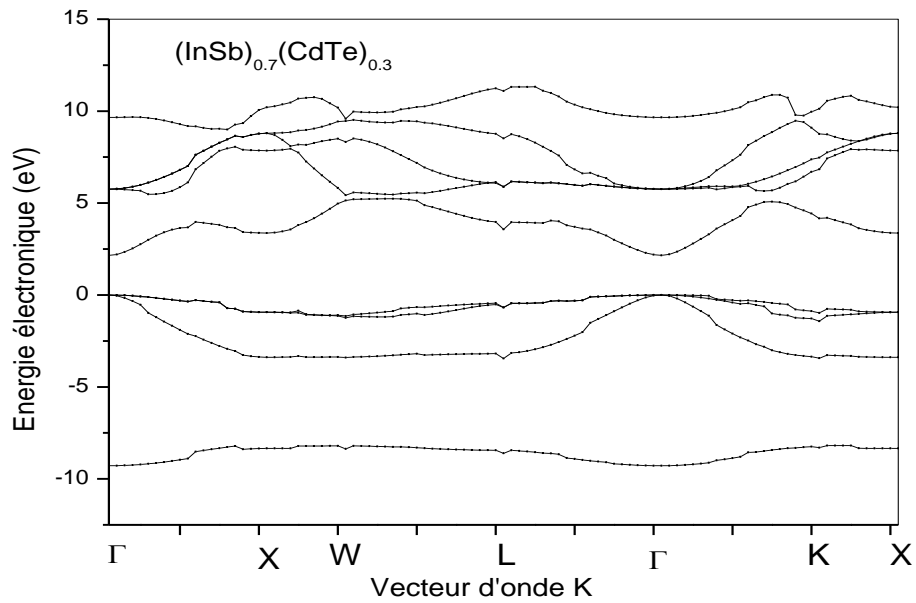
#### IV-2-2 Structure de bandes d'énergie:

La structure de bandes électroniques du quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  est calculée pour les points de haute symétrie de la première zone de Brillouin, pour quelques valeurs de x du CdTe.

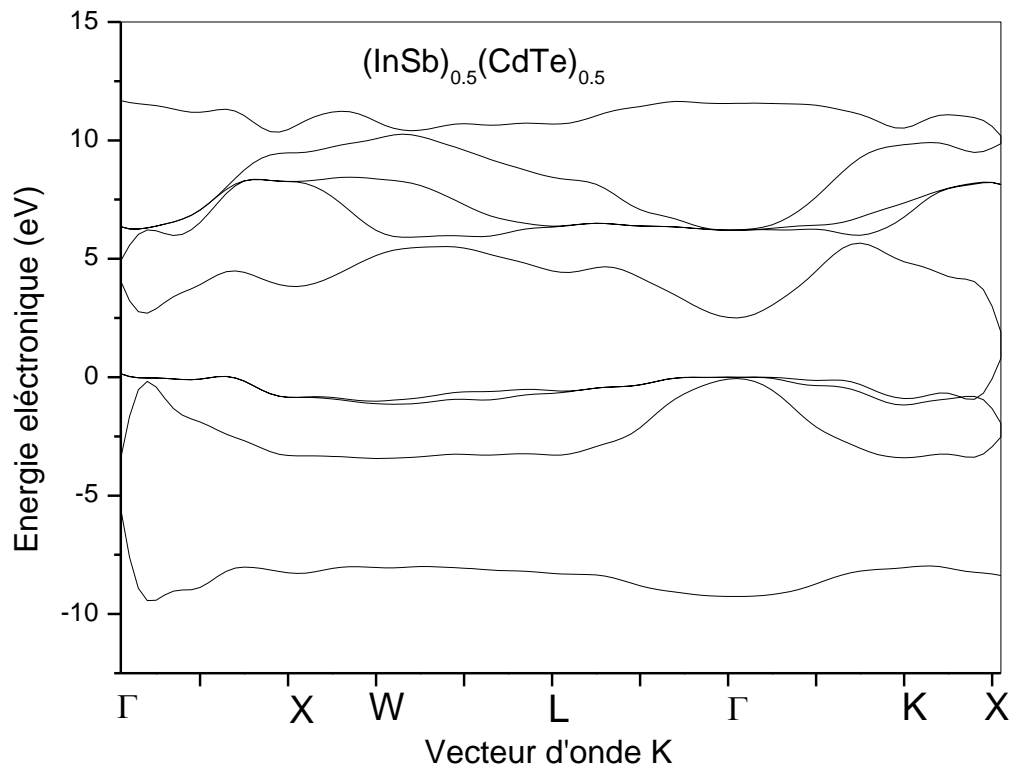
Les structures de bande du quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  sont représentées dans les figures IV-1, IV-2, IV-3, IV-4 et IV-5 pour  $x=0$ ,  $x=0.3$ ,  $x=0.5$ ,  $x=0.7$  et  $x=1$  respectivement.



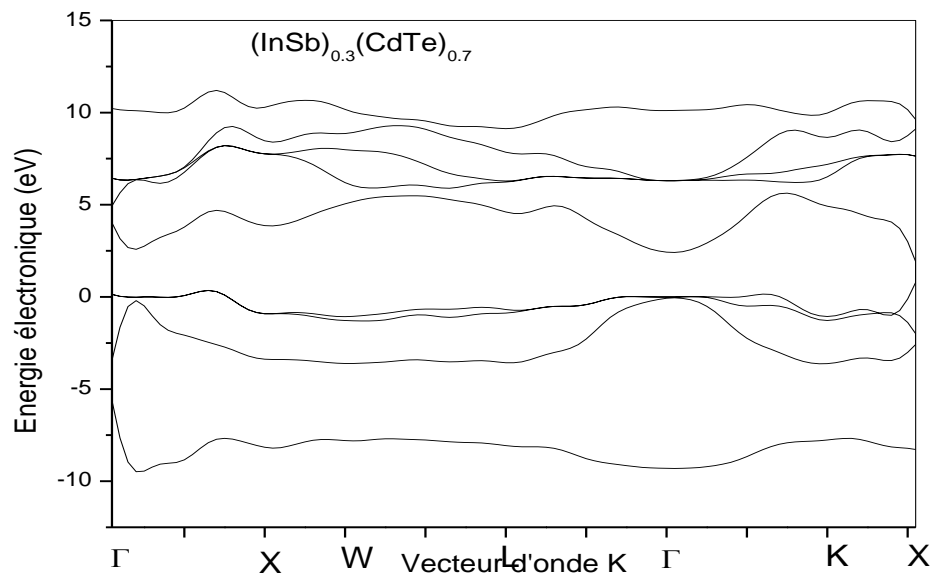
**Fig.IV.1.** La structure de bandes électroniques pour  $x=0$



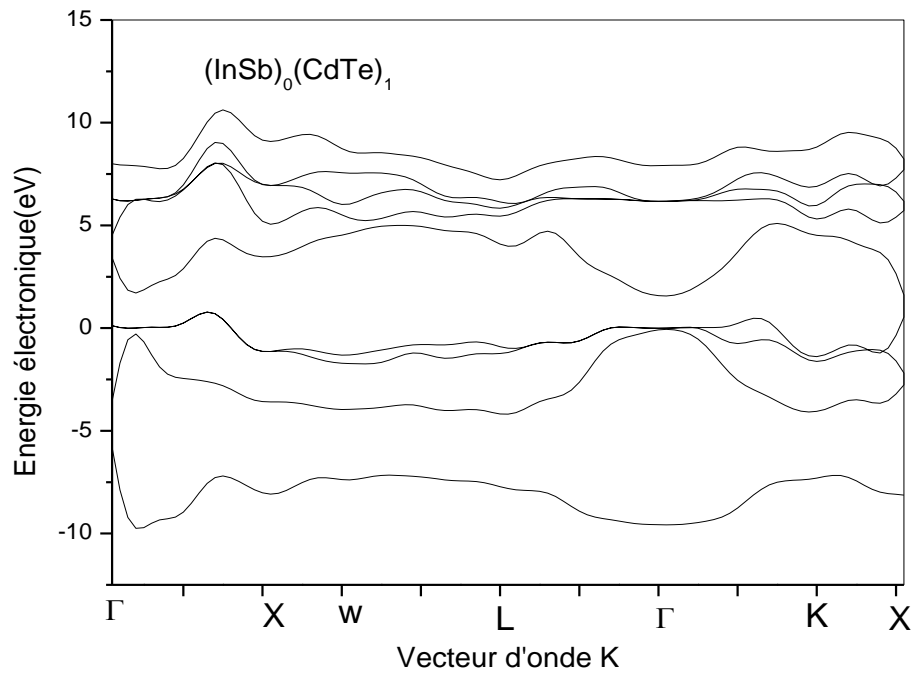
**Fig. IV.2.** La structure de bandes électroniques pour  $x=0.3$



**Fig. IV.3.** La structure de bandes électroniques pour  $x=0.5$



**Fig. IV.4.** La structure de bandes électroniques pour  $x=0.7$



**Fig. IV.5.** La structure de bandes électroniques pour  $x=1$

Nous remarquons que le maximum de la bande de valence est au point  $\Gamma$  et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point  $\Gamma$ , l'alliage quasi- binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  est un semiconducteur à gap direct  $E(\Gamma-\Gamma)$  pour toute les concentration étudiées.

#### IV-2-3 Gap énergétique de quasi-binaire $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

Les variations des gaps énergétique direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et indirects  $E_{\Gamma}^X$ ,  $E_{\Gamma}^L$  ont été calculés pour différentes compositions  $x$  du  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  allant de 0 à 1, nos résultats sont présentés dans le tableau (IV-2).

**Tableau IV-2)** Les variations des gaps énergétique de l'alliage(InSb)<sub>1-x</sub>(CdTe)<sub>x</sub>

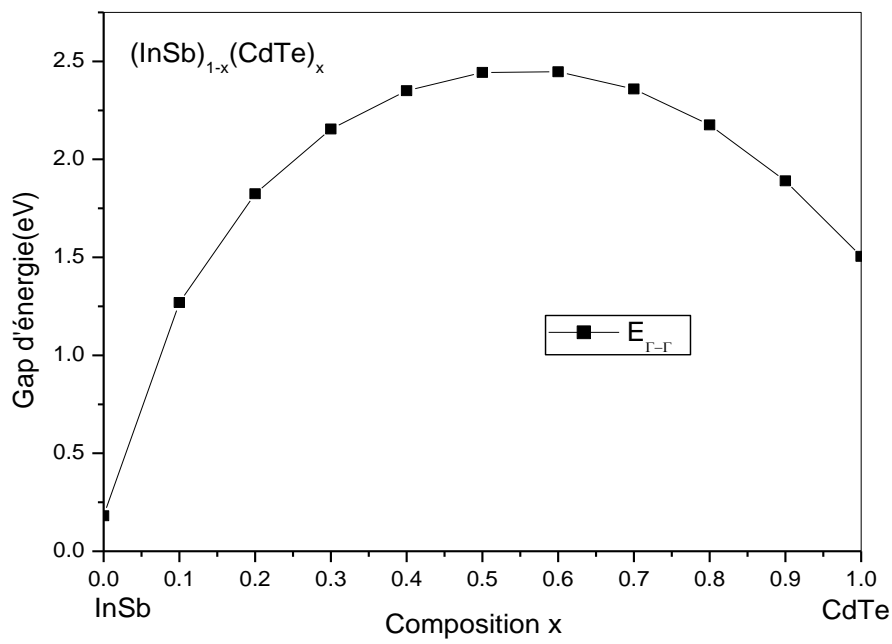
Composition x	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^L$
0	0.18111 <sup>c</sup> , 0.18 <sup>a</sup> , 0.25 <sup>b</sup>	1.63583 <sup>c</sup> 1.63 <sup>a</sup> , 1.71 <sup>b</sup>	0.93215c 0.93 <sup>a</sup> , 1.03 <sup>b</sup>
0.1	1.27	2.36	2.36
0.2	1.82	2.39	3.15
0.3	2.15	3.37	3.57
0.4	2.35	3.66	3.79
0.5	2.44	3.82	3.86
0.6	2.45	3.88	3.81
0.7	2.36	3.85	3.67
0.8	2.18	3.77	3.43
0.9	1.89	3.64	3.05
1	1.50 1.51 <sup>a</sup>	3.35 3.48 <sup>a</sup>	2.47 <sup>a</sup> 2.47 <sup>c</sup>

<sup>a</sup> Valeur expérimentale et théorique indiquée dans Réf [7]

<sup>b</sup> Réf [8]

<sup>c</sup> Nos calculs

Nous remarquons que nos résultats des gaps sont en meilleur accord avec l'expérience. La variation du gap fondamental  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  de l'alliage(InSb)<sub>1-x</sub>(CdTe)<sub>x</sub> en fonction de la composition x est présentée dans la figure (IV-6).

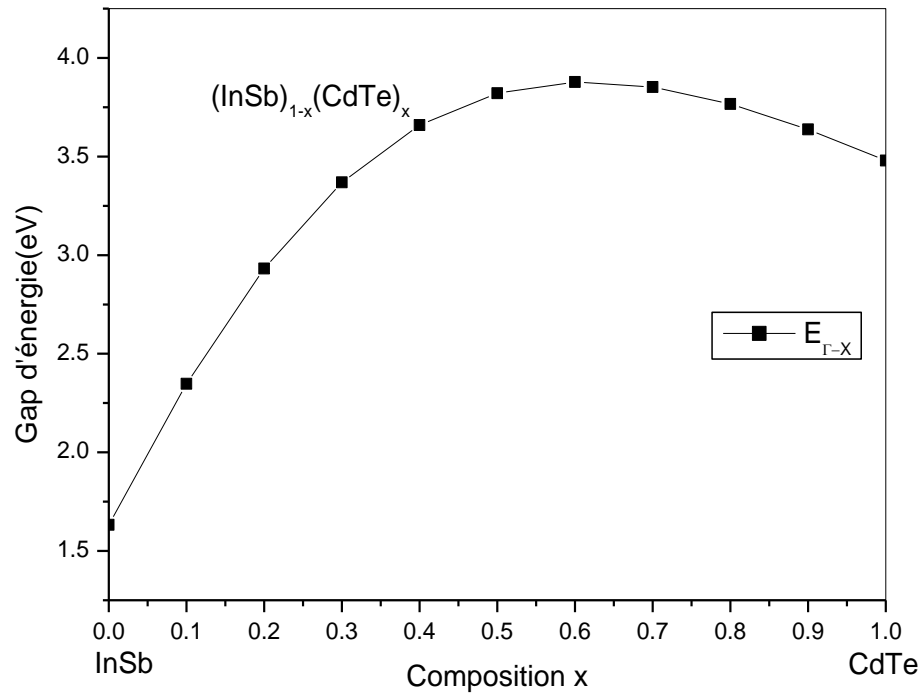


**Fig. IV.6.** La variation du gap fondamental  $E_{\Gamma-\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction de la composition  $x$  de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

L'équation du fit quadratique est :

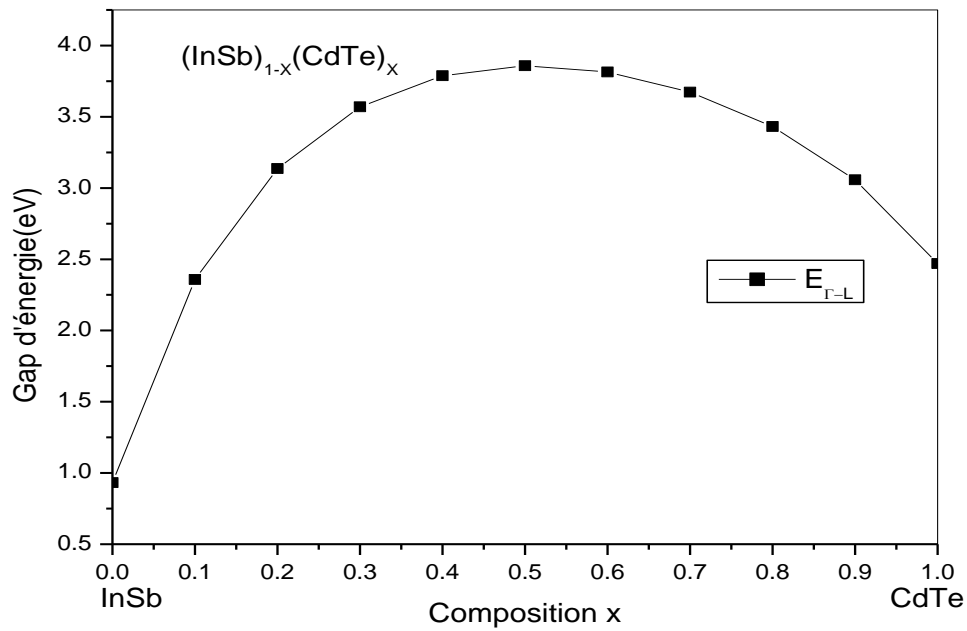
$$E_{\Gamma-\Gamma}^{\Gamma} = 0.43616 + 7.31512x - 6.34598x^2 \quad (\text{IV-5})$$

La variation du gap  $E_{\Gamma-\Gamma}^{\Gamma}$  de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  en fonction de la composition  $x$  est présenté dans la figure (IV-7).



**Fig. IV.7.** La variation du gap  $E_{\Gamma}^X$  en fonction de la composition  $x$  de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

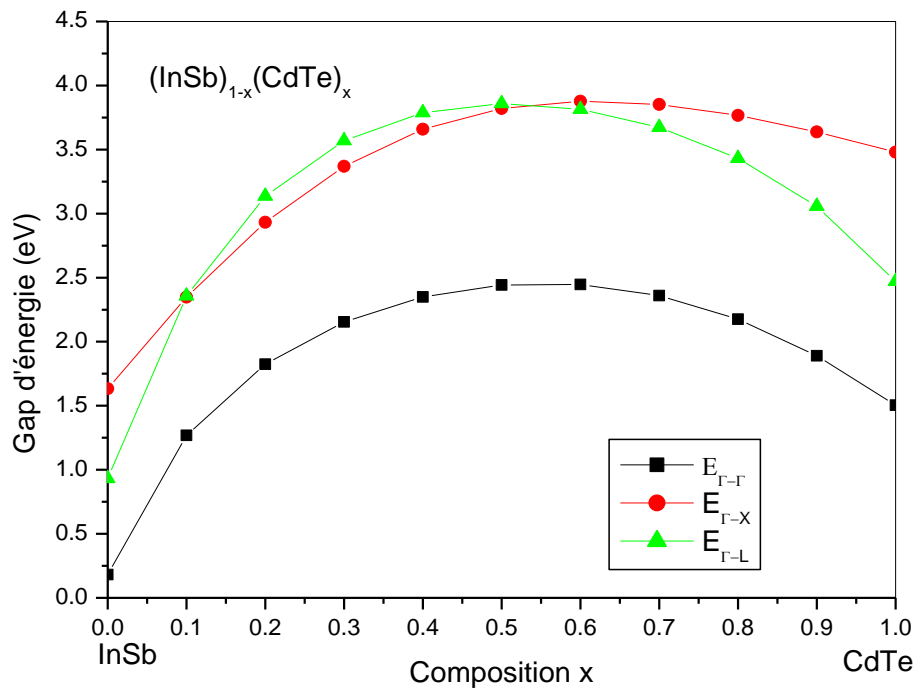
A travers cette figure, nous constatons que les gaps augmentent avec l'augmentation de la composition  $x$ , puis diminuent cette variation est donc non monotone et non linéaire. La variation du gap  $E_{\Gamma}^L$  de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  en fonction de la composition  $x$  est présenté dans la figure (IV-8).



**Fig. IV.8.** La variation du gap  $E_{\Gamma}^L$  en fonction de la composition  $x$  de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

Nous observons que le gap  $E_{\Gamma}^L$ , suit le même comportement que les deux gaps  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et  $E_{\Gamma}^X$  la variation en fonction de la concentration  $x$ . et non monotone et non linéaire

Dans le but de confirmer la possibilité d'existence d'une transition du gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et des gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) en fonction de la composition  $x$ , nous avons tracé les différentes courbes de variation des gaps énergétiques en fonction de la composition  $x$  sur la même figure (IV-9).



**Fig. IV. 9.** La variation du gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et des gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ), ( $E_{\Gamma}^L$ ) en fonction de la composition  $x$  de l'alliage semi-conducteur  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

Les équations des fit polynomiaux de deuxième ordre des gaps indirects sont données comme suit :

$$E_{\Gamma}^X = 1.72498 + 6.71093x - 5.06692x^2 \quad (\text{IV-6})$$

$$E_{\Gamma}^L = 1.28622 + 9.62277x - 8.56756x^2 \quad (\text{IV-7})$$

En allant du InSb ( $x=0$ ) vers le CdTe ( $x=1$ ), les trois gaps d'énergie varient non linéairement et non monotone avec la fraction molaire  $x$  et le gap fondamentale restera le gap  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  ce qui confirme que le quasi-binaire est a gap direct pour toutes les concentrations considérées

### IV-3 Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction)

L'indice de réfraction  $n$  d'un milieu à une longueur d'onde donnée mesure le facteur de réduction de la vitesse de la lumière (ou autres ondes) dans le milieu.

Les rayons de lumière changent de direction lorsqu'ils passent d'un matériau à un autre mettant en jeu le rapport des indices de réfraction.

La connaissance de l'indice  $n$  des semi-conducteurs est essentielle pour les dispositifs électroniques tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs [10].

Dans ce travail, cet indice a été calculé en utilisant six modèles différents, qui sont tous directement liés au gap énergétique fondamental comme suit:

**1. La formule de Moss[11]**

$$n = \sqrt[4]{k/E_g} \quad (\text{IV-8})$$

**2. La relation de Ravindra[12]**

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{IV-9})$$

$\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes avec  $\alpha = 4.16\text{eV}$  et  $\beta = -0.85\text{eV}$

**3. La forme linéaire de Gupta et Ravindra[13]**

$$n = \alpha + bE_g \quad (\text{IV-10})$$

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

**4. La relation empirique de Hervé et Vandamme donnée par [14] :**

$$n = \sqrt[2]{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)} \quad (\text{IV-11})$$

Avec  $A = 13.6\text{ eV}$  et  $B = 3.4\text{ eV}$

**5. La relation de Reddy at Anjaneyulu [15] :**

$$n = \ln \frac{36.3}{E_g} \quad (\text{IV-12})$$

**6. La relation empirique de Reddy et Ahmmed [16]:**

$$n^4(E_g - 0.365) = 154 \quad (\text{IV-13})$$

En utilisant ces six modèles, nous avons calculé l'indice de réfraction des alliages semi-conducteurs  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  à partir des valeurs de leurs gaps d'énergie les résultats sont représentés dans le tableaux (IV-2)

**Tableau IV-3)** Calcul des indices de réfraction de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  en fonction de la composition  $x$ .

Composition X	n calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss (IV-8)	Ravindra (IV-9)	Gupta et Ravindra (IV-10)	Hervé et Vadamme (IV-11)	Reddy et Anjneyulu (IV-12)	Reddy et Ahmmed (IV-13)	
0	4.94	4.01	3.97	3.93	5.30		3.93 <sup>a</sup>
0.1	3.04	3.08	3.29	3.08	3.35	3.61	
0.2	2.77	2.61	2.95	2.79	2.99	3.21	
0.3	2.66	2.33	2.75	2.64	2.82	3.05	
0.4	2.60	2.16	2.67	2.57	2.73	2.97	
0.5	2.58	2.08	2.57	2.53	2.69	2.93	
0.6	2.58	2.08	2.57	2.53	2.69	2.94	
0.7	2.60	2.15	2.62	2.56	2.73	2.96	
0.8	2.65	2.31	2.74	2.64	2.81	3.04	
0.9	2.75	2.55	2.91	2.76	2.96	3.17	
1	2.91	2.88	3.15	2.95	3.18	3.41	2.91 <sup>b</sup>

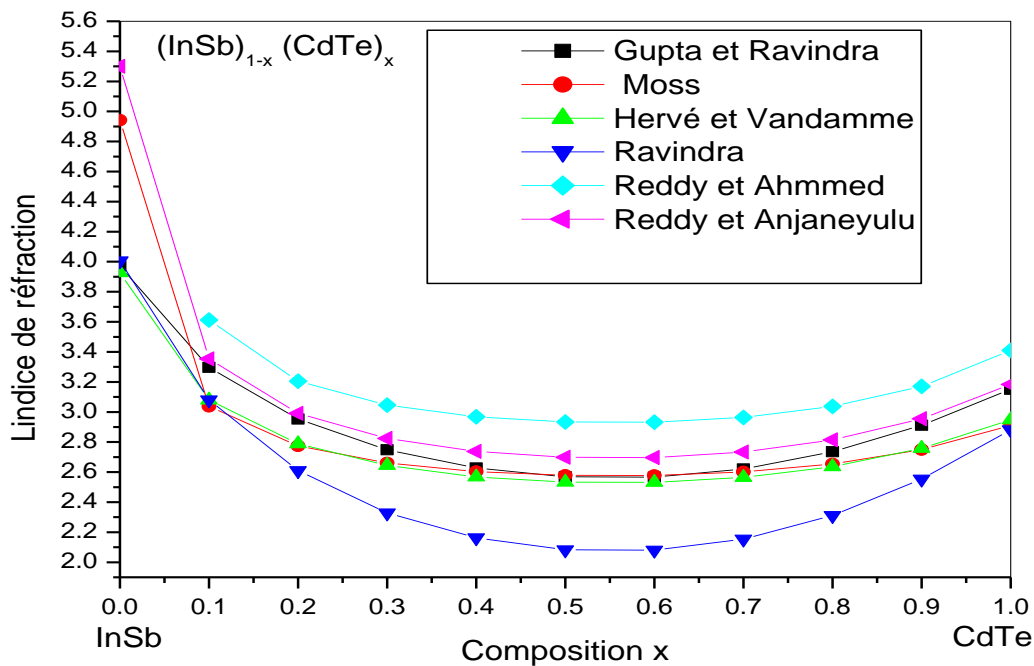
<sup>a</sup> Valeur théorique indiquée dans Ref [17]

<sup>b</sup> Valeur théorique indiquée dans Ref [9]

Pour faire une comparaison, nous avons présenté également les valeurs théorique citées dans les références 17 et 9, Il en résulte de ces comparaisons que, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique du composé InSb et du composé CdTe est celle donnée par la relation de Hervé et Vandamme.

La figure (IV-10) donne la variation de l'indice de réfraction de  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  en fonction de la composition  $x$  des six modèles, la relation qui relie les deux grandeurs ( $x$  et  $n$ ) est présentée par le fit polynomial d'ordre deux donné par les équations suivantes:

$n = 3.81 - 4.53x + 3.93x^2$	(La relation de Gupta et Ravindra)	(IV-14)
$n = 3.657 - 4.14x + 3.52x^2$	(La relation de Hervé et Vandamme)	(IV-15)
$n = 4.21 - 6.09x + 5.02x^2$	(La relation de Moss)	(IV-16)
$n = 3.78 - 6.21x + 5.39x^2$	(La relation de Ravindra)	(IV-17)
$n = 3.82 - 3.26x + 2.85x^2$	(La relation de Reddy et Ahmmed )	(IV-18)
$n = 4.57 - 7.01x + 5.834x^2$	(La relation de Reddy et Anjaneyulu)	(IV-19)

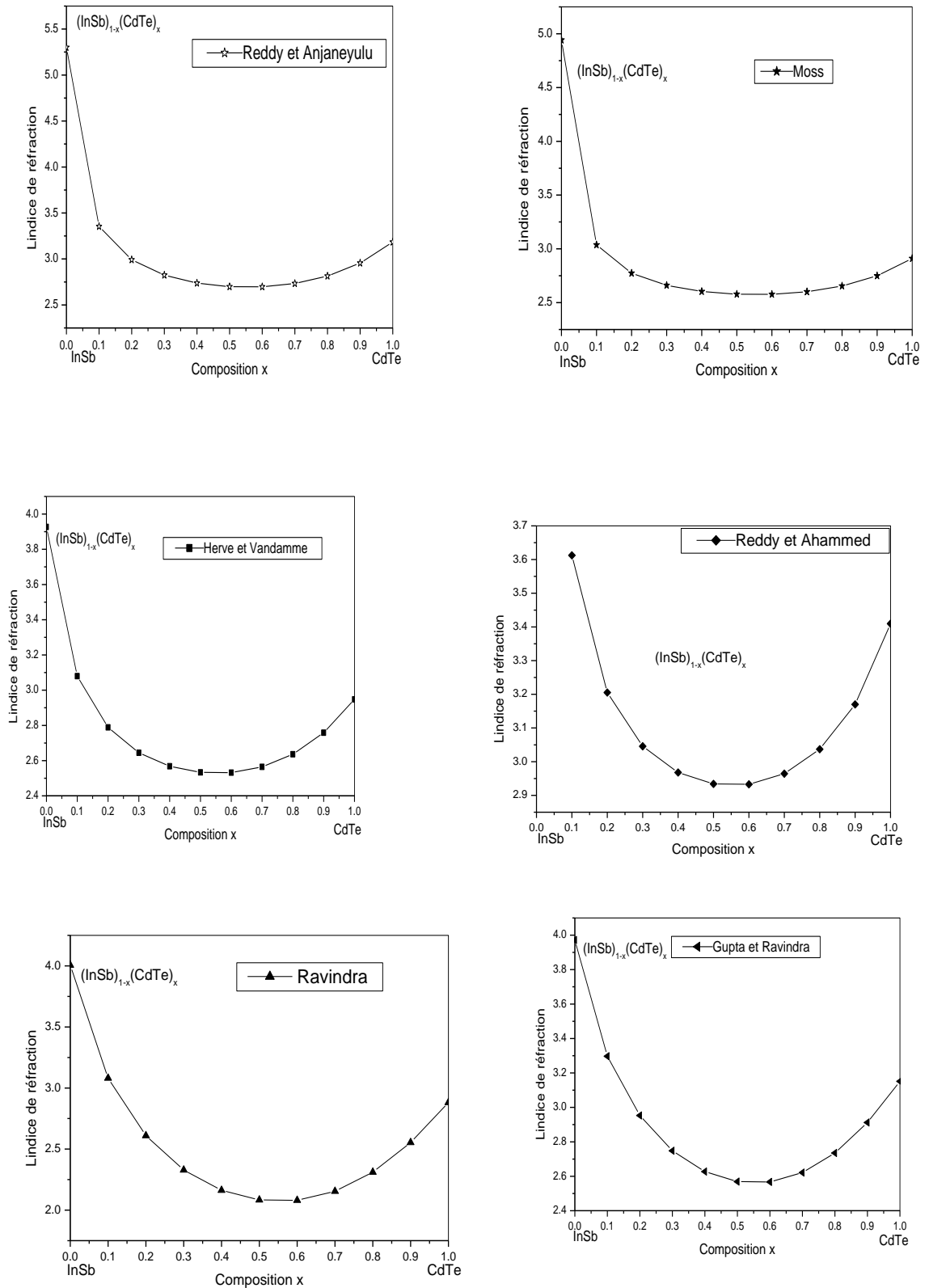


**Fig. IV.10.** La variation de l'indice de réfraction  $n$  en fonction de la composition  $x$  de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  des six modèles

Nous observons que la variation de l'indice de réfraction de  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  en fonction de la composition  $x$  présente un comportement non monotone et non linéaire pour tous les modèles utilisés.

Les valeurs de  $n$  obtenues à partir des six modèles utilisés sont différentes les unes des autres, mais présentent la même tendance. L'augmentation de l'indice de réfraction est directement liée à la diminution du gap en fonction de la composition  $x$ .

Nous pouvons conclure que dans l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ , le matériau qui a le plus petit gap  $E_g$  a la plus grande valeur de  $n$ .



**Fig. IV.11.** La variation de l'indice de réfraction  $n$  en fonction de la concentration  $x$ , calculé par les différentes relations

## IV-4 Etude des propriétés diélectriques

### IV-4-1 La constante diélectrique de haute fréquence

Basé sur les valeurs calculées de l'indice  $n$  obtenu à partir des relations des différents modèles utilisés, la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$ , a été estimée pour différentes compositions  $x$  en utilisant l'expression suivante :

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \quad (\text{IV-20})$$

La variation de la constant  $\epsilon_{\infty}$  pour l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ , à partir des différents modèles, pour différentes composition  $x$  dans l'intervalle  $(0 \leq x \leq 1)$  est présentée dans le tableau (IV-5).

**Tableau IV-4)** La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  à partir des différents modèles

Composition X	$\epsilon_{\infty}$ calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss (IV-8)	Ravindra (IV-9)	Gupta et Ravindra (IV-10)	Hervé et Vadamme (IV-11)	Reddy et Anjneyulu (IV-12)	Reddy et Ahmmed (IV-13)	
0	24.42 <sup>c</sup>	16.05 <sup>c</sup>	15.77 <sup>c</sup>	15.42 <sup>c</sup>	28.09 <sup>c</sup>		15.6 <sup>a</sup>
0.1	9.22	9.49	10.87	9.48	11.24	13.045	
0.2	7.69	6.81	8.72	7.78	8.94	10.27	
0.3	7.08	5.42	7.55	6.99	7.96	9.28	
0.4	6.78	4.68	6.90	6.59	7.49	8.81	
0.5	6.65	4.34	6.60	6.42	7.28	8.61	
0.6	6.64	4.33	6.59	6.41	7.27	8.60	
0.7	6.77	4.64	6.87	6.58	7.47	8.79	
0.8	7.05	5.34	7.48	6.95	7.92	9.22	
0.9	7.56	6.52	8.48	7.61	8.73	10.05	
1	8.47 <sup>c</sup>	8.30 <sup>c</sup>	9.93 <sup>c</sup>	8.69 <sup>c</sup>	10.13 <sup>c</sup>	11.63 <sup>c</sup>	8.47 <sup>b</sup>

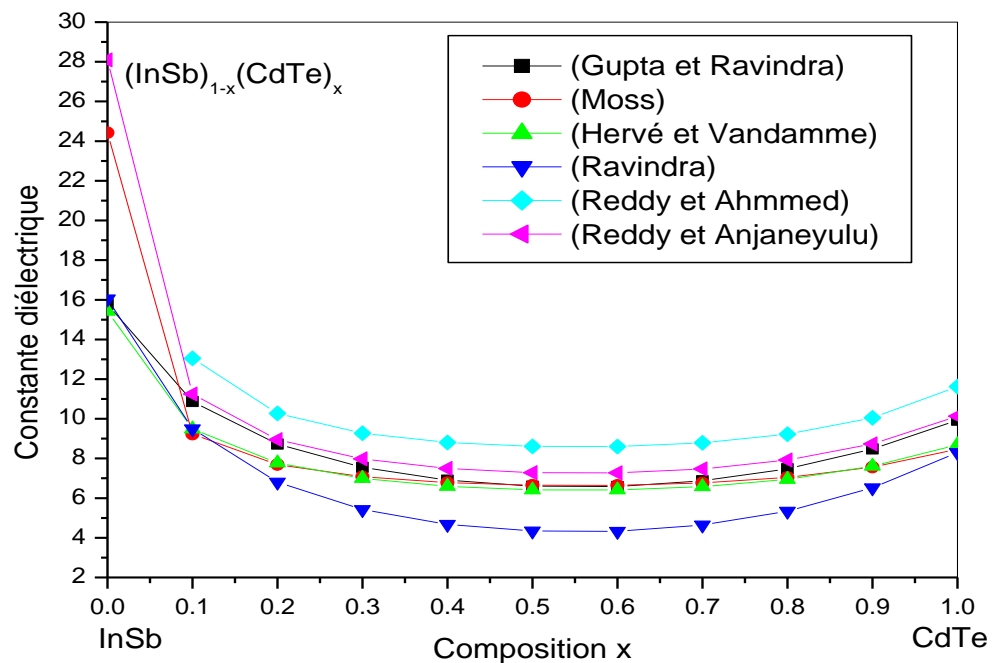
<sup>a</sup> Valeur expérimentale indiquée dans Réf [18]

<sup>b</sup> Valeur expérimentale indiquée dans Réf [9]

<sup>c</sup> Nos calculs

Pour faire une comparaison, nous avons présenté également la valeur théorique citée dans la référence 9 et 18, Il en résulte de ces comparaisons que, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique de composé  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  est celle donnée par la relation de : Hervé et Vandamme.

La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  en fonction de la composition  $x$  en utilisant les différents modèles est montrée sur la figure (IV-12).



**Figure IV-12)** La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  des six modèles.

La même tendance est observée pour tous les modèles utilisés, présente un comportement non monotone et non linéaire pour tous les modèles utilisés.

La relation qui relie les deux grandeurs ( $x$  et  $\epsilon_{\infty}$ ) est présentée par le fit polynomial donné par les équations suivantes :

$\varepsilon_{\infty} = 14.11 - 35.98x + 30.81x^2$	(Ravindra)	(IV-21)
$\varepsilon_{\infty} = 14.412 - 28.66x + 24.65x^2$	(Gupta et Ravindra)	(IV-22)
$\varepsilon_{\infty} = 14.36 - 21.13x + 18.39x^2$	(Reddy et Ahmmed)	(IV-23)
$\varepsilon_{\infty} = 13.38 - 25.840x + 21.778x^2$	(Hervé et Vandamme)	(IV-24)
$\varepsilon_{\infty} = 18.39 - 44.11x + 36.01x^2$	(Moss)	(IV-25)
$\varepsilon_{\infty} = 21.57 - 53.52x + 44.05x^2$	(Reddy et Anjaneyulu)	(IV-26)

#### IV.4.2. La constante diélectrique statique $\varepsilon_0$

Nous avons également calculé la constante diélectrique statique  $\varepsilon_0$  en utilisant la relation suivante [IV.27] :

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_{\infty} - 1} = 1 + \nu \quad (\text{IV-27})$$

Où  $\nu$  est donné par la formule suivante :

$$\nu = \frac{a_p^2(1+2a_c^2)}{2a_c^4} \quad (\text{IV-28})$$

Avec  $a_p$  est la polarité qui a été estimée à partir de la définition Vogl [IV.29] comme suit :

$$a_p = \frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{VI-29})$$

$V_A(3)$  et  $V_S(3)$  dans l'équation (VI-29) représentent les facteurs de forme pseudopotentiels symétrique et antisymétrique respectivement.

$a_c$  est la covalence définie comme suit :

$$a_c = \sqrt{1 - a_p^2} \quad (\text{VI-30})$$

En utilisant les six modèles, nous avons calculé le constante diélectrique statique  $\varepsilon_0$  en fonction de la composition  $x$  pour l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ . Nos résultats sont indiqués dans le tableau (IV-6).

**Tableau IV-5)** La variation de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

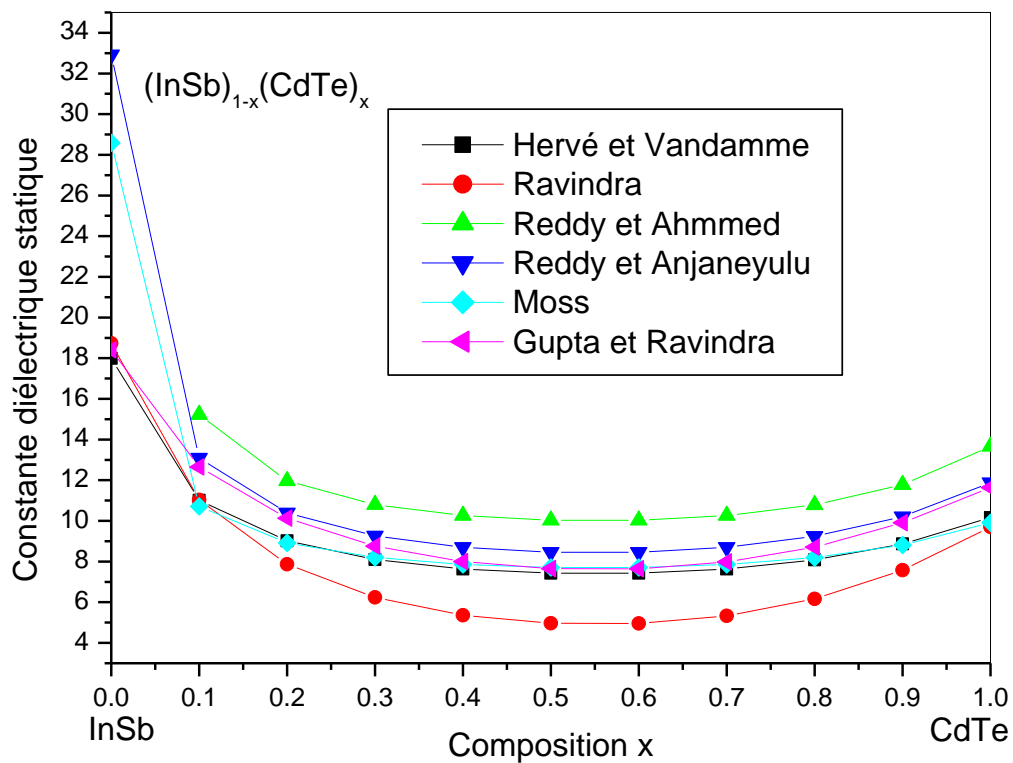
Composition X	$\epsilon_0$ calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vadamme	Reddy et Anjneyulu	Reddy et Ahmmed	
0	28.59 <sup>c</sup>	18.73 <sup>c</sup>	18.41 <sup>c</sup>	17.99 <sup>c</sup>	32.92 <sup>c</sup>		17.7 <sup>a</sup>
0.1	10.701	11.03	12.65	11.01	13.09	15.22	
0.2	8.92	7.87	10.13	9.014	10.39	11.97	
0.3	8.19	6.24	8.76	8.09	9.26	10.80	
0.4	7.853	5.36	7.99	7.63	8.70	10.26	
0.5	7.71	4.96	7.64	7.43	8.45	10.03	
0.6	7.71	4.95	7.64	7.43	8.45	10.03	
0.7	7.87	5.33	7.98	7.63	8.69	10.26	
0.8	8.19	6.17	8.71	8.08	9.23	10.79	
0.9	8.81	7.57	9.91	8.87	10.21	11.78	
1	9.90 <sup>c</sup>	9.70 <sup>c</sup>	11.64 <sup>c</sup>	10.16 <sup>c</sup>	11.88 <sup>c</sup>	13.66 <sup>c</sup>	9.90 <sup>b</sup>

<sup>a)</sup> Valeur expérimentale indiquée dans Réf [18]

<sup>b)</sup> Valeur expérimentale indiquée dans Réf [9]

<sup>c)</sup> nos calcul

La figure (IV-13) présenté la variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x pour tous les modèles dans la même courbe.



**Fig. IV.13.** La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition  $x$  en utilisant les différents modèles pour l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$

Pour les valeurs de  $x$  différents de 0 et 1, nos résultats sont des prédictions.

Notant que le même comportement est remarqué pour la variation de la constante diélectriques statique pour tous les modèles, ce comportement est non linéaire et non monotone . Le modèle qui donne la valeur plus approche de la valeur théorique c'est le modèle de Hervé et Vandamme .

Les équations du fit quadratique pour tous les modèles sont données comme suit :

$$\varepsilon_0 = 16.81 - 33.72x + 29.08x^2 \quad (\text{Gupta et Ravindra}) \quad (\text{IV-31})$$

$$\varepsilon_0 = 15.59 - 30.37x + 25.67x^2 \quad (\text{Herve et Vandamme}) \quad (\text{IV-32})$$

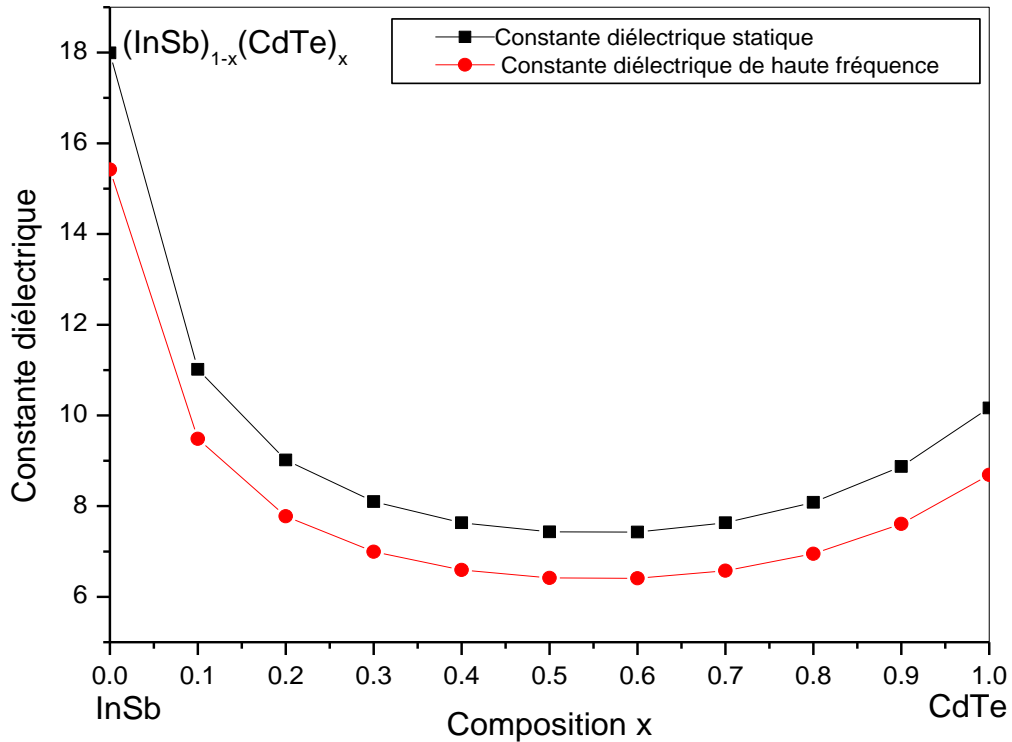
$$\varepsilon_0 = 21.49 - 51.88x + 42.42x^2 \quad (\text{Moss}) \quad (\text{IV-33})$$

$$\varepsilon_0 = 16.46 - 42.40x + 36.38x^2 \quad (\text{Ravindra}) \quad (\text{IV-34})$$

$$\varepsilon_0 = 16.77 - 24.85x + 21.74x^2 \quad (\text{Reddy et Ahmmed}) \quad (\text{IV-35})$$

$$\varepsilon_0 = 25.25 - 62.98x + 51.93x^2 \quad (\text{Reddy et Anjaneyulu}) \quad (\text{IV-36})$$

Pour voir le comportement de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  et la constante diélectrique de haute Fréquence  $\epsilon_\infty$ , nous avons tracés les deux dans la même courbe, pour le modèle de Herve et Vandamme en fonction de la composition  $x$  de la alliage quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  figure (IV-14). Les deux constantes suivent le même comportement de point de vue qualitatif.



**Fig. IV.14.** La variation des constant diélectrique statique et de haute fréquence de l'alliage  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  en fonction de la composition  $x$  de modèle Herve et Vandamme.

#### IV-5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques telles que le gap énergétique, l'indice de réfraction et les constantes diélectriques statique et de haute fréquence, de l'alliage semi-conducteurs quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ . nous avons utilisé la méthode empirique des pseudo-potentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la composition  $x$

**Références bibliographiques citées dans le chapitre IV**

- [1]. C. Marín, A.G. Ostrogorsky, *J. Cryst. Growth* 211 (2000) 194.
- [2]. F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [3]. N. Bouarissa, M. Boucenna, *Phys. Scr.* 79 (2009) 015701.
- [4]. N. Bouarissa, T. Kobayashi, and H. Nara, *Solid. State. Commun.* 96 (1995) 689.
- [5]. KARA MOHAMED Wahiba, Thèse de doctorat Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [6]. L. Vegard, *Z. Phys.* 5 (1921) 17.
- [7]. S. Adachi, *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, Wiley, Chichester, (2009).
- [8]. J. Chelikowsky and M. L. Cohen *Phys. Rev B* 14, 552 (1976).
- [9]. N. Bouarissa, H. Algarni, O. A. Al-Hagan, M. A. Khan, T. F. Alhuwaymel. *Optik*. 170(2018)37-42
- [10]. N. M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [11]. T. S. Moss, *Proc. Phys. Soc. B* 63 (1950) 167.
- [12]. N. M. Ravindra, V. K. Srivastava, *Infrared Phys.* 19 (1979) 603.
- [13]. V. P. Gupta, N. M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715.
- [14]. P. Hervé, L. K. J. Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [15]. R. R. Reddy, S. Anjaneyulu, *Phys. Stat. Sol. (b)* 174 (1992) K 91.
- [16]. N. M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [17]. R. R. Reddy, Y. N. Ahmed, *Infrared Phys. Technol.* 36 (1995) 825.
- [18]. C. Kittel, « *Physique de l'état solide* », Ed. Dunod université (1983).

## Conclusion générale

Le présent travail est réalisé dans le cadre de l'étude des propriétés structurales électroniques, optiques et diélectriques de l'alliage quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ . La méthode utilisée est celle du pseudo potentiel empirique local (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA).

Nos résultats ont montré que pour la alliage quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ , tous les gaps d'énergie étudiés varient de façon non monotone et non linéaire avec la composition  $x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ), Les résultats suggèrent que l'alliage quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  a un gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  pour toutes les compositions  $x$ , et que sa valeur varie de 0.18111 eV à 1.50455 eV chaque fois que  $x$  varie de 0 à 1, et que son écart est considérable par rapport aux gaps  $E_{\Gamma}^X$  et  $E_{\Gamma}^L$  et qu'aucune transition de gaps n'est remarquée.

L'indice de réfraction a été calculé selon six modèles empiriques. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition  $x$  pour l'alliage semi-conducteur quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  présente un comportement non monotone et non linéaire pour tous les modèles utilisés. Cependant, il faut noter que les résultats prouvés par le modèle de Hervé et Vandamme. donne des meilleures valeurs qui sont en bon accord avec des autres travaux comparativement avec les autres modèles.

Les constantes diélectriques statique et haute fréquence aussi calculés pour six modèles, les valeurs de  $\epsilon_{\infty}$  et  $\epsilon_0$  dépend du modèle utilisé, il existe une différence quantitative entre les différents modèles mais pas qualitative, quelque soit le modèle utilisé, leur comportement en fonction de la composition  $x$  est le même, non monotone et non linéaire.

En raison du manque des données dans la littérature de l'indice de réfraction  $n$  et des constantes diélectriques statique et de haute fréquences du  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  pour l'intervalle de composition  $x$  ( $0 < x < 1$ ), les présents résultats seront donc des prédictions.

L'accord de nos résultats avec les données théoriques et expérimentales est bon sauf pour les composés ( $x=0, x=1$ ) pour le reste des concentrations et par manque de références, nous résultats sont prédictions

Le contrôle de ces paramètres en faisant varier la composition  $x$  pour l'alliage Quasi-binaire  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  est d'une importance capitale pour la conception de nouveaux dispositifs optoélectroniques

الملخص :

في هذا العمل قمنا بدراسة نظرية للخصائص الإلكترونية، البصرية والعازلة لسبائك انصاف النواقل الشبه الثنائية  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  التي هي جزء من فئة جديدة من اشباه الموصلات. تعتمد حساباتنا اساسا على طريقة شبه الكمون التجريبي المحلي (EPM) المقرون بتقريب البلورة الافتراضية VCA

النتائج المحصل عليها لنطاق المباشر وغير مباشر ، بنيات عصابات الطاقة، مؤشر الانكسار و ثواب العزل الساكنة للسبائك الشبه ثنائية  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  المبلورة في النظام Zinc blend الموافقة الى حد ما المعطيات لتجريبية و النظرية الموجودة و نتائج أخرى تعتبر توقعات لعدم وجود البيانات.

## Résumé

Nous rapportons dans ce travail une étude théorique des propriétés électroniques, optiques et diélectriques de alliages semiconducteurs quasi binaires  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  qui font partie d'une nouvelle classe de semi-conducteurs.

Les calculs sont principalement basés sur l'approche du pseudo-potentiel empirique (EPM) avec l'approximation du cristal virtuel VCA.

Nos résultats, pour les gaps directs et indirects, les structures de bandes , l'indice de réfraction et les constantes diélectriques statique et de haute fréquence des alliages quasibinaires  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  cristallisant dans la phase zinc-blende, sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles. Et des prévisions pour d'autres par manque de données.

## Abstract

In this work, we report a theoretical study of electronic, optical and dielectric properties of the quasi binary semiconductor alloys  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  which are part of a new class of semiconductors .

Our calculations are based on the empirical pseudopotential method (EPM) combined with the virtual crystal approximation (VCA).

Our results for direct and indirect gaps, band structures, the refractive index and static dielectric constants and high frequency of the quasi-binary alloys  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$  crystallizing in zinc-blende phase are in very good agreement with available experimental and theoretical results., And forecasts for other due to lack of data.