

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° :PH/MAT/10/2021 /2021



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique des Matériaux

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Djebblahi Rima

Intitulé

**Etude des propriétés électroniques et optiques
des alliages ternaires**

Soutenu le 12 / 09 /2021 devant le jury composé de:

Fetah Sabah	Université de M'sila	Président
Mezrag Fadila	Université de M'sila	Rapporteur
Megag Nafissa	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2020/2021

Remerciement

Tout d'abord, nous remercions Dieu Tout-Puissant de m'avoir donné la santé, la volonté et la patience qu'il nous a données tout au long de nos études.

Nous adressons nos sincères remerciements à Mme Mezrag Fadila, notre instigatrice de ce travail, pour ses conseils pertinents, ses orientations avisées, sa patience et sa diligence, et ses suggestions pour faciliter grandement ce travail.

Notre plus profonde gratitude à tous les enseignants du Département des sciences des matériaux, qui les ont encouragés à donner le meilleur d'eux-mêmes en nous assurant la meilleure formation possible, et en particulier nous remercions chaleureusement toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail.

Enfin, nos chers parents et familles, bien

Surtout, vous trouverez ici l'expression de nos remerciements les plus sincères et les plus sincères pour leur sacrifice, leur aide, leur soutien et leurs encouragements afin de nous offrir cette formation dans les meilleures conditions.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail

*A celle qui a attendu avec impatience les fruits
de sa bonne éducation ... ma chère mère.*

*A celui m'a indiqué la bonne voie en me
rappelant*

*Que la volonté fait toujours les grandes
personnes Mon cher père.*

A tous mes chères sœurs et frères.

A tous ma famille.

*Pour tous ceux qui ont fait pour que je puisse
les honorer.*

A tous mes amis et mes collègues.

*A tous les enseignants du département de
sciences de la matière*

Sommaire

1.1 Introduction general.....	1
-------------------------------	---

CHAPITRE 01 Propriétés physiques des semi-conducteurs

1.1 Introduction.....	4
1.2 Définition d'un semi-conducteur.....	4
1.2.1 Différents types de Semi conducteurs	4
a- Semi-conducteur intrinsèque	4
b- Semi-conducteur extrinsèque	4
1.3 Les Propriétés physique des Semi-conducteurs	5
1.3.1 Propriétés structurales	5
1.3.1.1 Semi-conducteurs cristallins	6
1.3.1.2 Les semi-conducteurs non cristallins.....	6
1.3.2 Propriétés Electroniques	7
1.3.2.1 Gap direct et gap indirect	7
1.3.2.2 Transitions inter bandes	7
1.4 Structure de bande :	9
1.5 Propriétés Optiques.....	10
1.5.1 L'indice de réfraction.....	11
1.6 Propriétés diélectriques:.....	11
1.6.1 Constante diélectrique à haute fréquence:	11
1.7 Applications des semi conducteurs	12
1.7.1 Sources de la lumière.....	12
a- Diodes électroluminescentes	12
b- Lasers	12
c- Photovoltaïque	12

d- Biologie	13
1.8 Conclusion	13
Références Bibliographiques	14

CHAPITRE 02 Théorie des alliages semi-conducteurs

2.1 Introduction	15
2.2 Les composés semi-conducteurs III-V	15
2.3 Les alliages ternaires.....	17
2.3.1 Définition des Alliages:	17
2.3.2. Propriétés physiques :.....	18
2.3.3. Constante du réseau de l'alliage ternaire :	19
2.3.4 Gaps d'énergie de l'alliage ternaire	19
2.4 Les alliages quaternaires	20
2.5 L'approximation du cristal virtuel (VCA).....	20
2.5.1 Cas d'un alliage ternaire II-VI.....	20
2.6 L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).....	21
2.5 Conclusion	21
Références Bibliographiques	22

CHAPITRE 03 Synthèse sur l'étude des propriétés électroniques et optiques de quelques alliages ternaires semi-conducteurs

3.1 Introduction	23
3.2 L'alliage ternaire $GaAs_xSb_{1-x}$	24
3.3 L'alliage ternaire $Cd_{1-x}Zn_xSe$	27
3.3.1 Gaps énergétiques.....	28
3.3.2 Les propriétés optiques (Indice de réfraction)	29
3.4 L'alliage ternaire AlP_xSb_{1-x}	32
3.4.1 Paramètre de maille	33

3.1 Introduction.....	23
3.2 L'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$	24
3.3 L'alliage ternaire $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Se}$	27
3.3.1 Gaps énergétiques.....	28
3.3.2 Les propriétés optiques (Indice de réfraction)	29
3.4 L'alliage ternaire $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$	32
3.4.1 Paramètre de maille.....	33
3.4.2 Structure de bandes électronique	34
3.4.3 Gaps énergétiques	36
3.5 Etude des propriétés optiques	40
3.5.1 Indice de réfraction.....	40
3.6 L'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$	42
3.7 L'alliage ternaire ZnSSe et ZnBeTe	45
3.7.1 Propriétés optiques	46
3.7.2 Propriétés électroniques des alliages ZnSSe et ZnBeTe	47
3.7.1.1 Propriétés diélectriques du $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$	49
Références Bibliographiques	52
Conclusion générale	56

Liste des figures

Figure 1.1. Maille élémentaire de la structure Zinc Blende du composé binaire AlSb **page 6**

Figure 1.2. Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel **page 7**

Figure 1.3. Transitions inter bandes a) Gap directe b) Gap indirecte [9] **page 9**

Figure 1.4. Représentation simple de la structure de bande d'un semi-conducteur massif (en fonction du vecteur d'onde k et en ne tenant compte que des niveaux s et p) **page 10**

Figure 1.5. Bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents semi-conducteur **page 10**

Figure 3.1. Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la concentration molaire x du As dans l'alliage ternaire $GaAs_xSb_{1-x}$ calculés sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel **page 26**

Figure 3.2. Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la concentration molaire x du As dans l'alliage ternaire $GaAs_xSb_{1-x}$ calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel. **Page 26**

Figure 3.3. La variation du gap direct ($\Gamma - \Gamma$) et ceux des gaps indirects ($\Gamma - X$) et ($\Gamma - L$) en fonction de la concentration x en zinc de l'alliage semi-conducteur $Cd_{1-x}Zn_xSe$ **page 29**

Figure 3.4. La variation de l'indice de réfraction n du $Cd_{1-x}Zn_xSe$ en fonction de la concentration x du zinc pour les trois modèles. **Page 32**

Figure 3.5. Structure de bande électronique du composé binaire AlSb **page 35**

Figure 3.6. Structure de bande électronique du composé binaire AlP **page 35**

Figure 3.7. Structure de bande électronique de l'alliage ternaire $AlP_{0,5}Sb_{0,5}$ **page 36**

Figure 3.8. Variation du gap d'énergie direct $E(\Gamma - \Gamma)$ en fonction de la composition x avec Et sans désordre (rouge) del'alliage ternaire AlP_xSb_{1-x} **page 37**

Figure 3.9. Variation des gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects et E_{Γ}^X et E_{Γ}^L en fonction composition x sans désordre de l'alliage ternaire AlP_xSb_{1-x} **page 38**

Figure 3.10. Variation des gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects et E_{Γ}^X et E_{Γ}^L en fonction de la composition x avec désordre de l'alliage ternaire AlP_xSb_{1-x} **page 39**

Figure 3.11. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x de l'alliage ternaire AlP_xSb_{1-x} **page 41**

Figure 3.12. Gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ en fonction de la teneur en S, sans désordre (courbe en trait plein) et avec désordre (courbe en pointillé rouge). dans $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ **page 43**

Figure 3.13. Énergies de Gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ et indirect $E(\Gamma-X)$ et $E(\Gamma-L)$ dans $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ en fonction de la teneur en S, calculée avec désordre **page 44**

Figure 3.14. Les bandes interdites en fonction de la composition en soufre à Points X et L dans le zinc- blende $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ calculés sans désordre compositionnel (ligne continue) et au point Γ calculé en tenant compte de l'effet de désordre dû à la composition (lignes pointillées). **page 48**

Figure 3.15. Les bandes interdites en fonction de la composition du béryllium x au point Γ et X pour le $\text{Zn}_{1-x}\text{Be}_x\text{Te}$ calculés sans désordre compositionnel (trait plein) et avec désordre compositionnel (traits pointillés). Nous avons également rapporté des résultats expérimentaux à X (triangle). [61]

- Tableau 2.1.** extrait de la classification périodique de Mendeleïev des composés semiconducteurs **page 16**
- Tableau 2.2.** Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K [4, 5] **page 17**
- Tableau 3.1.** Gaps énergétiques des composés zinc-blende GaSb et GaAs. **page 25**
- Tableau 3.2.** Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs GaSb et GaAs dans la phase zinc-blende ainsi que les constantes du réseau a en (Å). **page 25**
- Tableau 3.3.** Calcul des gaps d'énergies de l'alliage $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ pour différentes Compositions x . **page 27**
- Tableau 3.4.** Les paramètres pseudo potentiels du CdSe et ZnSe. **page 28**
- Tableau 3.5.** Gaps d'énergie pour CdSe et ZnSe utilisés dans l'ajustement des facteurs de formes. (Les valeurs expérimentales sont données à température ambiante). **page 28**
- Tableau 3.6.** Les indices de réfraction du CdSe, ZnSe et $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Se}$ ($0 < x < 1$), comparés aux donnés théoriques. **page 31**
- Tableau 3.7.** Les facteurs de formes symétriques (V_s) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des composés binaires semi-conducteurs AlSb et AlP et leurs paramètres de réseaux. **page 32**
- Tableau 3.8.** Gaps d'énergies calculés et expérimentaux des composés binaires semi-conducteurs AlSb et AlP. **page 33**
- Tableau 3.9.** Paramètres de réseau de l'alliage semi-conducteur $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$. **page 33**
- Tableau 3.10.** Indice de réfraction (n) des semi-conducteurs AlSb, et $\text{AlP}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ AlP en utilisant différents modèles. **page 40**
- Tableau 3.11.** Bandes interdites d'énergie fixées dans les ajustements pour CdS et CdTe. **page 42**
- Tableau 3.12.** Paramètres de pseudo potentiel pour CdS et CdTe **page 43**
- Tableau 3.13.** Facteurs de forme pseudo-potentiels et constantes de réseau pour le mélange de zinc ZnSe, ZnS, ZnTe et BeTe.. **page 45**
- Tableau 3.14.** Gaps d'énergies calculés et expérimentaux des composés binaires semiconducteurs , ZnSe ZnS, ZnTe et BeTe **page 46**
- Tableau 3.15.** Constante diélectrique haute fréquence (ϵ_∞) pour le $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ **page 49**
- Tableau 3.16.** Constante diélectrique haute fréquence (ϵ_∞) pour le $\text{Zn}_{1-x}\text{Be}_x\text{Te}$ **page 51**



Introduction générale

Introduction générale

Les composés semiconducteurs 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. [1]

En revanche les matériaux à base d'alliages semiconducteurs (ternaires ou quaternaires..) sont d'intérêt pratique dans la technologie actuelle de l'optronique ; ils permettent l'élaboration des détecteurs et des émetteurs fonctionnant dans une gamme de longueur d'onde choisie, on peut, en jouant sur la composition de l'alliage, couvrir un grand intervalle de l'énergie du gap. [2]

Des travaux récents et en pleine expansion traitent les propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires. 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 valeurs des paramètres voulus selon l'application donnée [3].

Le travail présenté porte sur une synthèse concernant l'étude des propriétés électroniques et optiques d'un certain nombre d'alliages ternaires semiconducteurs III-V et II-VI par la méthode des pseudopotentiels du type local. Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides. En effet, elle a couvert plusieurs applications.

Du côté théorique, les méthodes de calcul de la structure électronique peuvent fournir des données complémentaires importantes au travail expérimental. Les calculs du premier principe, basés sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT), ont fait preuve dans plusieurs cas de leur utilité, pour comprendre la stabilité et la transition de phase structurale des composés semiconducteurs en calculant l'énergie totale [4, 5].

Cependant, ces méthodes nécessitent techniquement un temps considérable de traitement. D'ailleurs, elles sous-estiment le calcul du gap [6] qui est fortement lié aux paramètres optiques et diélectriques. Par analogie, les méthodes du pseudopotentiel empiriques (EPM), couplées à la VCA, en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel sont plus simples, donnant des résultats précis par rapport au temps de calcul et permettant d'obtenir la structure de bandes des alliages [7, 8].

L'étude utilise la méthode du pseudopotentiel empirique local et inclut l'effet du désordre par l'introduction d'un potentiel effectif du désordre dans l'approximation du

cristal virtuel VCA. Pour pouvoir expliquer les propriétés de ces alliages, après avoir résolu l'équation de Schrödinger, déterminé les énergies et les fonctions d'ondes. Les valeurs des énergies ont été utilisées pour la détermination de la structure de bandes des composés semi-conducteurs, tandis que les coefficients des fonctions d'ondes ont été pour le calcul de la densité de charge. [9]

Pour ce faire, nous avons subdivisé ce manuscrit en trois chapitres: Après une introduction générale, dans le premier chapitre sera présentés les propriétés physiques des semiconducteurs. Dans le deuxième chapitre nous essayerons de donner des notions sur la théorie des alliages semiconducteurs.

Enfin nous présentons au dernier chapitre une synthèse sur l'étude des propriétés électroniques et optiques de quelques alliages ternaires semiconducteurs et les résultats obtenus par un certain nombre de travaux de recherche qui ont étudié les propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires à base de semiconducteurs III-V et II-VI.

Finalement, nous terminerons par une conclusion générale.

Références Bibliographiques de l'introduction générale

- [1] Benatmane Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V. Mémoire de magister. Université de Batna, (2011).
- [2] G. Roosen, « Matériaux semiconducteurs III-V, II-VI et nitrures pour l'optoélectronique », Ed. Hermes Science (2003).
- [3] KARA MOHAMED Wahiba, Thèse de doctorat Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [4] S. Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors », Wiley, Chichester, 2005.
- [5] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 2 (1993) 7.
- [6] A. Bechiri, N. Bouarissa, Superlatt. Microstruct. 39 (2006) 478.
- [7] Y.P. Feng, K.L.Teo, M.F.Li, H.C. Poon, C.K. Ong, J.B. Xia, J. Appl.Phys. 74 (1993) 3948
- [8] K.L.Teo, Y.P. Feng, M.F.Li, T.C. Chong, J.B.Xia, Semicond. Sci. Technol. 9 (1994) 349.
- [9] Abderrachid BECHIRI, Effet du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs Thèse de doctorat d'état , , Université de Constantine 2006



**CHAPITRE 01 : Propriétés physiques des
semi-conducteurs**

Chapitre1 Propriétés physiques des semiconducteurs

1.1 Introduction

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

On différencie trois types de matériaux : les isolants, les conducteurs et les semiconducteurs. Ces derniers sont intermédiaires entre les métaux et les isolants : à $T = 0$ K.

Un semiconducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semiconducteurs varie entre $10^{-3} \Omega\text{cm}$ et $10^9 \Omega\text{cm}$, alors que celle des métaux est de l'ordre de $10^{-6} \Omega\text{cm}$ et celle des isolants peut atteindre $10^{22} \Omega\text{cm}$.

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19^{ème} siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Dans un semiconducteur il existe deux types de conduction : la conduction par électrons et la conduction par trou [1].

1.2 Définition d'un semiconducteur

Un semiconducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductivité électrique sont intermédiaires entre celles des isolants et des conducteurs, elles varient sur plusieurs ordres de grandeur, sous l'effet de :

- La température,
- La présence d'impuretés (dopage) [2].

1.2 .1 Différents types de semiconducteurs

a- Semiconducteur intrinsèque

Un semiconducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour 10^{13} atomes de l'élément semiconducteur).

b- Semi-conducteur extrinsèque

Un semi-conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semi-conducteur intrinsèque (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semiconducteur)

Selon la nature des impuretés il existe deux types des semi-conducteurs : 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 à un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semiconducteur est dit de type n.

- **Type p** : Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (Bore Aluminium ou Galium). Celui-ci ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semiconducteur est dit de type p [3].

1.3 Les Propriétés physique des semiconducteurs

1.3.1 Propriétés structurales

L'immense majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques ou optoélectroniques sont basés sur la même structure cristalline, celle de diamant (*Si*, *Ge*) ou la structure Zinc blende (*GaAs*, *AlP*). Cette structure est présentée sur la figure ci-dessous [4].

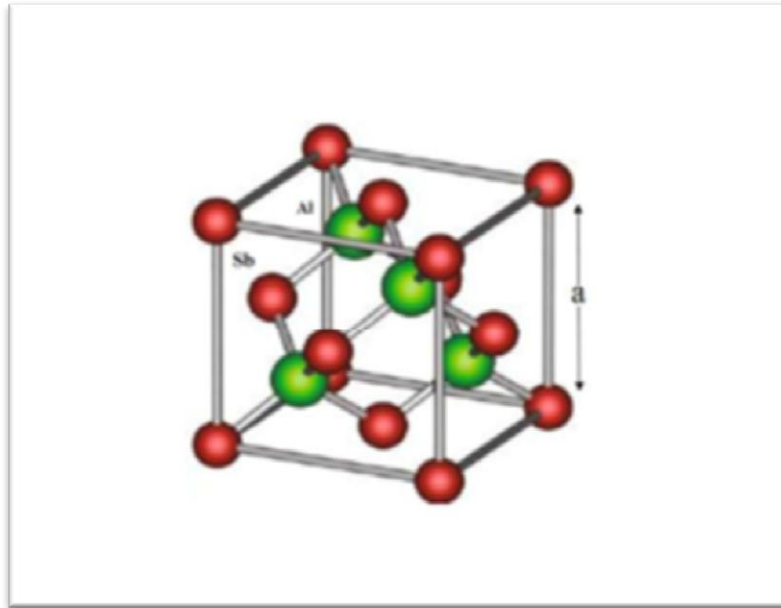


Figure 1.1. Maille élémentaire de la structure Zinc Blende du composé binaire AlSb

1.3.1.1 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 [5].

- **La constante de réseau**

C'est une grandeur utilisée pour d'écrire la maille d'un cristal, la maille cristalline est définie par trois paramètres a , b , c et par trois angles α , β , λ qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (1.2). Suivant les valeurs relatives de ces six grandeurs on définit les différentes structures cristallines [6].

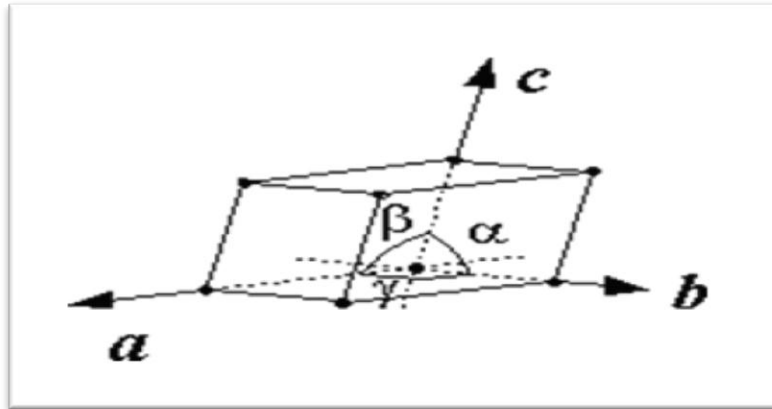


Figure 1.2. Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

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.

1.3.1.2 Les semiconducteurs non cristallins

Des propriétés semiconductrices existent même dans des structures non cristallines en cours d'étude, certains matériaux sont promis à un avenir industriel tels que :

- Silicium amorphe,
- Polymères semi-conducteurs,
- Verres semi-conducteurs,
- Semi-conducteurs organiques.

La détermination de toute structure cristalline est principalement basée sur l'utilisation des techniques optiques telles que, la diffraction des rayons x des photons, des neutrons et des électrons. Cette diffraction dépend elle-même de la structure cristalline et de la longueur d'onde de la radiation [7].

1.3.2 Propriétés Electroniques

1.3.2.1 Gap direct et gap indirect

- Gap direct

Un semiconducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le

minimum de la bande conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde \mathbf{K} .

- **Gap indirect**

Un semiconducteur est 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 \mathbf{K} . La distinction entre les semiconducteurs 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 semiconducteurs à gap indirect [8].

1.3.2.2 Transitions inter bandes

Au sein d'un semiconducteur on différencie les transitions radiatives de celles qui sont non radiatives. Les transitions radiatives dites inter-bande sont à leur tour classifiées selon la configuration des bandes du semiconducteur en transitions directes et indirectes (avec intervention d'un phonon) [9] :

- **les transitions directes ou verticales**

Dans le processus d'absorption directe, un photon est absorbé par le cristal avec création d'un électron et d'un trou. Comme le minimum de la bande de conduction est à la même valeur de $\vec{\mathbf{K}}$ que le maximum de la bande de valence (figure 1.3.a), la transition optique a lieu sans changement significatif de $\vec{\mathbf{K}}$, car le photon absorbé a un très petit vecteur d'onde. Ces transitions sont très efficaces dans le cas des semiconducteurs à gap direct.

- **Les transitions indirectes**

Dans le processus d'absorption indirecte la largeur minimale de la bande interdite fait intervenir des électrons et des trous séparés par un vecteur d'onde non négligeable (figure 1.3.b). Dans ce cas une transition directe correspondant à la largeur minimale de la bande interdite ne peut satisfaire à la condition de conservation du vecteur d'onde; ce processus fait intervenir en plus de l'électron et du photon, un phonon. Si un phonon de vecteur d'onde $\vec{\mathbf{K}}$ et de fréquence Ω est créé par ce processus, alors nous avons d'après les lois de conservation :

$$\vec{\mathbf{K}}(\text{photon}) = \vec{\mathbf{K}}_e + \vec{\mathbf{K}} \sim 0 \quad \mathbf{1-1}$$

et

$$h\nu_e - E_p = E_g \text{ (Émission de phonon d'énergie } E_p = \hbar\Omega) \quad \text{1-2}$$

ou

$$h\nu_a - E_p = E_g \text{ (Absorption de phonon)} \quad \text{1-3}$$

L'énergie du phonon est, en général, bien inférieure à E_g (0,01 à 0,03 eV). Dans ce processus d'absorption, un photon est absorbé avec création de trois particules: un électron, un trou et un phonon; ce type de processus est moins probable que celui de l'absorption directe.

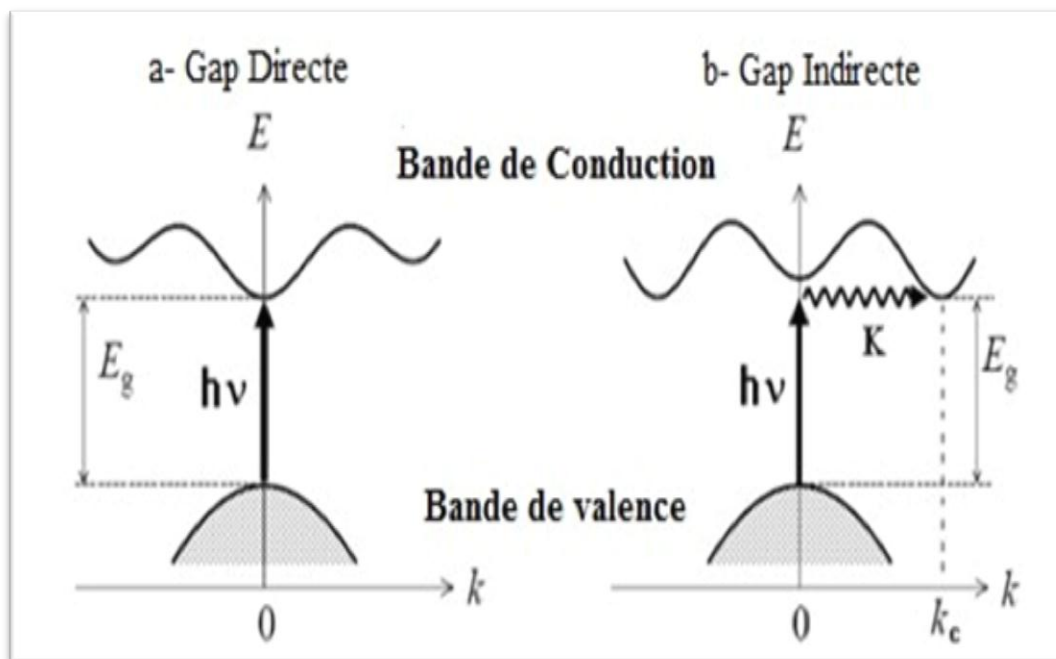


Figure 1.3. Transitions inter bandes a) Gap directe b) Gap indirecte [9]

1.4 Structure de bande :

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leurs vecteurs d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bande de conduction la plus haute, la bande de valence la plus basse, et la bande interdite qui les sépare qui détermine principalement les propriétés de transport du semiconducteur [10].

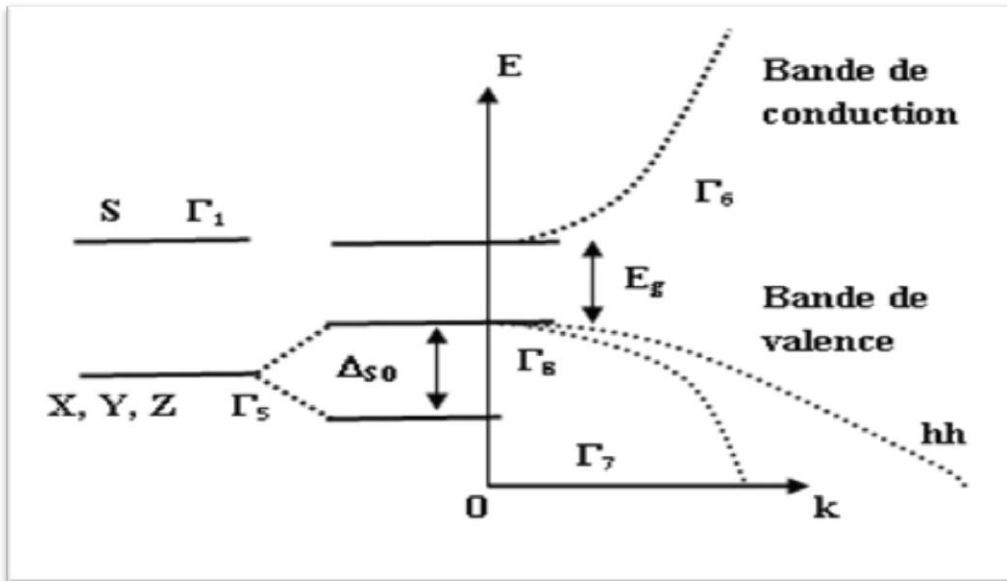


Figure 1.4. Représentation simple de la structure de bande d'un semi-conducteur massif (en fonction du vecteur d'onde k et en ne tenant compte que des niveaux s et p).

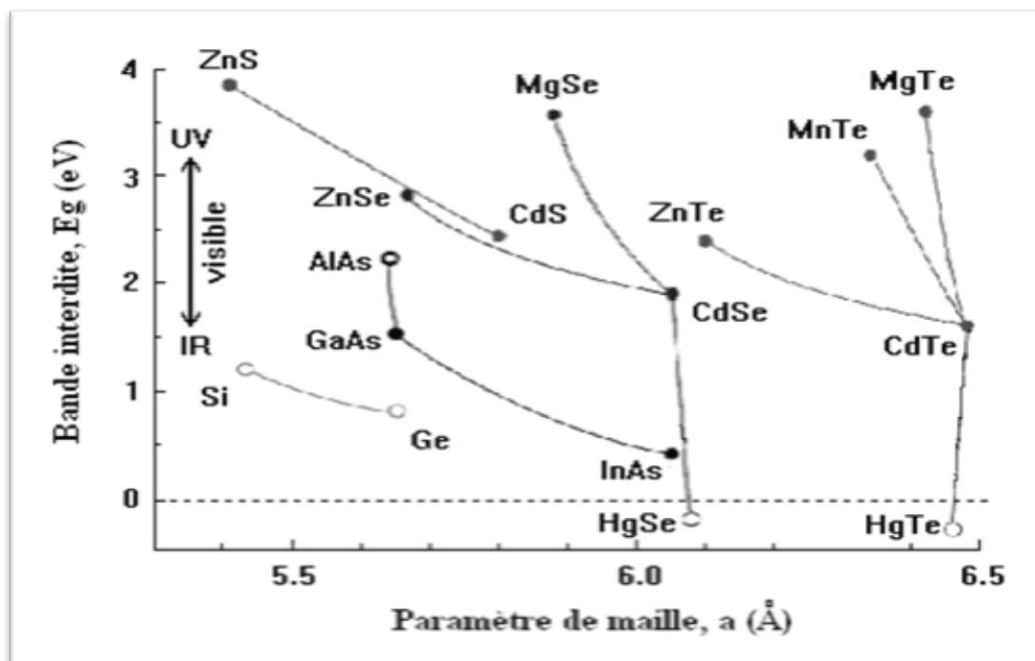


Figure 1.5. Bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents semiconducteurs

1.5 Propriétés Optiques

La matière est formée d'atomes, souvent regroupés par molécules. L'interaction entre la matière et une onde électromagnétique incidente met en jeu l'excitation des nuages

électroniques des atomes. Une description rigoureuse de l'interaction entre le champ électromagnétique et les atomes ou molécules nécessite le formalisme de la mécanique quantique. [11 , 12].

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 de rayonnement.

Un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon, c'est l'émission spontanée. Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs de 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 émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semiconducteur. [13]

1.5.1 L'indice de réfraction

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

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques, les fibres optiques ...etc. [14]

1.6 Propriétés diélectriques:

Les constantes diélectriques montrent la relation qui relie la polarisation diélectrique et le champ macroscopique induit dans le matériau. La contribution à la polarisabilité est électronique, ionique et dipolaire. La contribution électronique provient du déplacement des couches électroniques par rapport au noyau. La partie ionique résulte du déplacement d'un ion chargé par rapport aux autres ions. La polarisabilité dipolaire provient des moments dipolaires électriques permanents dans les molécules. Dans le domaine des fréquences optiques, le constant diélectrique provient pratiquement de la polarisation électronique.

1.6.1 Constante diélectrique à haute fréquence

Elle est donnée par:

$$\epsilon_{\infty} = n^2$$

1-4

n : l'indice de réfraction.

1.7 Applications des semi conducteurs

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

1.7.1 Sources de la lumière

a- Diodes électroluminescentes

Les propriétés de fluorescence des semi conducteurs 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.

b- Lasers

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

c- 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 [15] 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 [16]. L'absorption de la lumière est assurée par un colorant (S) bien choisi adsorbé chimiquement à la surface d'un semiconducteur nanocristallin de TiO₂.

d- 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 nano agrégats 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 [17].

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 nucléique (ADN, ARN). Cette aptitude provient des ligands qui servent à faire des ponts entre les points quantiques et le milieu environnant.

À 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 photo destruction [18].

1-8 Conclusion

De nombreux efforts sont consacrés à la compréhension des propriétés fondamentales des matériaux semiconducteurs soumis à une interaction optique ou électrique. Ces propriétés sont essentiellement optiques, structurales et diélectriques.

Cependant, la connaissance de ces propriétés représente un intérêt fondamental dans la détermination des structures électroniques et atomiques de ces semiconducteurs et par la suite l'évaluation de leurs paramètres physiques, ce qui permet ainsi leurs caractérisation.

La maîtrise de ces paramètres physiques rende ces matériaux d'un potentiel technologique, ils sont très exploitables surtout en photonique et en optoélectronique.

Références Bibliographiques Chapitre 1

- [1]. Z. Liu, M. Osamura, T. Ootsuka, R. Kuroda, Y. Fukuzawa, N. Ootogawa, et al., Effect of a Fe_3Si buffer layer for the growth of semiconducting $\beta\text{-FeSi}_2$ thin film on stainless steel substrate, *J. of Crystal Growth* 307 (2007) 82-86.
- [2]. E. Mooser, « introduction à la physique du solide, 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [3]. Badr-Eddine Nabil BRAHMI Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc
- [4] Beiser A. Physique Appliquée : Cours et Problèmes. McGrawHill, série Schaum.
- [5]. H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électronique », 4 Ed. Masson (1998).
- [6]. E. Mooser, « Introduction à la Physique du solide », 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [7]. C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod Université (1983).
- [8]. K. Hacni, These, Etude des propriétés structurales et électroniques des alliages quaternaires $\text{Zn}_{1-x}\text{Be}_x\text{S}_y\text{Se}_{1-y}$ par la méthode FP-LAPW(2012)
- [9]. S. Armstrong, P.K. Datta, R.W. Miles, Thermal Evaporation of $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ for application in thin film solar cells, in: Proceedings of 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference, 2001, p. 1184.
- [10]. K. Nakanishi, I. Suemune, Y. Fuji, Y. Kuroda, M. Yamanishi, High output power (> 20 W) and high quantum efficiency in a photopumped ZnSe/ZnSSe blue laser operating at room temperature, *Jpn. J. Appl. Phys.* 30(1991) 1399-1401.
- [11]. N. M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Energy gap-refractive index relations in semiconductors –an overview. *Infrared Phys Technol* (2007) :50 :21-9.
- [12]. S. Adachi, Properties of Group IV III–V and II–VI Semiconductors, Wiley, Chichester, 2005.
- [13]. M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.
- [14]. <http://ebookbrowse.com/ele101-cnam-7-2008> dispositifs optoélectroniques.
- [15]. F. Boutaiba, A. Zaoui, M. Ferhat, *Superlat. Microst.* 46 (2009) 823.
- [16]. D. Mesri, Z. Dridi, A. Tadjer, *Computational Materials Science* 39 (2007) 453.
- [17]. H. Okuyama, Y. Kishita, A. Ishibashi, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 2257.
- [18]. F. El Haj Hassan, A. Breidi, S. Ghemid, B. Amrani, H. Meradji and O. Pagès, J.



**CHATITRE 02 : Théorie des alliages
semi-conducteurs**

Chapitre 2 Théorie des alliages semiconducteurs

2.1 Introduction

Les alliages semiconducteurs sont des matériaux qui donnent la possibilité de moduler l'amplitude du gap et d'autres paramètres physiques du matériau, afin d'optimiser et d'élargir leurs applications microélectroniques et optoélectroniques.

La technologie actuelle s'intéresse beaucoup à cette famille de matériaux, c'est la raison pour laquelle la théorie des alliages est devenue un sujet de recherche important. Plus récemment, des études avancées sur une nouvelle classe des alliages binaires, ternaires et quaternaires ont été élaborées vu leurs propriétés structurales et électroniques importantes en vue de la fabrication des dispositifs optoélectroniques qui présentent des performances exceptionnelles, malgré une densité de dislocations très élevée ($> 10^{18} \text{ cm}^{-1}$).

2.2 Les composés semiconducteurs III-V

Après les spectaculaires résultats enregistrés dans la technologie Silicium dans le domaine de la microélectronique, la recherche de composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

C'est alors qu'une nouvelle classe de matériaux fait son apparition, basés sur la création d'un potentiel dans un cristal par:

- La modulation de dopage.
- La variation de composition d'un alliage.
- La combinaison des deux méthodes précédentes.

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III^e colonne et d'un élément de la V^e colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau 2.1 regroupe un extrait de cette classification (les

chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés. [1]

Tableau 2.1 extrait de la classification périodique de Mendeleïev des composés semiconducteurs.

II	III	IV	V	VI
Zn	Al	Si	P	S
Cd	Ga	Ge	As	Se
	In	α -Sn	Sb	Te
<div style="border: 1px solid black; padding: 10px; margin: 10px auto; width: 80%;"> <p>Semiconducteurs élémentaires groupe IV.</p> <p>Chaque III avec chaque V.</p> <p>Semiconducteurs III-V</p> </div>				

Chaque II avec chaque VI : Semi-conducteur II-VI

On peut construire des matériaux semi-conducteurs III-V, tels que en associant des éléments de la colonne III et des éléments de la colonne V de la classification périodiques de Mendeleïev à raison de un atome de la colonne III pour un atome de la colonne V, comme on peut réaliser ainsi des semi-conducteurs composés III-V :

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 [2], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [3]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le Thallium ou le Bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau 2.2 résume quelques

paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Tableau. 2.2. Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K [4, 5]

Binaires III-V	Eg eV)	m^*/m_0	μ (cm ² /VS)	a (A°)
BN	7,5			3,6150
AlP	2,45			5,4510
AlAs	2,16			5,6605
AlSb	1,58	0,12	200	6,1355
BP	2,0			4,5380
GaN	3,36	0,19	380	3,189
GaP	2,26	0,82	110	5,4512
GaAs	1,42	0,067	8500	5,6533
GaSb	0,72	0,042	5000	6,0959
InP	1,35	0,077	4600	5,8686
InAs	0,36	0,023	33000	6,0584
InSb	0,17	0,0145	80000	6,4794

2.3 Les alliages ternaires

2.3.1 Définition des Alliages:

Le terme alliage désigne un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux, ce terme était réservé durant une bonne période aux métaux, cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux. Le développement rapide des techniques de la croissance cristalline a permis la réalisation de plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires. Un alliage est un matériau qui offre la possibilité de moduler l'amplitude du gap et d'autres paramètres physiques afin de mieux optimiser et étendre le domaine d'application, il s'est avéré qu'en combinant deux semi-conducteurs, on peut alors trouver un nouveau semi-conducteur dont on peut faire varier ces paramètres électroniques et optiques en fonction du pourcentage de concentration de l'un en fonction de ces composés et d'autres paramètres qui modifient la structure de l'alliage .

Effectivement, les progrès établis par les chimistes, les physiciens des matériaux et les technologues ont contribué d'une manière efficace à l'étude et à la fabrication de nouveaux matériaux en utilisant les alliages semi-conducteurs II-VI.

Les alliages semi-conducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant le nombre de constituants [6] :

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

AgCl, CuBr, KBr, LiF, ...

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

$A^{III} B^V$: les antimoniures, les arséniures, les phosphures, et les nitrures 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, Cu₂O,

Lorsque les éléments binaires $A_N B_{8-N}$ et $A_N C_{8-N}$ sont associés, l'alliage formé peut être soit :

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

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

Ces alliages sont caractérisés par la présence du coefficient stœchiométrique x.

2.3.2 Propriétés physiques :

Soit deux paires AC et BC appartenant à la même classe d'octets iso structuraux AC et BC sont des III-V, II-VI ou I-VII). Les propriétés physiques peuvent être représentées par une interpolation analytique simple des propriétés de ces constituants AC et BC. Ces propriétés physiques sont notées par $F(A_x B_{1-x} C)$. Et à la base de cette interpolation il a été trouvé que plusieurs propriétés des alliages (pseudo binaires) peuvent être décrites sous la forme linéaire suivante :

$$F(x) = x F_{AC} + (1 - x) F_{BC} \quad \text{2-1}$$

Où

$$F(x) = F(x) + C x (1 - x) \quad \text{2-2}$$

Avec :

F : étant une propriété physique quelconque.

x : fraction moléculaire (paramètre stœchiométrique).

C : est le paramètre de courbure (bowing).

2.3.3 Constante du réseau de l'alliage ternaire :

L'étude expérimentale a fait prouver que la constante du réseau expérimentale obéit à la loi de Vegard à l'exception de certains alliages où très petites déviations ont été observées [7].

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

Notons $a(x)$: La constante du réseau de l'alliage et a_{AC} , a_{BC} les constantes du réseau des composés binaires AC et BC respectivement, la constante du réseau de l'alliage est donnée par :

$$a(x) = a(x) = x a_{AC} + (1 - x) a_{BC} \quad 2-3$$

avec :

a_{AC} : paramètre du réseau du composé binaire AC.

a_{BC} : paramètre du réseau du composé binaire BC. Dans ce cas le paramètre de courbure est nul.

2.2.4 Gaps d'énergie de l'alliage ternaire :

Du fait que le gap d'énergie représente une quantité physique assez importante, l'étude expérimentale la prend toujours en considération et cela du à l'information obtenue par le biais de cette constante sur la structure de bande des alliages semi-conducteurs, donc la théorie elle aussi a fait des progrès pour pouvoir prédire cette donnée à base de ces interpolations analytiques c'est pour cela on trouve que deux approches théoriques expliquant ces données.

Le modèle diélectrique a été utilisé par Van-Vechten et Bergstresser [8] pour prédire la dépendance de la bande interdite dans les alliages, tandis que Jones et Lettington [9] et Richardson [10,11] ont développé un modèle de calcul des structures de bandes pour les alliages en utilisant la méthode du pseudo potentiel.

Un grand intérêt a été accordé aux énergies de la bande interdite des alliages et très spécialement au gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ appelé aussi (E_0), ceci en raison de l'utilisation de ces alliages dans les dispositifs optoélectroniques. La transition $E(\Gamma-\Gamma)$ a lieu au centre

de la zone de Brillouin.

Contrairement à la tendance de la constante du réseau $a(x)$ qui est une moyenne pondérée), on a constaté que les gaps d'énergies deviennent considérablement de la moyenne des gaps d'énergies de ces constituants.

$$E_g(x) = x E_{AC} + (1 - x) E_{BC} \quad 2-4$$

En effet, plusieurs mesures expérimentales de l'énergie $E_g(x)$ peuvent être interpolées sous la forme quadratique suivante:

$$E_g(x) = E_g(x) - C x (1-x) \quad 2-5$$

Où C : est le paramètre de courbure optique.

Les deux équations précédentes montrent que $E_g(x)$ atteint un extremum à la concentration.

2-4 Les alliages quaternaires

Dans le cas d'un alliage quaternaire quadratique $A_{1-x} B_x C_y D_{1-y}$, la constante du réseau est exprimée par :

$$a(x, y) = y(1 - x)a(AC) + (1 - x)(1 - y)a(AD) + xya(BC) + x(1 - y)a(BD) \quad 2-6$$

$a(AC)$, $a(AD)$, $a(BC)$, et $a(BD)$ sont les constants du réseau des composés binaires constituant l'alliage.

Pour les composés quaternaires de la forme triangulaire $:AB_x C_y D_{1-x-y}$

$$a(x, y) = (AB) + ya(AC) + (1 - x - y)a(AD) \quad 2-7$$

2.5 L'approximation du cristal virtuel (VCA)

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

2.5.1 Cas d'un alliage ternaire II-VI

Un semi-conducteur ternaire $A^{II} B^{II} C^{VI}$ est supposé uniforme, cependant, l'effet des fluctuations du à la composition x est inévitable. Le désordre peut être dû à la différence des potentiels intrinsèques des atomes A et B qui se substituent mutuellement sur les sites correspondant aux atomes du groupe V dans la blende. La

différence entre les potentiels intrinsèques des substituant (A et B) se traduit par des distorsions locales et les paramètres du nouveau matériau ainsi obtenu dépendront de l'amplitude de ces distorsions.

2.6 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. 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 pseudo potentiel du système devient :

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

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

avec

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

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

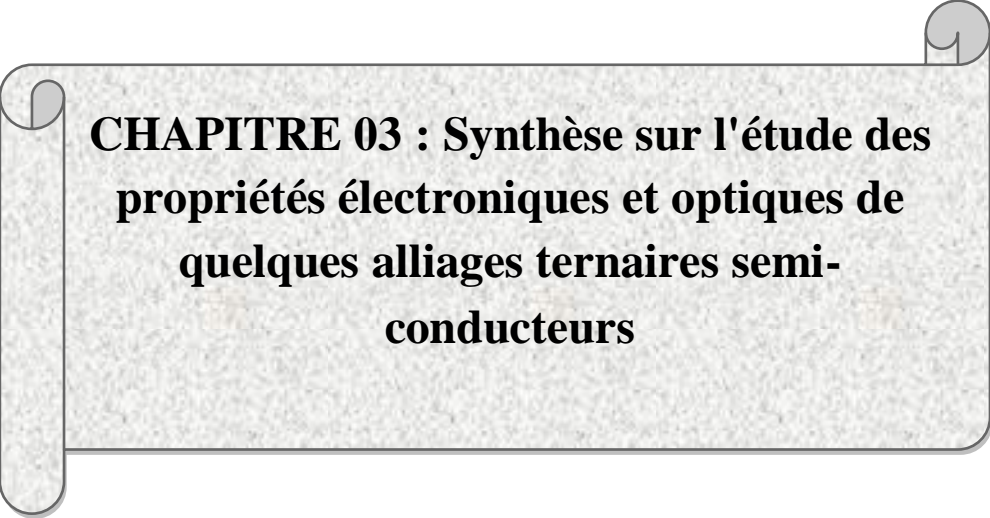
2.7 Conclusion

Les technologies semiconductrices ont connus la plus forte progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement des économies modernes, vus les multiples applications technologique, ils possèdent plusieurs propriétés qui peuvent être mises à profit pour des multiples applications surtout dans le domaine optoélectronique.

Les alliages des composés semi-conducteurs sont aussi considérés comme une classe importante de ces matériaux, grâce à l'ajustement et le contrôle de leurs paramètres physiques en fonction de la composition, permettant ainsi, l'obtention d'un composant optoélectronique aux propriétés désirées.

Références Bibliographiques

- [1] BERBER Mohamed, Thèse de Doctorat, Université Djillali Liabes De Sidi Bel Abbas (2014).
- [2] Henry Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, (Masson, 1987).
- [3] S. M. SZE, Physics of Semiconductor Devices, (John Wiley & Sons, 1981).
- [4] C. Kittel, Introduction a la physique de l'état solide, (Dunode, 1972).
- [5] Gerald Bastard, Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, (Les éditions de physique, 1988).
- [6] P. Kiréev, « La Physique des semiconducteurs », édition Mir, Moscou (1975).
- [7] L. Vegard, Z.Phys. 5, 17 (1921).
- [8] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, Phys. Rev. B1, 3351 (1970).
- [9] D. Richardson, J. Phys.: Solid Stat. Phys. 4, L289 (1971).
- [10] D. Richardson, J. Phys.: Solid Stat. Phys. 5, 27 (1972).
- [11] R. Hill, J. Phys. C.: Solid. Stat. Phys. 7, 521 (1974).



CHAPITRE 03 : Synthèse sur l'étude des propriétés électroniques et optiques de quelques alliages ternaires semi-conducteurs

3.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre c'est de faire une recherche bibliographique sur les propriétés électroniques et optiques de quelques alliages ternaires semi-conducteurs et les résultats obtenus par un certain nombre de travaux de recherche qui ont étudié les propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires à base de semi-conducteurs III-V et II-VI et voir l'effet de la VCA (l'approximation du cristal virtuel) et de la VCA améliorée.

La méthode de pseudo potentiel empirique locale, couplée à l'approximation du cristal virtuel qui introduit l'effet du désordre compositionnel, comme un potentiel effectif sont utilisés pour étudier les propriétés électroniques à savoir, le gap énergétique et la structure de bande électronique et les propriétés optiques tels que l'indice de réfraction ainsi que leur variations en fonction de la concentration x de certains l'alliages ternaires qui ont été l'objet de plusieurs travaux de recherche cités dans ce chapitre.

Le pseudo potentiel est défini comme étant une superposition des pseudos potentiels atomiques de la forme :

$$V_p(r) = V_L(r) + V_{NL}(r) \quad 3-1$$

Où

$V_L(r)$ et $V_{NL}(r)$ sont respectivement les parties locale et non locale.

Dans notre cas nous n'avons considéré que la partie locale.

$$V_p(r) = V_L(r) = \sum_G V(G) S(G) \exp(iGr) \quad 3-2$$

Où

$S(G)$ Est le facteur de structure et $V(G)$ sont les paramètres du pseudo potentiel ou facteurs de formes.

Ces derniers ont été au départ tirés de la littérature, ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [1] dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui

consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie définit par :

$$\delta = \left[\sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m - N} \right]^2 \quad 3-3$$

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}} \quad 3-4$$

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 $K=K_j$, du même paire (i, j) et N est le nombre de paramètres du pseudo potentiel empirique. Les valeurs des facteurs de formes sont modifiées par itération jusqu'à minimiser le δ .

3.2 L'alliage ternaire GaAs_xSb_{1-x}

Les facteurs de formes de pseudo potentiel local symétriques et antisymétriques ainsi que les paramètres du réseau des composés binaire semi-conducteurs GaAs et le GaSb dans la phase zinc-blende sont présentés dans le tableau.3.2.

Par l'utilisation de ces facteurs de formes les gaps d'énergies pour les composés binaires de l'alliage ternaire sont illustrés dans le tableau 3.1.

Composants	Gaps d'énergie (ev)					
	E_g^F		E_g^X		E_g^L	
	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal
GaSb	0.725 ^{a,b}	0.72 ^c	1.03 ^b	1.02 ^c	0.761 ^b	0.78 ^c
GaAs	1.42 ^d	1.42 ^c	1.81 ^d	1.81 ^c	1.72 ^d	1.72 ^c

Tableau 3.1. Gaps énergétiques des composés zinc-blende GaSb et GaAs.

Composés	Facteurs de formes (Ryd)						paramètre du réseau (Å)
	VS(3)	VS(8)	VS(11)	VA(3)	VA(8)	VA(11)	
GaSb	-0.191206	0.005	0.043533	0.045340	0.03	0.00	6.118
GaAs	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01	5.653

Tableau 3.2. Les facteurs de formes symétriques (VS) et antisymétriques (VA) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs GaSb et GaAs dans la phase zinc-blende ainsi que les constantes du réseau a en (Å).

^aRef. [2]

^bRef. [3]

^cNos calculs

^dRef. [4]

Les figures 3.1 et 3.2 représentent la variation des gaps énergétiques en fonction de la composition x pour la VCA et la VCAA respectivement. Dans la figure 7a, aucune transition de gap n'est observée, par contre dans la figure 7b où en tiens compte de l'effet du désordre

compositionnel, deux transitions ont lieu, la première est en $x = 0.048$, le gap de notre alliage passe de E_g^Γ (direct) au E_g^L (indirect) avec une valeur de 0.62eV et la deuxième est en $x=0.59$, le gap passe de E_g^L (indirect) au gap E_g^Γ (direct) avec une valeur de 0.73eV, donc pour $0.59 \leq x \leq 0.048$ les résultats montrent que notre matériau est au gap direct E_g^Γ et pour $0.59 \geq x \geq 0.048$, il devient un semi-conducteur à gap indirect.

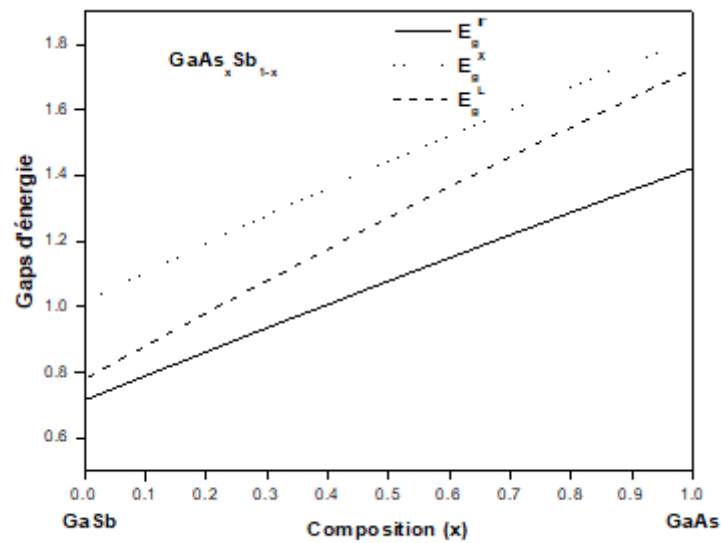


Figure 3.1. Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la concentration molaire x du As dans l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculés sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel

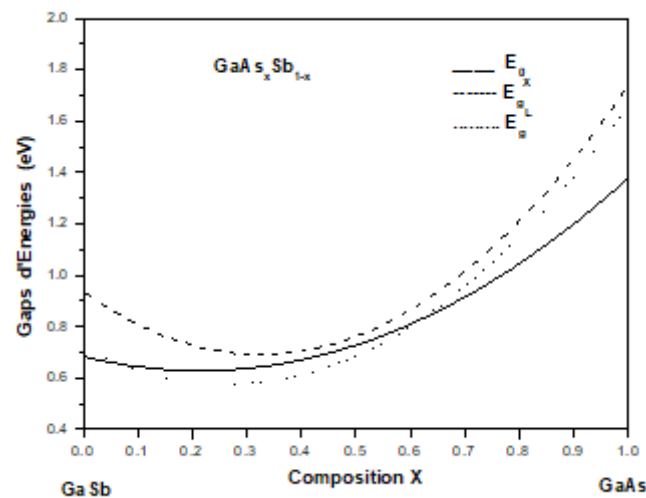


Figure 3.2. Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la concentration molaire x du As dans l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.

Quelques résultats des gaps d'énergie de l'alliage étudié pour quelques concentrations sont donnés dans le tableau 3.3 Pour $x = 0.5$ cette alliage est au gap indirect $E_g^L = 0.73 \text{ eV}$, le $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ est souvent rencontré avec cette composition sur le substrat InP [5]. Une autre composition intéressante est $x = 0.91$ avec laquelle ce matériau est investi sur un substrat à base de InAs [3], les résultats montrent qu'avec cette concentration le $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ est un Semi-conducteur à gap direct $E_g^\Gamma = 1.07 \text{ eV}$.

Alliage ternaire	Gap d'énergie (eV)		
	E_g^Γ	E_g^X	E_g^L
$\text{GaAs}_{0.10}\text{Sb}_{0.90}$	0.60	0.70	0.55
$\text{GaAs}_{0.30}\text{Sb}_{0.70}$	0.64	0.70	0.58
$\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$	0.75	0.81	0.73
$\text{GaAs}_{0.70}\text{Sb}_{0.30}$	0.92	1.02	0.96
$\text{GaAs}_{0.91}\text{Sb}_{0.09}$	1.07	1.39	1.33

Tableau 3.3. Calcul des gaps d'énergies de l'alliage $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ pour différentes Compositions x .

3.3 L'alliage ternaire $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Se}$

En raison de la dépendance des propriétés des alliages ternaires avec la composition les alliages $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Se}$ ont attiré beaucoup plus d'attention dans les domaines des dispositifs optoélectroniques et des cellules solaires photo électrochimiques, grâce à leur large bande interdite et leur bonne stabilité tout en respectant l'environnement [5,6].

Les alliages ternaires $Cd_{1-x}Zn_xSe$ offrent des propriétés intermédiaires entre ceux des composés binaires,

Les facteurs de forme pseudo potentiels symétriques et antisymétriques ajustés ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires semi-conducteurs CdSe et ZnSe dans la phase zinc blende, sont présentés dans le tableau 3- 4.

composé	Facteurs de forme (Ry)						Paramètre du réseau (Å)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
<u>CdSe</u>	-0.244129	0.007070	-0.007421	0.124697	0.129940	-0.008461	6.052
<u>ZnSe</u>	-0.225333	0.007070	-0.007421	0.116490	0.129940	-0.100180	5.668

Tableau 3.4. Les paramètres pseudo potentiels du CdSe et ZnSe.

3.2.1 Gaps énergétiques

Les valeurs des gaps d'énergie du CdSe et du ZnSe aux points de haute symétrie, Γ X et L obtenues par la procédure d'ajustement, sont illustrées sur le tableau 3-5.

Composé	$E_{\Gamma}^{\Gamma} (eV)$	$E_{\Gamma}^X (eV)$	$E_{\Gamma}^L (eV)$
<u>CdSe</u>	1.69 ^{a)}	3.875 ^{b)}	3.612 ^{b)}
<u>ZnSe</u>	2.70 ^{c)}	3.18 ^{d)}	3.31 ^{d)}

Tableau 3.5. Gaps d'énergie pour CdSe et ZnSe utilisés dans l'ajustement des facteurs de formes. (Les valeurs expérimentales sont données à température ambiante).

^{a)} Valeur expérimentale indiquée dans Ref [7]

^{b)} Valeur théorique indiquée dans Ref [8]

^{c)} Valeur expérimentale indiquée dans Ref [9]

^{d)} Valeur théorique indiquée dans Ref [10].

Afin de voir la possibilité d'une transition du gap direct- indirect dans l'alliage étudié, la variation du gap direct ($\Gamma-\Gamma$) et ceux des gaps indirects ($\Gamma-X$) et ($\Gamma-L$) fonction de la concentration x du zinc est tracée sur la Figure (3-2).

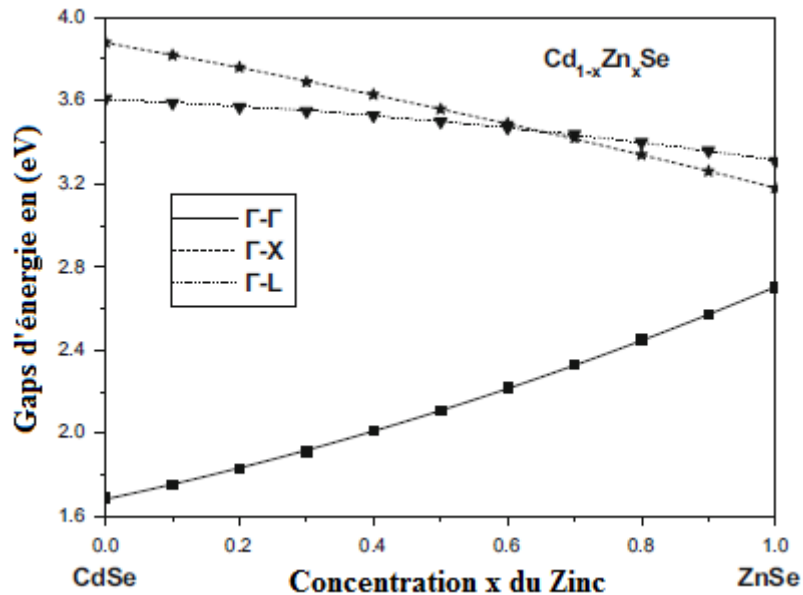


Figure 3.3. La variation du gap direct ($\Gamma-\Gamma$) et ceux des gaps indirects ($\Gamma-X$) et ($\Gamma-L$) en fonction de la concentration x en zinc de l'alliage semi-conducteur $Cd_{1-x}Zn_xSe$.

Nous observons que les deux gaps indirects ($\Gamma-X$) et ($\Gamma-L$) diminuent de façon monotone avec l'augmentation de la concentration x en zinc, alors que le gap direct ($\Gamma-\Gamma$) augmente.

Le comportement des gaps direct et indirect dans le $Cd_{1-x}Zn_xSe$ n'affiche pas de transition de gap pour toute la gamme de variation de la composition.

Ainsi, nous pouvons conclure que, le $Cd_{1-x}Zn_xSe$ est un semi-conducteur à gap direct pour toutes les concentrations x du zinc, variant de 0 à 1. $Cd_{1-x}Zn_xSe$

Ceci est cohérent avec le fait que les deux composés parents du $Cd_{1-x}Zn_xSe$ sont des matériaux à gap direct.

3.2.2 Les propriétés optiques (Indice de réfraction)

L'indice de réfraction (n) des semi-conducteurs 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 [11].

Une corrélation entre n et E_g a des répercussions importantes sur la structure de bande des semi-conducteurs, il serait utile de trouver une valeur acceptable de n d'un matériau quelconque à partir de cette relation. Dans ce travail, l'indice n a été calculé en utilisant trois modèles différents, qui sont tous directement liés à E_g ,

1. La relation Moss basée sur le modèle atomique [12].

$$n = \sqrt[4]{\frac{k}{E_g}} \quad 3-5$$

Où

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

2. Ravindra et autres proposent une relation linéaire entre n et E_g donnée par [13] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad 3-6$$

Où

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

3. L'expression empirique de Hervé et Vandamme [14] donnée par :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad 3-7$$

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

Les résultats de l'indice de réfraction pour les composés CdSe, ZnSe et certains de leurs alliages ternaires sont donnés dans le tableau (3-6).

Matériau	n calculé à partir de :			Données théoriques
	Relation Moss	Relation de Ravindra et autres	Relation de Hervé et Vandamme	
<u>CdSe</u>	2.83	3.04	2.85	2.5 ^{a)}
$Cd_{0.90}Zn_{0.10}Se$	2.80	3.00	2.82	
$Cd_{0.70}Zn_{0.30}Se$	2.74	2.90	2.75	
$Cd_{0.50}Zn_{0.50}Se$	2.67	2.78	2.66	
$Cd_{0.30}Zn_{0.70}Se$	2.61	2.64	2.58	
$Cd_{0.10}Zn_{0.90}Se$	2.55	2.49	2.49	
<u>ZnSe</u>	2.51	2.41	2.44	2.5 ^{a)}

Tableau 3.6. Les indices de réfraction du CdSe, ZnSe et $Cd_{1-x}Zn_xSe$ ($0 < x < 1$), comparés aux données théoriques.

^{a)} Données théoriques Réf [15].

La dépendance de n de la concentration x du zinc est montré dans la Figure (3-4), pour les trois modèles envisagés.

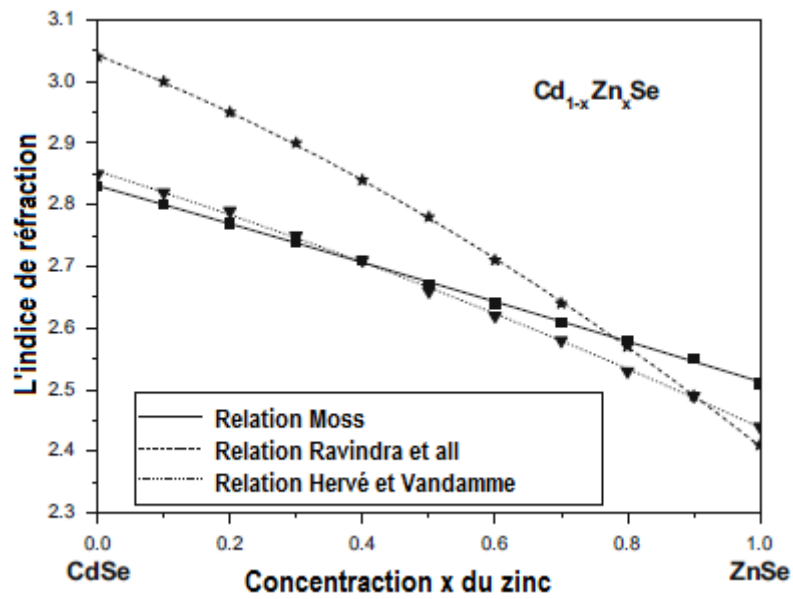


Figure 3.4. La variation de l'indice de réfraction n du $Cd_{1-x}Zn_xSe$ en fonction de la concentration x du zinc pour les trois modèles.

La même tendance est observée pour tous les modèles utilisés, l'augmentation de la concentration x du zinc entraîne une diminution monotone de n .

3.3 L'alliage ternaire AlP_xSb_{1-x}

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.

Les facteurs de forme des composés binaires semi-conducteurs $AlSb$ et AlP sont ajustés et illustrés dans le Tableau. 3.7, ainsi que leurs paramètres de réseau.[15-16].

Composant Binaire	Les facteurs de forme						a (Å)
	VS(3)	VS(8)	VS(11)	VA(3)	VA(4)	VA(11)	
<u>AlSb</u>	-0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	0.004544	6.1355
<u>AlP</u>	-0.241305	0.021262	0.249336	0.030061	0.116000	0.232543	5.4635

Tableau 3.7. Les facteurs de formes symétriques (V_s) et antisymétriques (V_A)

ajustés en (Ryd) des composés binaires semi-conducteurs AlSb et AIP et leurs paramètres de réseaux.

Connaissant les valeurs des paramètres pseudo potentiels (Facteurs de formes) les gaps d'énergies sont illustrés au Tableau. 3.8. On remarque que ces valeurs sont entrés bon accord avec l'expérience rapportée par la référence [17,18]:

Composant binaires	$E_{\Gamma-\Gamma}$ (eV)	$E_{\Gamma-X}$ (eV)	$E_{\Gamma-L}$ (eV)
AlSb	2.30 ^{a,c}	1.615 ^{a,c}	2.211 ^{a,c}
AIP	3.56 ^{b,c}	2.52 ^{b,c}	3.57 ^{b,c}

Tableau 3.8. Gaps d'énergies calculés et expérimentaux des composés binaires semiconducteurs AlSb et AIP.

^aRef [3],^bRef [4] et^cRef [Noscalculs].

3.3.1 Paramètre de maille

Le paramètre de réseau de l'alliage semi-conducteur AIP_xSb_{1-x} , suit la loi de Végard [19], dont les valeurs sont présentées au Tableau. 3.9.

$$a_{AIP_xSb_{1-x}} = xa_{AIP} + (1-x)a_{AlSb}$$

3-8

x	a (Å°)
0	6.1355
0.1	6.0683
0.2	6.0011
0.3	5.9339
0.4	5.8667
0.5	5.7995
0.6	5.7323
0.7	5.6651
0.8	5.5979
0.9	5.5307
1	5.4635

Tableau 3.9. Paramètres de réseau de l'alliage semi-conducteur $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques des alliages ternaires $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Sont donnés par la relation ci-dessous: [20]

$$V_{\text{alloy}} = (1-x)a_{\text{AlSb}}(G) + xV_{\text{AlP}}(G) - p[x(1-x)]^{1/2}(V_{\text{AlP}} - Va_{\text{AlSb}}) \quad \mathbf{3-9}$$

Avec p : Paramètre ajustable qui simule l'effet de désordre.

3.3.2 Structure de bandes électronique:

La structure de bande électronique de l'alliage ternaire $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$ est calculée aux points de hautes symétries dans la zone de Brillouin, en utilisant la VCA avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Vu la similitude de ces structures pour différentes valeurs de x , seule la structure de bande électronique de l'alliage $\text{AlP}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$ est représentée dans la figure. 3-5. Les Figures. (3.6 ; 3.7) illustrent les structures de bandes d'énergies des composés binaires AlSb et AlP respectivement.

Pour l'interprétation de ces structures de bandes, on note que la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence. Dans la Figure. 3.5 on constate que le maximum de la bande de valence est au point Γ et que le minimum de la bande de conduction est au point X , d'où le composé binaire AlSb est un semi-conducteur à bande interdite indirecte. Ce résultat est en accord avec les valeurs trouvées à la référence [17]. La Figure 3.6 illustre la structure de bande du composé binaire AlP qui est aussi à bande interdite indirecte, un résultat qui est aussi en accord avec les valeurs de la référence [18].

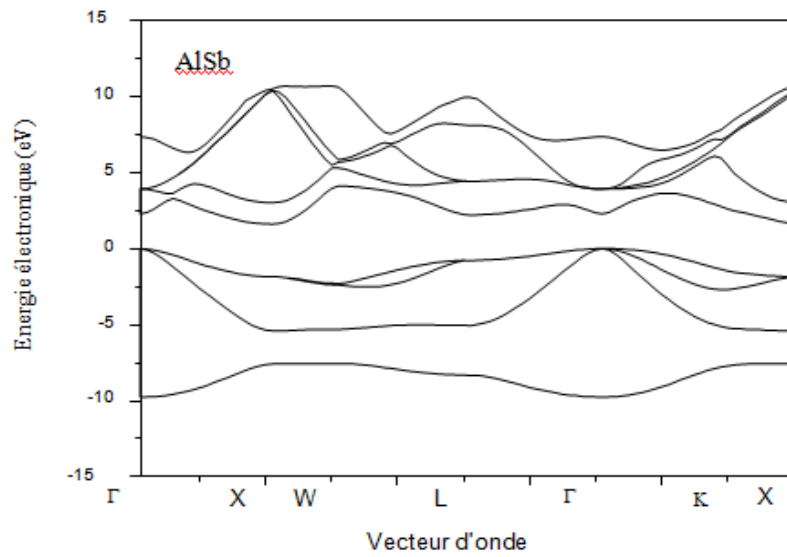


Figure 3.5. Structure de bande électronique du composé binaire AlSb

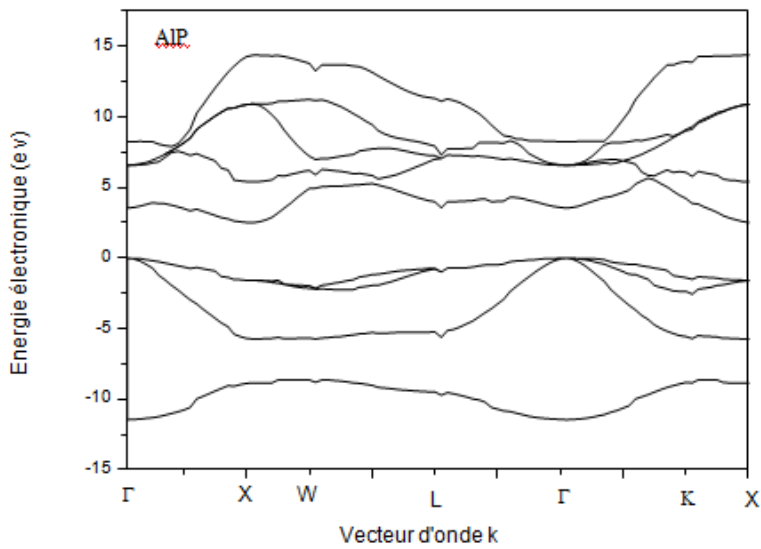


Figure 3.6. Structure de bande électronique du composé binaire AlP

La structure de bande d'énergie de l'alliage ternaire $AlP_{0,5}Sb_{0,5}$ est schématisée sur la Figure IV.3, on voit clairement que l'alliage est un semi-conducteur à gap d'énergie indirect.

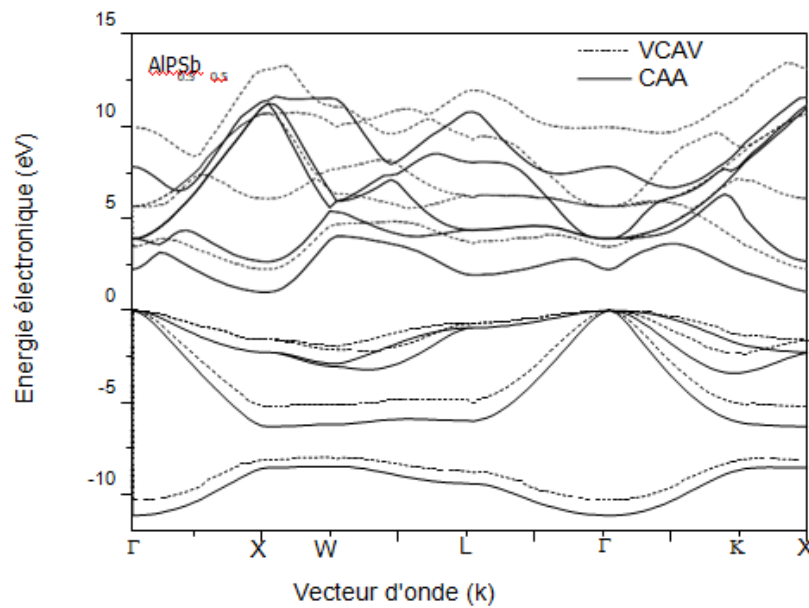


Figure 3.7. Structure de bande électronique de l'alliage ternaire $\text{AlP}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$

Les trois courbes présentent quatre bandes de valence distinctes, la plus basse des bandes de valence présente la forme habituelle attendue pour les semi-conducteurs.

Zinc-blende [21]. On note que ces quatre bandes sont moins dispersives que les bandes de conduction, ceci est dû au fait que les électrons de conduction sont délocalisés.

La Figure 3.7 montre un effet de désordre que important sur la structure de bande électronique de l'alliage ternaire au point $x=0.5$, cet effet ne peut être négligé.

3.3.3 Gaps énergétiques

Pour connaître la transition optiques, l'étude du gap énergétique direct $E(\Gamma-\Gamma)$ et indirect

$E(\Gamma-X)$ en fonction de la composition x avec et sans tenir compte de l'effet du désordre s'avère nécessaire. La variation de l'énergie du gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ en fonction de x est illustrée à la Figure IV.4, la courbe a été tracé par l'utilisation des deux méthodes la VCA et la VCA améliorée.

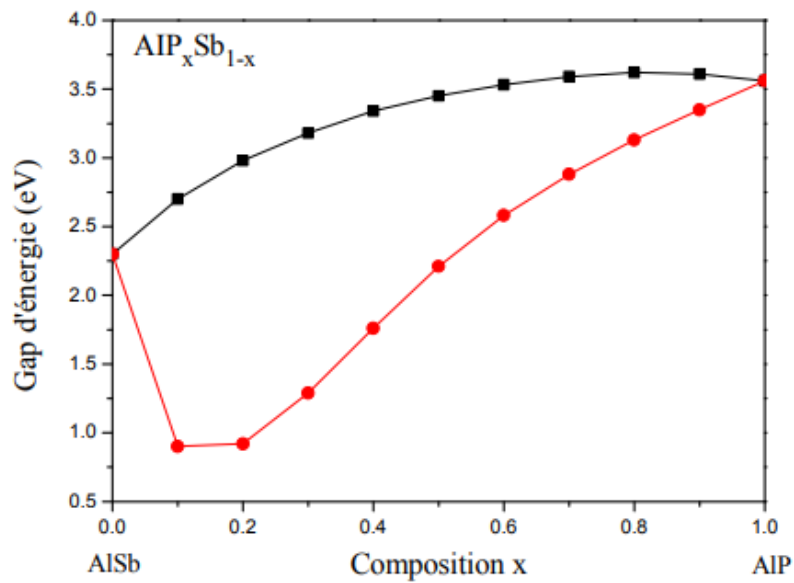


Figure 3.8. Variation du gap d'énergie direct $E(\Gamma-\Gamma)$ en fonction de la composition x avec Et sans désordre (rouge) del'alliageternaire AIP_xSb_{1-x}

Notons qu'en partant de AlSb ($x = 0$) à AIP ($x = 1$), la bande interdite directe ($\Gamma-\Gamma$) augmente dans les deux cas (avec et sans tenir compte de l'effet de désordre compositionnel). Les deux courbes présentent le même comportement, qui est non monotone. Cependant, la non-linéarité semble être différente.

En conséquence, on s'attend bien entendu à des bowings optiques différents. Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur les deux courbes nous donne les expressions analytiques de la forme:

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = -2.07x^2 + 3.24x + 2.36 \quad 3-10$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = 2.7x^2 - 0.27x + 1.45 \quad 3-11$$

En effet, lorsqu'on utilise la VCA seule, c'est-à-dire on a un facteur de désordre nul ($p=0$), on a trouvé un bowing optique de -2,07 eV. Cette valeur n'est pas en accord avec la valeur expérimentale recommandée par Vurgaftman et al. [18], cette valeur est égale à 2.7 eV. Néanmoins, l'utilisation de la VCA amélioré, c'est-à-dire on tient compte de l'effet du désordre comme un potentiel effectif dans le potentiel total du cristal ($p \neq 0$), on note un bowing optique de 2,7 eV, ce résultat est obtenu pour un facteur de désordre égal à $P = 0,973$.

Cette valeur du facteur de désordre indique que l'effet du désordre compositionnel sur l'énergie de gap direct E_{Γ}^{Γ} pour alliage ternaire $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$ est important comparé à d'autres alliages semi-conducteurs ternaires III-V à savoir l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ où le facteur de désordre presque négligeable avec une valeur de 0.075 [22].

Les Figures (3.9 - 3.10) schématisent les variations des gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirect E_{Γ}^X et E_{Γ}^L en fonction de la composition x , avec et sans effet de désordre de l'alliage ternaire $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$

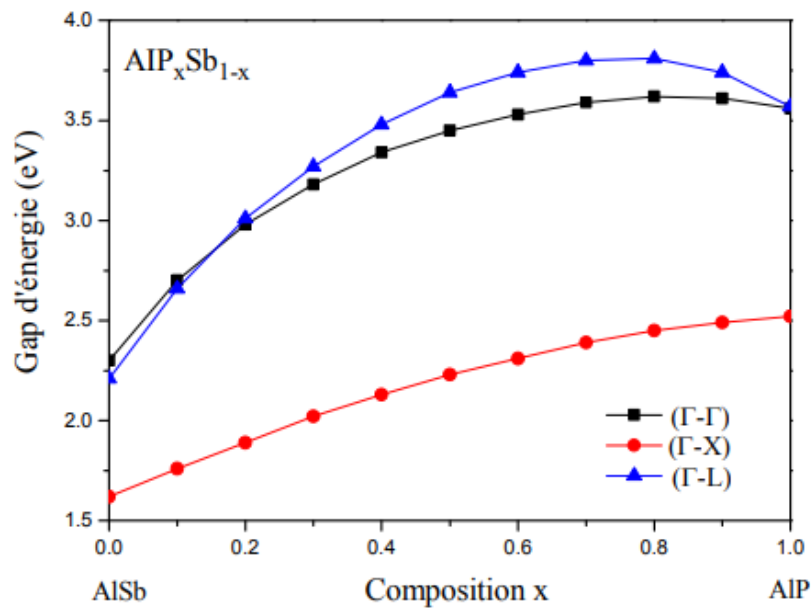


Figure 3.9. Variation des gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects et E_{Γ}^X et E_{Γ}^L en fonction de la composition x sans désordre de l'alliage ternaire $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$

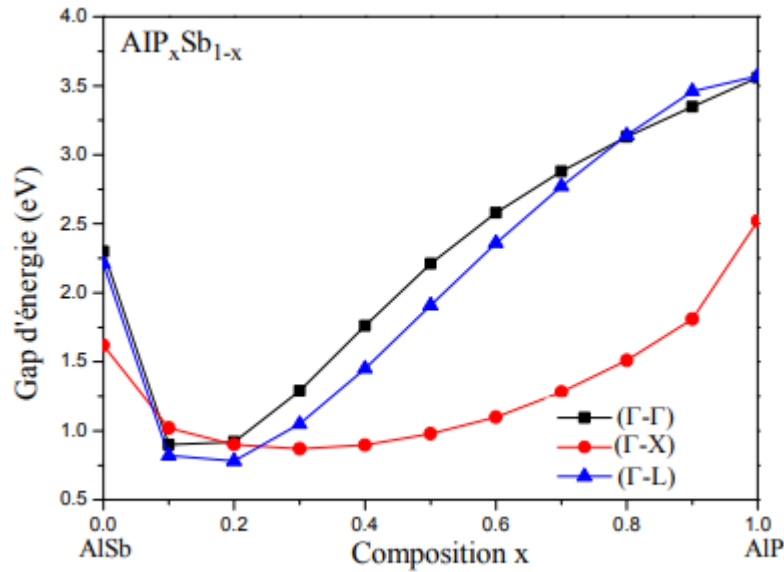


Figure 3.10. Variation des gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects et E_{Γ}^X et E_{Γ}^L en fonction de la composition x avec désordre de l'alliage ternaire AIP_xSb_{1-x}

On remarque que dans les trois cas, et en passant du composé binaire AlSb au composé AIP les énergies de gaps direct E_{Γ}^{Γ} et indirects et E_{Γ}^X et E_{Γ}^L ne présentent pas le même comportement en fonction de la variation de la composition x.

On peut conclure que l'absorption optique des gaps dans AIP_xSb_{1-x} est indirect pour toutes compositions x.

Pour examiner la transition énergétique les courbes du gap direct E_{Γ}^{Γ} et indirects et E_{Γ}^X et E_{Γ}^L de l'alliage ternaire AIP_xSb_{1-x} sont tracées en fonction de la composition x sur les Figures (3.10-3.11) en utilisant la VCA seule et la VCA améliorée.

Les résultats sur la Figure 3.9 montrent que lorsque l'effet de désordre compositionnel est négligé, aucune transition entre les bandes passantes directes et indirectes n'est possible, donc notre alliage est un semi-conducteur à bande interdite (Γ -X) indirect le long de la composition x.

Néanmoins, la situation semble être complètement différente lorsque le VCA améliorée est utilisée (Figure 3.10) où on note que le matériau est un semi-conducteur à bande interdite indirecte (Γ -X) dans la gamme de composition d'alliage variant entre 0 et 0.076, puis on remarque qu'il y a une double transition de gap d'énergie. La première transition vers le gap

indirect (Γ - L) se fait à la composition $x \approx 0,076$ et qui correspond à une énergie de 1,169 eV. La deuxième transition vers le gap indirect (Γ - X) se produit à $x \approx 0,24$ et correspond à énergie de 0,886 eV. En conséquence, alliage ternaire $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$ peut être à gap indirect (Γ - X) ou indirect (Γ -L) en fonction de la teneur en P.

IV.2. Etude des propriétés optiques :

IV.2.1. Indice de réfraction

La connaissance de l'indice de réfraction (N) des semi-conducteurs est indispensable pour des dispositifs tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs [23].

En tenant compte de l'effet du désordre, on calcule l'indice (N) selon différents modèles pour les semi-conducteurs AlSb , $\text{AlP}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$ et 8 P, les résultats sont dans le Tableau 3.10

Matériau	n calculé à partir de						Expt. [11]
	Moss model	Gupta and Ravindra model	Hervé and Vandamme model	Reddy and Anjaneyulu model	Ravindra model	Reddy and Ahammed model	
AlSb	2.86	3.08	2.89	3.11	2.78	3.33	3.2327
$\text{AlP}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$	3.24	3.48	3.26	3.61	3.33	3.98	-
AlP	2.56	2.52	2.51	2.67	2.02	2.91	2.75

Tableau 3.10. Indice de réfraction (n) des semi-conducteurs AlSb , et $\text{AlP}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$ AlP en utilisant différents modèles.

D'après la comparaison des valeurs calculées et des données expérimentales rapportées dans les références [24], On peut dire que, pour AlSb et AlP, la valeur de (N) déterminé en utilisant le modèle Reddyet anjaneyulu est en meilleur accord avec l'expérience [24] que celles calculées à partir des autres modèles. Le modèle de Reddy et Anjaneyulu a déjà validé ses bons résultats par rapport à l'expérience pour les semi-conducteurs III-V [25].

La variation de l'indice de réfraction (N) en fonction de la composition x, calculée à partir des différents modèles, est tracée sur la Figure 3.11. On constate que pour tous les modèles étudiés, (N) décroît avec la concentration de phosphore. Le comportement des

courbes est monotone. Généralement c'est un trait commun pour la plupart des semi-conducteurs III-V [26],

où l'énergie minimale correspond à la plus grande valeur de n . La diminution ou l'augmentation de l'indice de réfraction est directement lié à la valeur du gap en fonction de x . Il diminue quand le gap augmente et vice versa.

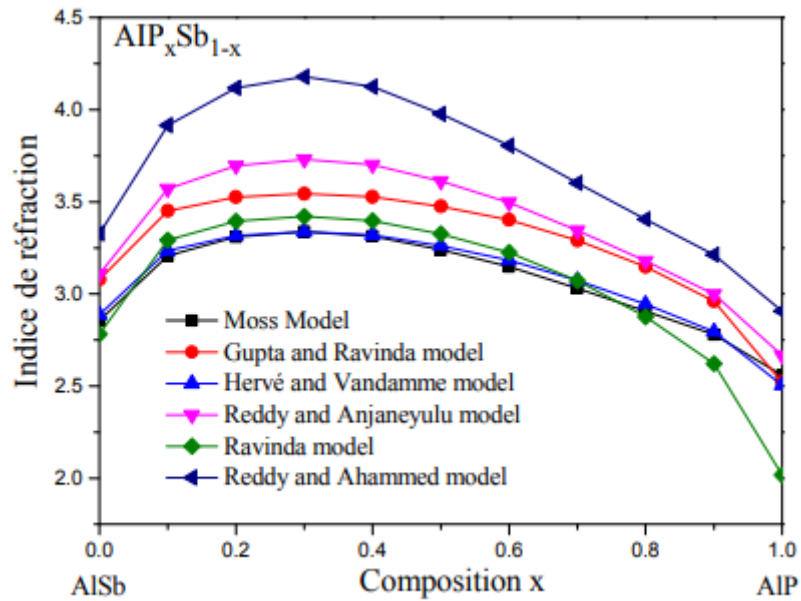


Figure. 3.11. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x de l'alliage ternaire AIP_xSb_{1-x}

3.4. L'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}

La structure électronique est calculée en utilisant la méthode empirique du pseudo potentiel (EPM), [27, 28], tandis que le potentiel d'alliage est obtenu par la VCA est la VCA modifié. Lors de l'utilisation du VCA amélioré, le potentiel d'alliage est exprimé par [29, 30]

$$\mathbf{V}_{\text{alliage}}(\mathbf{r}) = \mathbf{V}_{\text{VCA}}(\mathbf{r}) + \mathbf{V}_{\text{dis}}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{3-12}$$

Dans l'équation (1), $\mathbf{V}_{\text{dis}}(\mathbf{r})$ est le potentiel non périodique dû à l'effet de désordre.

L'expression finale des facteurs de forme pseudo potentiels nécessaires aux calculs est alors écrite comme suit:

$$\mathbf{V}_{\text{alliage}}(\mathbf{G}) = x\mathbf{V}_{\text{CdS}}(\mathbf{G}) + (1-x)\mathbf{V}_{\text{CdTe}}(\mathbf{G}) - P[x(1-x)]^{1/2} [\mathbf{V}_{\text{CdS}}(\mathbf{G}) - \mathbf{V}_{\text{CdTe}}(\mathbf{G})] \quad \mathbf{3-13}$$

P dans l'équation (2) est traité comme un paramètre ajustable et G est un vecteur de réseau réciproque.

Les ajustements des facteurs de formes sont effectués à l'aide d'une méthode des moindres carrés non linéaire. [31,49] Les énergies de bande interdite pour CdTe et CdS sont présentées dans le tableau 3. 11.

Composé	E_{Γ}^{Γ} (eV)	E_{Γ}^X (eV)	E_{Γ}^L (eV)
CdTe [50]	1.5045	3.48	2.47
CdS [51]	2.39	3.64	3.50

Tableau 3.11. Bandes interdites d'énergie fixées dans les ajustements pour CdS et CdTe.

Les facturs de formes ajustés finaux et les paramètres de réseau utilisés pour le CdTe et le CdS sont répertoriés dans le tableau 3. 12.

La structure zinc-blende est supposée pour le CdTe, le CdS et leurs alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}. Le paramètre de maille de CdS_xTe_{1-x} est estimé en utilisant la loi de Vegard.

Composé	Facteurs de forme (Ry)						Constante de réseau (Å)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
CdS	-0.23	0.01	0.06	0.134	0.096	0.019	5.83
CdTe	-0.396388	0.198275	0.06	0.1311	0.28	0.708145	6.48

Tableau 3.12. Paramètres de pseudo potentiel pour CdS et CdTe

La variation de l'énergie du gap énergétique $E(\Gamma-\Gamma)$ en fonction de la teneur en S x pour CdS_xTe_{1-x} calculée à l'aide de la VCA et de la VCA améliorée est représentée sur la figure 3.13.

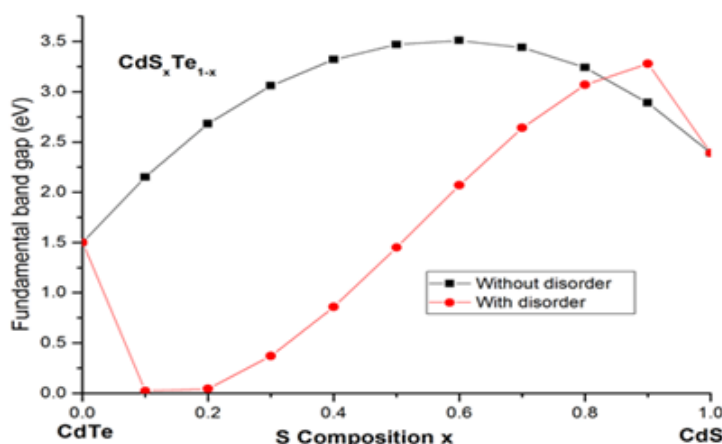


Figure 3.12. Gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ en fonction de la teneur en S, sans désordre (courbe en trait plein) et avec désordre (courbe en pointillé rouge). dans CdS_xTe_{1-x}

Notant que dans les deux cas, le gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ varie de manière non linéaire avec l'augmentation de la concentration S dans le CdS_xTe_{1-x} . Néanmoins, la VCA (courbe en trait plein sur la figure 3.12), suggère un paramètre de courbure de la bande interdite optique de -6,12 eV. La valeur obtenue n'est pas en accord avec la valeur expérimentale qui est de 1,88 eV rapportée dans la réf. [52]. Le désaccord est essentiellement attribué à la négligence de l'effet de désordre compositionnel par le VCA. En ajoutant une correction au VCA, c'est-à-dire en tenant compte de l'effet du désordre de l'alliage (courbe en pointillé rouge sur la figure 3.12), ou le paramètre de courbure de la bande interdite est de 1,878 eV. Les données sont en

excellent accord avec celles de l'expérience. [52] L'accord est trouvé pour la valeur de $P = 1,003$. Cela montre l'importance du désordre de l'alliage dans les calculs de la bande interdite qui ne doit pas être ignoré pour obtenir un accord significatif avec l'expérience pour le $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$.

Compte tenu de l'effet de désordre compositionnel, les courbes qui représentent les gaps énergétiques aux points X et L en fonction de la composition de l'alliage x dans $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ sont affichées dans la figure 3. 13.

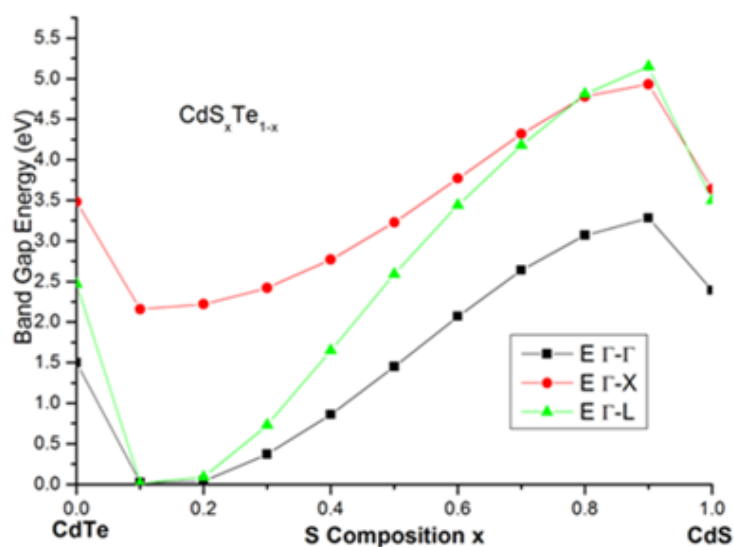


Figure 3.13. Énergies de Gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ et indirect $E(\Gamma-X)$ et $E(\Gamma-L)$ dans $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ en fonction de la teneur en S, calculée avec désordre.

Nous observons que tous les gaps direct et indirects varient non linéairement avec la variation de x dans le $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$. Les résultats ont donné des paramètres de courbure du gap de 1,25 et 1,68 eV pour les transitions $(\Gamma-X)$ et $(\Gamma-L)$ respectivement. L'examen du contenu des transitions de bande interdite directe à indirecte implique une bande interdite directe $(\Gamma-\Gamma)$ pour $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ pour toutes les compositions x ($0 \leq x \leq 1$). Ceci est cohérent avec le fait que le CdTe et le CdS sont tous deux des semi-conducteurs à bande interdite directe $(\Gamma-\Gamma)$.

3.5. Les alliages ternaire ZnSSe et ZnBeTe

Pour ces deux alliages les facteurs de formes utilisés pour le calcul de la structure de bandes sont indiqués dans le tableau 3.13

	$V^S (3)$	$V^S (8)$	$V^S (11)$	$V^A (3)$	$V^A (4)$	$V^A (11)$	treillis
composé	(Ryd)	(Ryd)	(Ryd)	(Ryd)	(Ryd)	(Ryd)	(Ryd)
ZnSe	-0.383536	0.021660	0.094511	-0.140184	0.062	-0.035802	0.56686 [35]
ZnS	-0.226152	0.03	0.061513	0.223987	0.14	0.04	0.54093 [35]
ZnTe	-0.227428	0.0	0.07581	0.0386	0.05	-0.0075	0.61037 [36]
BeTe	-0.428823	-0.021065	0.254048	-0.221772	0.120	0.259592	0.56250 [37]

Tableau 3.13. Facteurs de forme pseudo-potentiels et constantes de réseau pour les composés ZnSe, ZnS, ZnTe et BeTe

Exprimés en fonction de ceux des parents binaires

$$V_{ABC}^{S,A}(G) = (1 - x) V_{AC}^{S,A} + x V_{AB}^{S,A}. \quad 3-14$$

La constante du réseau de l'alliage est obtenue selon la loi de Vegard :

$$a_{AB_xC_{1-x}} = (1 - x)a_{AC} + xa_{AB}. \quad 3-15$$

En utilisant cette constante de réseau, les vecteurs de réseau réciproques correspondants et les facteurs de forme pseudo potentiels $V_{S,A}(G)$ de l'équation (3-16), nous pouvons calculer la structures bande des alliages.

Il est bien connu que le VCA ne prend pas en compte l'effet du désordre dû à la composition x [38] et donc les facteurs de courbure obtenus par la VCA peuvent différer de expériences. Afin de pallier cette lacune, nous avons ajouté à la VCA un potentiel non périodique dû au désordre [39]. En ajoutant ce potentiel de désordre effectif, l'expression (3-16) devient :

Matériel	E_g^{Γ} (eV)	E_g^X (eV)	E_g^L (eV)
ZnSe	2.80; 2.80 [44, 43,]	4.49; 4.49 [43]	3.92; 3.92 [43]
ZnS	3.67; 3.67 [43]	5.23; 5.23 [43]	5.22; 5.22 [43]
ZnTe	2.27; 2.27 [8, 46]	3.05; 3.05 [47]	2.68; 2.38 [44]
BeTe	4.1; 4.1 [8, 47]	2.8; 2.8 [45, 47]	3.57; 3.57 [48]

Tableau 3.14. Gaps d'énergies calculés et expérimentaux des composés binaires semiconducteurs , ZnSe ZnS, ZnTe et BeTe

$$V_{ABC}^{S,A} = (1-x)V_{AC}^{S,A} + xV_{AB}^{S,A} - p\sqrt{x(1-x)} [V_{AC}^{S,A} - V_{AB}^{S,A}] \quad 3-16$$

p est alors traité comme un paramètre ajustable.

Les résultats des gaps sont comme suit :

3.5.1 Propriétés optiques

L'indice de réfraction est également une propriété optique importante. En effet, l'utilisation de techniques optiques rapides non destructives pour la caractérisation des couches épitaxiales est limitée par la précision avec laquelle les indices de réfraction peuvent être liés à composition de l'alliage. De nombreuses tentatives ont été faites pour corrélérer la bande interdite d'énergie à l'indice de réfraction des semi-conducteurs. Moss [40] a proposé la relation suivante :

$$E_g n^4 = 95 \text{ eV}. \quad 3-17$$

Ravindra et Srivastava [41] ont proposé une valeur de 108 eV au lieu de 95 eV. Mais cette relation basée sur un atome modèle est limitée. Gupta et Ravindra [42] ont suggéré une relation linéaire donnée par :

$$n = \alpha + \beta E_g \tag{3-18}$$

Avec $\alpha = 4,084$ et $\beta = -0,62 \text{ eV}^{-1}$.

Hervé et Vandamme [43] ont proposé une relation basée sur la théorie de l'oscillateur classique et donnée par :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{E_g + \beta} \right)^2} \tag{3-19}$$

3.5.2 Propriétés électroniques des alliages ZnSSe et ZnBeTe

3.5.2.1 Énergie de bande interdite de $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$

Les énergies de bande interdite E^Γ , E^X et E^L de $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ sont calculés dans le cadre de la VCA ($p = 0$). Dans la figure 3.14, les résultats sont tracés en fonction de la composition en soufre x dans le alliage (trait plein). Deux comportements différents sont clairement observés. Les courbes présentent un minimum prononcé pour les petites compositions alors qu'elles ont un petit écart par rapport au comportement linéaire. Comportements similaires ont été observés dans ZnSeTe [49], ZnSTe [50], ZnCdS [51], Alliages ZnCdSe [52], ZnCdTe [53], CdSSe [54], BeCdSe [55] II VI. les résultats sont ajustés, dans un premier temps, selon l'expression usuelle :

$$E_g(x) = (1 - x) E_g(\text{ZnSe}) + x E_g(\text{ZnS}) - bx (1 - x) \tag{3-20}$$

Où b est le paramètre dit de courbure qui est supposé être constant. L'ajustement polynomial à deux degrés par rapport à x n'est pas d'accord satisfaisant avec l'énergie calculée des bandes interdites $E^\Gamma(x)$ et $E^L(x)$. Cela amène à utiliser un plus grand degré polynomial. Les meilleurs ajustements obtenus sont :

$$E_g^\Gamma(x) = 2.78 - 2.10x + 7.54x^2 - 4.57x^3$$

$$E_g^X(x) = 4.42 - 3.00x + 3.92x^2$$

$$E_g^L(x) = 3.93 - 3.78x + 10.17x^2 - 5.09x^3.$$

3-21

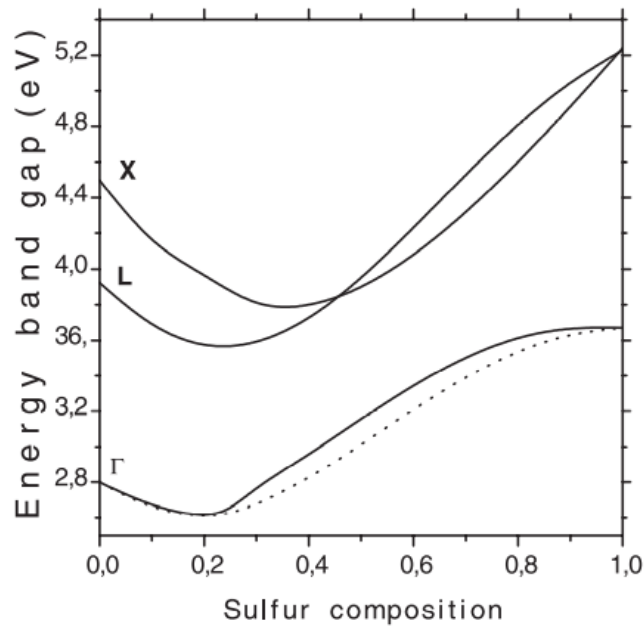


Figure 3.14. Les bandes interdites en fonction de la composition en soufre à , Points X et L dans le zinc- blende ZnS_xSe_{1-x} calculés sans désordre compositionnel (ligne continue) et au point Γ calculé en tenant compte de l'effet de désordre dû à la composition (lignes pointillées).

Pour E^Γ et E^L , il apparaît clairement que le paramètre de courbure b dépend de la composition en soufre. Pour se rapprocher le paramètre de courbure b à celui expérimental disponible dans la littérature pour $x = 0,5$ ($b = 0,63$ eV) [56], E^Γ a été calculé à l'aide de la VCA amélioré. La meilleure concordance est obtenue pour $p = 0,05$. Figure 3.14 (lignes pointillées) présente l'énergie E^Γ par rapport à la composition en soufre x en tenant compte de l'effet de désordre compositionnel. Le meilleur ajustement de E^Γ est quand le désordre dû à la composition est pris en compte :

$$E_g^\Gamma(x) = 2.80 - 2.26x + 7.55x^2 - 4.43x^3.$$

3-22

Ce résultat montre clairement que b dépend fortement de la composition en soufre x :

$$b(x) = -4.43x + 1.13.$$

3-23

3.5.3 Propriétés diélectriques du ZnS_xSe_{1-x}

L'énergie de bande interdite calculée peut être utilisée pour estimer l'indice de réfraction des alliages à l'aide de ce qui précède (modèles mentionnés). Les valeurs calculées de la constante diélectrique haute fréquence $\epsilon_\infty = n^2$ sont répertoriées dans le tableau 3.15 pour certaines valeurs de composition en soufre. Données expérimentales ne sont disponibles que pour les binaires ZnSe ($\epsilon_\infty = 5.4$) et ZnS ($\epsilon_\infty = 5,1$). Au vu de ce tableau, on peut remarquer que la L'expression Gupta et Ravindra donne de meilleurs résultats avec rapport à l'expérience par rapport à Moss et Hervé et les relations de Vandamme pour le ZnSe qui a une bande interdite moins de 3,5 eV. Cependant, pour le ZnS avec une bande interdite égal à 3,8 eV, l'accord entre ces résultats et les données expérimentales ne sont pas aussi bonnes que pour le ZnSe. Les relations de Moss se rapprochent de meilleur à l'expérience.

Matériel	Constante diélectrique haute fréquence (ϵ_∞)			
	Model de Moss	Relation Gupta et Ravindra	Relation Hervé et Vandamme	Expérience : référence [57]
ZnSe	5.82	5.51	5.80	5.4
ZnS _{0.3} Se _{0.7}	5.92	5.78	5.96	
ZnS _{0.5} Se _{0.5}	5.56	4.75	5.42	
ZnS _{0.7} Se _{0.3}	5.25	3.80	4.95	
ZnS	5.08	3.25	4.69	5.1

Tableau 3.15 Constante diélectrique haute fréquence (ϵ_∞) pour le ZnS_xSe_{1-x}

3.5.4 Énergie de bande interdite de $Zn_{1-x}Be_xTe$

Le deuxième alliage étudié ZnBeTe est un composé anionique commun. Les propriétés électroniques telles que la bande interdite a été étudiée. figure 3.16 montre la variation de E^Γ et E^X en fonction de la composition x sans désordre (trait plein). Les gaps E^Γ et E^X peuvent être ajustées par les équations :

$$\begin{aligned}
 E_g^\Gamma(x) &= 2.26(1-x) + 4.12x \\
 E_g^X(x) &= 3.04(1-x) + 2.79x + 1.66x(1-x).
 \end{aligned}
 \tag{3-24}$$

Maksimov et al. [47] ont rapporté pour $x = 0,5$ un paramètre de courbure $b = 0,5$ eV. Pour mieux reproduire les résultats expérimentaux on a utilisé un paramètre de désordre p dépendant de la composition du béryllium x . Le gap direct E^Γ et indirect E^X fonction de x sont illustrées sur la figure 3. 17 (lignes pointillées) et ajusté par :

$$\begin{aligned}
 E_g^\Gamma(x) &= 2.26(1-x) + 4.13x \\
 E_g^X(x) &= 3.04(1-x) + 2.801x - 0.67x(1-x).
 \end{aligned}
 \tag{3-25}$$

Le gap direct présente une dépendance linéaire pour toute la plage de x . Il augmente linéairement avec le béryllium à une vitesse de 18,6 meV pour une variation de 1 % en béryllium. Ceci est en bon accord avec [58,47]. Pour le gap E^X , le paramètre de courbure est de 0,67 eV est proche de référence [58]. La transition direct à indirect se produit à $x = 0,30$. Cette valeur reproduit un résultat satisfaisant de référence [59] qui rapporte une valeur de $x \approx 0,28$. Donc on peut distinguer deux régions : une bande interdite directe $E(\Gamma-\Gamma)$ pour $0 \leq x \leq 0,3$ et une autre bande interdite indirecte $E(\Gamma-X)$ pour $0,3 \leq x \leq 1$. Il convient de noter que le désordre n'influence pas E^Γ . Mais il a un effet important sur E^X . Cela signifie que l'effet de désordre dépend non seulement de la composition du béryllium x mais aussi de l'énergie. En utilisant le $E_g(x)$ calculé et selon les relations 3-19 –3-21 , nous avons calculé l'indice de réfraction de $Zn_{1-x}Be_xTe$ en fonction de x puis en a déduit la constante diélectrique de haute fréquence les résultats sont comme suit :

Matériel	Constante diélectrique haute fréquence (ϵ_{∞})			
	Rapport de mousse	Relation entre Gupta et Ravindra	Relation Hervé et Vandamme	Expérience : référence [57]
ZnTe	6.46	7.15	6.74	7.30
Zn _{0.7} Be _{0.3} Te	5.80	5.45	5.77	
Zn _{0.5} Be _{0.5} Te	5.85	5.60	5.85	
Zn _{0.3} Be _{0.7} Te	2.43	2.40	2.43	
BeTe	4.81	2.37	4.28	

Tableau 3.16 Constante diélectrique haute fréquence (ϵ_{∞}) pour le Zn_{1-x}Be_xTe



Figure 3.16. Les bandes interdites en fonction de la composition du béryllium x au point Γ et X pour le Zn_{1-x}Be_xTe calculés sans désordre compositionnel (trait plein) et avec désordre compositionnel (traits pointillés). Nous avons également rapporté des résultats expérimentaux à X (triangle). [61]

Références Bibliographiques du chapitre 3

- [1]. T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci., Tohoku. Univ. 2 (1993) 7.
- [2]. S. Zolner, M. Garriga, J. Hmlíček, S. Gopalan, M. Cardona, phys. Rev. B 43 (1991) 4349.
- [3]. C. Alibert, A. Jaullie, A.M. Joullie, C. Ance, Phys. Rev. B 27 (1983) 4946.
- [4]. D. E. Aspnes, C. G. Olson, D.W. Lynch, Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 766.
- [5] P. S. Nair, K.P. Fritz, G.D. Scholes, Chem. Commun. (2004) 2084.
- [6] S.D. Chavhan, R.S. Mane, T. Ganesh, W. Lee, S.-H. Han, S. Senthilarasu, S.-H. Lee, J
- [7] K. Ichino, Y.-H. Wu, Y. Kawakami, S. Fujita, S. Fujita, J. Crystal Growth 117 (1992) 527.
- [8] L.W. Wang, A. Zunger, Phys. Rev. B 51 (1995) 17398.
- [9] O. Madelung (Ed.), Semiconductors-Basic Data, Springer, Berlin, 1996.
- [10] G.-D. Lee, M.H. Lee, J. Ihm, Phys. Rev. B 52 (1995) 1459.
- [11] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21.
- [12] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [13] N. M. Ravindra, S. Auluck, V.K. Srivastava, Phys. Stat. sol. (b) 93 (1979) k155.
- [14] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [15] S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys.: Condens. Matter 2 (1990) 3253.
- [16] D.W. Palmer, WWW.Semiconductors.Co.Uk, 2008.03
- [17] C. Kittel, « Physique de l'état solide, Ed Dunod, Paris, (2001).
- [18] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer, Berlin, 1988.
- [19] C. Alibert, A. Joullié, A. M. Joullié, C. Ance, Phys. Rev. B 27 (1983) 4946.
- [20] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2001) 5815.
- [21] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.

- [22] S.J.Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter, 2 (1990) 3253.
- [23] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.
- [24] N.E.-H. Fares, N. Bouarissa, Infrared Physics & Technology 71 (2015) 396.
- [25] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [26] M. J. Weber, Handbook of Optical Materials, Springer, Berlin, 2003.
- [27] M.S. Al-Assiri, N. Bouarissa, Superlatt. Microstruct. 59 (2013) 144.
- [28] N. Bouarissa, Mater. Lett. 60 (2006) 2974.
- [29] Cohen, M. L., and Chelikowsky, J. R. (1989) Electronic structure and optical properties of semiconductors. *Springer, Berlin*.
- [30] Bouarissa, N. (2001) Optoelectronic properties of $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ semiconducting alloys. *Materials Science and Engineering: B*, 86(1), 53-59.
- [31] Lee, S. J., Kwon, T. S., Nahm, K., and Kim, C. K. (1990) Band structure of ternary compound semiconductors beyond the virtual crystal approximation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2(14), 3253.
- [32] Bouarissa, N. (1998) Effects of compositional disorder upon electronic and lattice properties of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$. *Physics Letters A*, 245(3-4), 285-291.
- [33] Kobayasi, T., and Nara, H. (1993) Properties of nonlocal pseudopotentials of Si and Ge optimized under full interdependence among potential parameters. *Bulletin of College of Medical Sciences, Tohoku University*, 2(1), 7-16.
- [34] Bouarissa, N., and Boucenna, M. (2008) Band parameters for AlAs, InAs and their ternary mixed crystals. *Physica Scripta*, 79(1), 015701.
- [35] Lane, D. W. (2006) A review of the optical band gap of thin film $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 90, 1169-1175.
- [35] H. Mayer, U. Rossler, Solid State Communications 87, 1417 (1993)
- [36] G.-D. Lee, M.H. Lee, J. Ihm, Phys. Rev. B 52, 1459 (1995)

- [37] D. Gerthsen, T. Walter, F. Fisher, T. Gerhand, A. Waag, G. Landwher, J. Crystal Growth 214/215, 330 (2000)
- [38] A. Zunger, S. Mahajan, Handbook on Semiconductors, Vol. 3 (Elsevier, New York, 1994)
- [39] S-H. Wei, L.G. Ferreira, J.E. Bernard, A. Zunger, Phys. Rev. B. 42, 9622 (1990)
- [40] T.S. Moss, Phys. Status Solidi (b) 131, 415 (1985)
- [41] N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, Infrared Phys. 19, 603 (1979)
- [42] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Status Solidi (b) 100, 715 (1980)
- [43] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors (Springer, Berlin, 1988)
- [44] Okuyama, K. Nakano, T. Miyajima, K. Akimoto, J. Crystal Growth 117, 139 (1992)
- [45] S.-B. Che, I. Nomura, W. Shinozaki, A. Kikuchi, K. Shimomura, K. Kishino, J. Crystal Growth 214, 321 (2000)
- [46] M.Th. Litz, K. Watanabe, M. Korn, H. Röss, U. Lunz, W. Ossau, A. Waag, G. Landwehr, Th. Walter, B. Neubauer, D. Gerthsen, U. Schüssler, J. Crystal Growth 159, 54 (1996)
- [47] O. Maksimov, M.C. Tamargo, Appl. Phys. Lett. 79, 782 (2001)
- [48] M.-G. Diaz, P.-R. Hernandez, A. Munoz, Phys. Rev. B 55, 14043 (1997)
- [49] F.C. Peiris, S. Lee, U. Bindley, J.K. Furdyna, J. Appl. Phys. 86, 719 (1999)
- [50] R. Hill, D. Richardson, J. Phys. C 6, L115 (1973)
- [51] L.G. Suslina, A.G. Plyukhin, D.L. Fedorov, I.-A. Nauk, Ser. Fiz. 40, 1194 (1976)
- [52] A.G. Areshkim, G. Spkar, G.N. Polisskii, T.B. Popova, L.G. Suslina, D.L. Fedorov, Fiz. Tverd. Tela. 28, 3743 (1986)
- [54] D.J. Olego, J. Faurie, S. Sivan, P. Mraccak, Appl. Phys. Lett. 47, 1172 (1985)
- [55] O. Goede, D. Henning, L. John, Phys. Status Solidi (b) (6) 96, 671 (1979)

- [56] S.V. Ivanov, O.V. Nekrutkina, S.V. Sorokin, V.A. Kaygorodov, T.V. Shubina, A.A. Toropov, P.S. Kop'ev, G. Reuscher, V. Wagner, J. Geurts, A. Waag, G. Landwehr, Appl. Phys. Lett. 78, 404 (2001)
- [57] L. Soonckindt, D. Etienne, M. de Murcia, G. Bougnot, Thin. Solid. Films 70, 285 (1980)
- [58] A. Munoz, P. Rodriguez, A. Mujica, Phys. Status Solidi (b) 198, 439 (1996)
- [59] M.R. Buckley, F.C. Peiris, O. Maksimov, M. Munoz, M.C. Tamargo, Appl. Phys. Lett. 81, 5156 (2002)
- [60] W.A. Harrison, Electronic Structure and the Properties of Solids (Dover Publications, INC, New York, 1989)
- [61] O. Maksimov, M.C. Tamargo, Appl. Phys. Lett. 79, 782 (2001)



Conclusion générale

Conclusion générale

Le présent travail a pour objectif de fournir une synthèse sur l'étude des propriétés, électroniques et optiques des alliages ternaires semiconducteurs, tels que la structure de bande, le gap énergétique, le paramètre de maille et l'indice de réfraction, une synthèse des résultats d'un certain nombre de travaux de recherche cités dans des publications internationales. Les alliages étudiés sont: $GaAs_xSb_{1-x}$, $Cd_{1-x}Zn_xSe$, AlP_xSb_{1-x} , CdS_xTe_{1-x} , ZnS_xSe_{1-x} et $Zn_{1-x}Be_xTe$ dans la phase zinc-blende. Ces alliages sont à base de composés semiconducteurs III-V et II-VI.

Les calculs sont principalement effectués par l'emploi de la méthode du pseudopotentiel empirique EPM, couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA, où l'effet du désordre compositionnel est ajouté comme un potentiel effectif, cette méthode a fait preuve d'une efficacité particulière pour l'estimation des gaps.

De par leur intérêt scientifique et technologique les semiconducteurs III-V et II-VI ont été largement étudiés. La qualité des matériaux II-VI est inférieure à celle des III-V en raison de problèmes, de bande élevée ce qui limite le dopage.

Cependant, dans la région spectrale où les semiconducteurs III-V ne peuvent pas fournir la bande interdite requise, les II-VI sont les meilleurs candidats pour couvrir un large éventail du spectre visible. Ces dernières années, avec les progrès de la croissance cristalline les chercheurs s'intéressent de plus en plus aux alliages ternaires de type AB_xC_{1-x} . Cet intérêt est motivé par la possibilité de contrôler le gap d'énergie, la constante de réseau et l'indice de réfractances pour la conception de nouveaux émetteurs ou détecteurs de lumière fonctionnant dans un spectre spécifique.

En modifiant la composition de l'alliage, les propriétés physiques peuvent être contrôlées à n'importe quelle valeur entre celles des binaires AC et AB. Cela offre la possibilité de choisir l'alliage avec la constante de réseau appropriée qui sert de candidat comme matériau optoélectronique.

Ce travail peut servir de référence pour le choix de la composition x qui donne la propriété physique appropriée (gap énergétique, indice de réfraction et paramètre

de maille), selon l'application désirée et cela pour les différents types d'alliages ternaires semiconducteurs proposés dans cette synthèse.

En perspective nous souhaitons bien évidemment, que d'autres étudiants font d'autres synthèses sur des travaux de recherche contenant différents types de matériaux semiconducteurs avec des propriétés nouvelles, d'actualité et d'originalité.

Résumé

Résumé

Le présent travail a pour objectif de fournir une synthèse sur l'étude des propriétés, électroniques et optiques des alliages ternaires III-V et II-VI dans la structure zinc-blen de semi-conducteurs tels que : la structure de bandes, le gap énergétique, le paramètre de maille, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence. Une synthèse des résultats des travaux de recherche sur les alliages ternaires semi-conducteurs:

$GaAs_xSb_{1-x}$, $Cd_{1-x}Zn_xSe$, AlP_xSb_{1-x} , CdS_xTe_{1-x} , ZnS_xSe_{1-x} et $Zn_{1-x}Be_xTe$.

Les résultats des calculs de ces propriétés physique sont ont été essentiellement basé sur la méthode empirique des peuseudopotentiels EPM, couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA, avec est sans tenir compte de l'effet du désordre dû à la composition x.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو توفير توليفة لدراسة الخصائص الإلكترونية والبصرية للسبائك الثلاثية III-V و II-VI في بنية الزنك-بلن لأشباه الموصلات مثل: هيكل النطاق، وطاقة الفجوة، والمعلمة الشبكية، معامل الانكسار وثابت العزل الكهربائي عالي التردد. ملخص لنتائج العمل البحثي على سبائك أشباه الموصلات الثلاثية:

$GaAs_xSb_{1-x}$, $Cd_{1-x}Zn_xSe$, AlP_xSb_{1-x} , CdS_xTe_{1-x} , ZnS_xSe_{1-x} et $Zn_{1-x}Be_xTe$.

استندت نتائج حسابات هذه الخصائص الفيزيائية أساساً إلى الطريقة التجريبية لـ EPM peuseudopotentials

، إلى جانب التقريب البلوري الافتراضي VCA ، مع عدم مراعاة تأثير الاضطراب بسبب التركيبة x.

Abstract

The objective of this work is to provide a synthesis on the study of the electronic and optical properties of ternary alloys III-V and II-VI in the zinc-blen structure of semiconductors such as: the band structure, the gap energy, lattice parameter, refractive index and high frequency dielectric constant. A summary of the results of research work on ternary semiconductor alloys:

$GaAs_xSb_{1-x}$, $Cd_{1-x}Zn_xSe$, AlP_xSb_{1-x} , CdS_xTe_{1-x} , ZnS_xSe_{1-x} et $Zn_{1-x}Be_xTe$.

The results of the calculations of these physical properties are were essentially based on the empirical method of EPM peuseudopotentials, coupled with the virtual crystal approximation VCA, with is without taking into account the effect of the disorder due to the composition x.