

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



DOMAINE : Sciences de la matière  
FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE  
N° :Ph APP 24/2020FILIERE :Physique  
OPTION : Physique Energétique

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique  
Réalisé par:

Salmi Zidouma et Rahali Souria

Intitulé

Dépendance en température des constantes élastiques  
et des paramètres mécaniques Du Semi-conducteur  
GaAs

Soutenu le 17/09/2020 devant le jury composé de:

F. Mezrag Université Mohamed Boudiaf-M'sila Présidente

N. Bouarissa Université Mohamed Boudiaf-M'sila Rapporteur

S. Bounab Université Mohamed Boudiaf-M'sila Examinatrice

Année universitaire: 2019/2020

## **Remerciement**

Nous remercions Dieu Tout-Puissant pour son succès pour nous et pour nous avoir donné le courage, la volonté et la patience d'achever ce travail en cours.

Nous remercions sincèrement notre superviseur, M. Nadir Bouarissa, pour son accompagnement constant tout au long de notre projet et pour les précieux conseils qu'elle nous a fournis, ainsi que pour notre assistance, disponibilité et conseils constructifs.

Nous remercions le chef du jury, MezragFadila, et l'examinatrice Mme BounabSabrinah pour l'honneur qu'ils nous ont offert en acceptant le jugement de ce travail.

Nous ne pouvons jamais oublier le soutien moral, l'aide et les encouragements de nos parents. Nous remercions mon père et ma mère pour leur travail acharné et leurs efforts, et nous remercions ma grand-mère. Collègues et amis qui nous ont encouragés, bref merci pour votre précieuse amitié.

Enfin, je souhaite mes derniers remerciements à nos familles, en particulier à mon père et à ma mère.

## Tables des matières

Remerciement.....	I
Dédicace .....	II
Tables des matières .....	III
Introduction Générale.....	2
Références.....	3

### Chapitre I : les propriétés des semi-conducteurs et l'effet de température

I-1) Introduction.....	5
I-2) Définition d'un semi-conducteur.....	6
I-3) Introduction aux milieux matériels.....	6
a. Conducteurs, b. Isolants, c. Semi-conducteurs.....	6
I-4) Semi-conducteur intrinsèque.....	7
I-5) Semi-conducteur extrinsèque.....	8
I-6) Propriétés structurales des semi-conducteurs intrinsèques.....	8
Structure Zinc blende.....	8
I-7) Définition des semi-conducteurs intrinsèques à gap direct et à gap indirect.....	10
I-7-1) Semi-conducteurs intrinsèques à gap direct.....	10
I-7-2) semi-conducteurs intrinsèques à gap indirect.....	11
I-8) Arsenic de gallium (GaAs).....	12
I-9) Structure cristalline.....	12
I-10) Propriétés électronique du GaAs.....	13
I-11) Propriétés élastiques des matériaux.....	14
I-11-1) Energie et tenseur des constantes élastiques.....	15
I-11-2) Le tenseur de déformation.....	15
I-11-3) Le tenseur des contraintes.....	16
I-11-4) Relation contrainte-déformation.....	17
I-11-5) Tenseur des constantes élastiques (cristal à symétrie cubique).....	20
I-11-6) Cisaillement simple.....	20
I-11-7) Extension uni-axiale (Module de Young).....	21
I-11-8) Contraction latérale et coefficient de poisson.....	23
I-11-9) Formules des modules d'élasticités pour les symétries cubiques .....	23
I-11-10) Les conditions de stabilité mécanique.....	24
I-11-11) Le factor anisotropie.....	25
I-12) Propriétés mécaniques (micro-dureté) des matériaux.....	25
I-13) Les avantages des semi-conducteurs III-V.....	26
I-14) Application technologiques.....	28
I-15) Effet de la température.....	28
Références .....	30

### Chapitre II: Laméthodedupseudo-potentiel

II.1. Introduction.....	33
II. 2. Formulation mathématique.....	33
II.3. Lesmodelésdupseudo-potentiel.....	37

II.3.1. Le modèle local.....	38
II.3.2. Le modèle nonlocal .....	39
II.3.2.1. Le modèle de Heine-Abarenkov.....	40
II.3.2.1. Le modèle de Gauss.....	41
II.3.2.3. Le modèle d'Ashcroft.....	42
II.4. La méthode empirique du pseudo potentiel (l'E.P.M) .....	43
II.4.1. La méthode empirique de pseudo-potentiel local (EPM).....	44
Références.....	48
<b>Chapitre III: Résultats et discussion.....</b>	<b>50-67</b>
Références .....	68
Conclusion générale.....	72
Résumé.....	73

# **Introduction générale**

## Introduction générale

La découverte des matériaux semi-conducteurs est l'un des facteurs les plus importants qui ont beaucoup contribué à la mise à niveau de la technologie moderne. L'un de ses fruits les plus importants a été la fabrication d'appareils électroniques qui sont utilisés dans notre vie quotidienne, en particulier dans les domaines des médias automatisés et de la conquête spatiale. Ils sont même considérés comme des matériaux de base dans la fabrication de détecteurs et de machines optiques et nucléaires, traitement d'images médicales et de nombreux autres domaines qui ont cristallisé à l'état solide et en ont fait un miracle électronique [1].

Le silicium (Si) reste le matériau semi-conducteur le plus utilisé dans la fabrication des éléments composites électroniques, mais il se retire de la concurrence pour laisser le champ à des matériaux tels que GaAs et AlGaAs, lorsqu'il s'agit de l'industrie du laser, qui est à la base de la fabrication de disques denses, et laisse place aux alliages semi-conducteurs InGaAs, lorsqu'il s'agit du domaine de la communication par fibre optique [2].

Il existe d'autres domaines que le silicium ne peut pas couvrir, comme le champ micro-onde qui nécessite des éléments composites électroniques à haute vitesse, qui peuvent être réalisés par des combinaisons telles que InAlAs / InGaAs, le champ de détection X et  $\gamma$  basé sur des matériaux CdTe et la détection infrarouge à travers l'alliage CdHgTe et vient dans ce dernier ZnSe comme un matériau prometteur dans la fabrication de lasers bleus. Des matériaux tels que Si et AlGaN sont utilisés dans l'électronique haute température [3].

Vu l'importance des matériaux semi-conducteurs III-V dans les applications optoélectroniques, la connaissance de leurs propriétés fondamentales est très importante pour

la conception et la fabrication de ces matériaux. A cet effet nous avons étudié les propriétés élastiques et mécaniques du semi-conducteur GaAs a différentes températures allant de zéro a 600 K. Le but de ce travail est de calculer les propriétés structurales, élastiques et micro-dureté sous l'effet de la température et nous utilisons la méthode de pseudo-potentiel empirique. Le travail de ce mémoire est organisé comme suit:

Après une introduction générale, le premier chapitre présente les notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs et l'étude des propriétés de composés binaires antimoineure III-V (GaAs) a température normale et sous l'effet de température, on cite leurs avantages et applications technologiques.

Le deuxième chapitre est consacré a un rappel de principe de certaines méthodes théoriques utilisées dans le calcul de la structure de bandes électronique et se concentre sur l'une des méthodes théoriques principales de notre travail appelé méthode empirique du pseudo-potentiel (E.P.M).

Nos résultats d'étude, leurs interprétations leur comparaison avec d'autres travaux expérimentaux et théoriques sont présentés dans le troisième chapitre. Finalement, notre travail est achevé par une conclusion générale.

## Référence

[1] G. Ferenczi, F. Bekzray, New Developments in Semiconductors Physics, Springer-Verlag, 1988

[2] <http://physical-magazine.yoo7.com/t18-topic>

[3] Physique des Semi-conducteurs: Fondamentaux, [http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI\\_fr\\_MOS\\_CO2/CO/Grain\\_OPI\\_fr\\_Mo5\\_C02\\_1.html](http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI_fr_MOS_CO2/CO/Grain_OPI_fr_Mo5_C02_1.html)

# **Chapitre I**

## **Les propriétés des semi-conducteurs et l'effet de température**

## **I.1. Introduction**

Les technologies semi-conducteurs ont connues la plus forte progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement des économies modernes et cela, grâce à leur propriétés physiques curieuses qui sont connues depuis longtemps. Parmi ceux -ci, les matériaux semi-conducteurs des groupes III-V et II-VI de la classifications de Mendeleïev, qui ont un champ d'application très élargi. Ces matériaux sont actuellement utilisés dans plusieurs composants électroniques très importants, ils jouent un rôle majeur dans les applications hyperfréquences, l'électronique de puissance mais surtout dans le domaine de l'optoélectronique [1].

Les alliages semi-conducteurs sont aussi considérés comme une classe importante des matériaux, grâce à la richesse de leurs structures électroniques et leurs propriétés physiques qui peuvent être ajustées et contrôlées, pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré [2].

Ils ont trouvé une large application dans les dispositifs optiques et électroniques. Ces dernières années, la littérature sur les propriétés fondamentales de ces matériaux a rapidement augmenté, beaucoup de progrès et de découvertes majeurs ont été réalisés. Pour une bonne maîtrise de ces composants optoélectroniques, il est évidemment nécessaire, d'avoir une connaissance des propriétés électriques de ces matériaux semi-conducteurs [3].

Ils sont similaires aux isolants, à la différence près de leur bande interdite qui n'est pas plus grande, c'est de ce fait, que découle la propriété la plus caractéristique d'un semi-conducteur.

## I.2. Définition d'un semi-conducteur

Un semi-conducteur 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,
- L'éclairement,
- La présence d'impuretés (dopage) [4].

## I.3. Introduction aux milieux matériels

Selon les propriétés électriques, les matériaux sont classés en trois catégories, conducteurs isolants et semi-conducteurs, voir schéma.

**a. Conducteurs:** Les métaux tels que le fer (Fe), le cuivre (Cu), l'or (Au), l'argent (Ag) et l'aluminium (Al) sont des conducteurs de courant électrique. La présence d'électrons libres dans la couche périphérique (densité  $n \approx 10^{22}$  à  $10^{23}$  é/cm<sup>3</sup>) est à l'origine de la conductivité électrique. A température ambiante la résistivité  $\rho$  des conducteurs est très faible ( $\rho \leq 10^{-5} \Omega \cdot \text{cm}$ ).

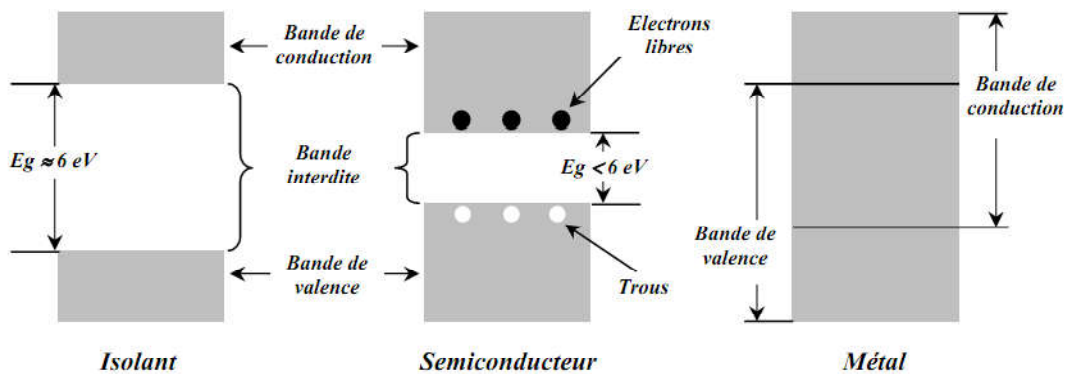
**b. Isolants:** Les matériaux qui ont une résistivité  $\rho$  supérieure à  $10^8 \Omega \cdot \text{cm}$  sont des isolants (matériaux non conducteurs de courant électrique). Parmi ces matériaux ; le verre, le mica, la silice (SiO<sub>2</sub>) et le carbone (Diamant)... La conductivité des isolants est donc très faible ( $\sigma = 1/\rho$ ).

**c. Semi-conducteurs:** Cette classe de matériaux se situe entre les métaux (conducteurs) et les isolants (non conducteurs). La résistivité  $\rho$  des semi-conducteurs varie de  $10^{-3}$  à  $10^{+4} \Omega \cdot \text{cm}$ . les

électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique. Un semi-conducteur peut être soit intrinsèque (pur) ou extrinsèque (dopé) par des impuretés.

- Semi-conducteur intrinsèque : la résistivité du silicium pur est de l'ordre de  $\rho \approx 10^3 \Omega \cdot \text{cm}$ .

- Semi-conducteur extrinsèque : la résistivité du silicium dopé par le Bore ou le phosphore est de l'ordre de  $10^{-2} \Omega \cdot \text{cm}$ . [5].



**Figure (I-1) : Schéma** : Structure en bandes d'énergie des matériaux ; Isolants, Semi-conducteurs et Métaux.

#### I.4. Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque, si ces propriétés électriques sont entièrement dues à sa composition chimique et à sa structure cristalline et non pas à la présence d'impuretés. Ce comportement correspond à son état pur, donc parfait ; sans défaut structural ou impuretés. Toutefois, un semi-conducteur réel n'est jamais parfaitement intrinsèque, ces semi-conducteurs ne conduisent pas ou très peu le courant sauf s'ils sont portés à haute température [3].

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

### **I.5. Semi-conducteur extrinsèque**

Ces semi-conducteurs sont d'un grand intérêt technique, car leur conductivité électrique peut être fortement modifiée par l'adjonction dans leurs structures cristallines d'impuretés spécifiques. Les propriétés électriques étant ainsi déterminées par la présence des impuretés, on parle de conductivité extrinsèque. L'adjonction délibérée d'impuretés à l'intérieur d'un semi-conducteur intrinsèque est appelée dopage [3,4].

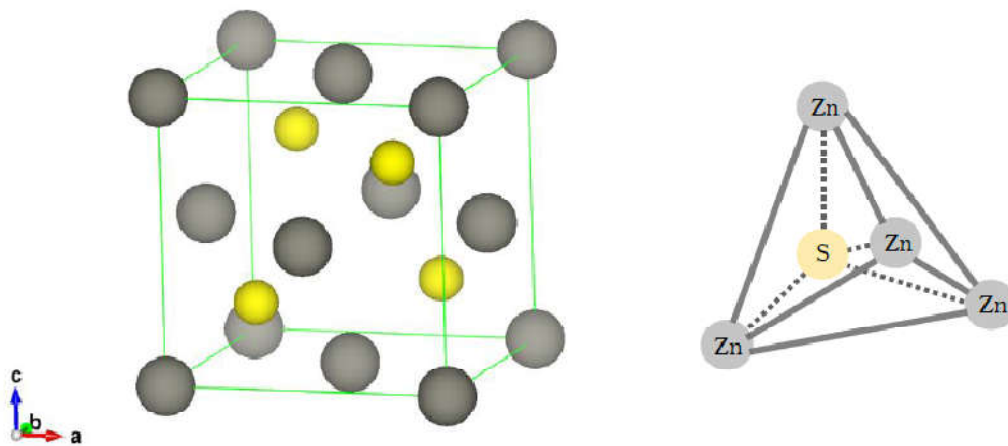
### **I.6. Propriétés structurales des semi-conducteurs intrinsèques**

Les propriétés structurales des semi-conducteurs sont des paramètres très importantes dans la conception et la fabrication des dispositifs optoélectroniques [6]. En générale, les semi-conducteurs se cristallisent dans l'une des structures suivantes : Structure diamant, structure Zinc blende (Cubique), structure Wurtzite (Hexagonale) et la structure NaCl.

#### **Structure Zinc blende**

Dans la structure zinc blende (appelée aussi sphalérite), les quatre atomes de carbone placés à l'intérieur dans la structure diamant sont remplacés par quatre atomes d'un autre

élément. Dans le cas de ZnS (semi-conducteurs de la classe II-VI) les quatre atomes de soufre S (en jaune) occupent les sites de coordonnées  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ,  $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ ,  $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$  et  $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ . Les atomes du zinc occupent les nœuds du réseau cfc (en gris). Figure I.2.



**Figure I.2.** Structure zinc blende de ZnS avec le tétraèdre (groupe d'espace n° 216,  $\bar{4}3m$ ).

- La maille contient 4 atomes Zn et 4 atomes S et le réseau cfc a 4 nœuds. Il est donc clair que le motif est constitué d'un atome Zn et un atome S.
- Chaque atome de soufre (S) est entouré de 4 atomes Zn. L'atome S est situé alors au centre du tétraèdre régulier formé par les 4 atomes Zn. La situation réciproque est vraie.
- Dans de nombreux composés de structure blende la liaison covalente peut avoir un certain caractère métallique ou ionique.
- Les paramètres de maille de ZnS sont :  $a = b = c = 5.4145 \text{ \AA}$  et  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  [5].

## I.7. Définition des semi-conducteurs intrinsèques à gap direct et à gap indirect

### I.7.1. Semi-conducteurs intrinsèques à gap direct

Dans les semi-conducteurs à gap direct le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au même point (même vecteur d'onde  $\vec{k}$ ) dans la zone de Brillouin (ZB), Figure I-3. La transition électronique entre le haut de la bande de valence (BV) et le bas de la bande de conduction (BC) conserve le vecteur d'onde ( $\Delta\vec{k} = \vec{0}$ ).

Dans ce cas ;  $\Delta\vec{p} = \hbar \Delta\vec{k} = \vec{0}$ .

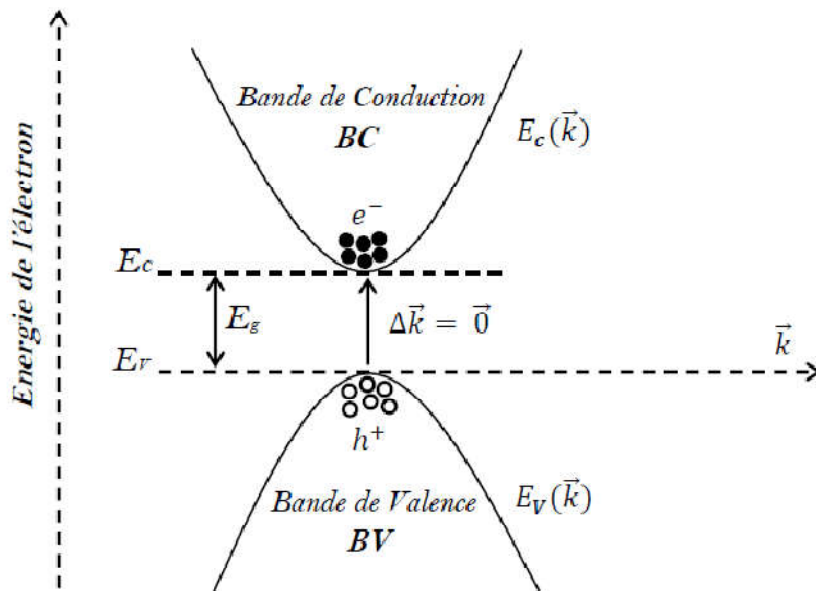


Figure I.3. Semi-conducteurs à gap direct.

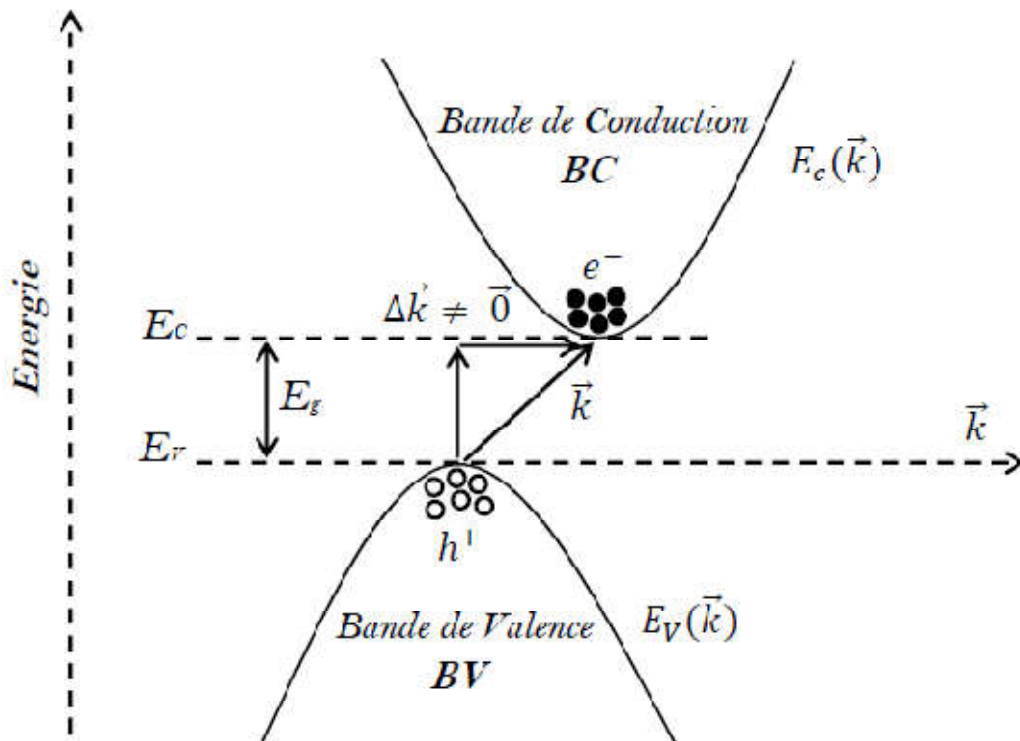
$\vec{k}$  est le vecteur d'onde associé à l'électron.

$\vec{p} = \hbar \vec{k} = m \vec{v}$ : La quantité de mouvement.

$E_c(\vec{k})$  et  $E_v(\vec{k})$  sont respectivement les relations de dispersion dans la bande de conduction et la bande de valence.  $E_c$  et  $E_v$  sont respectivement l'énergie minimum de la bande de conduction et l'énergie maximum de la bande de valence [5].

### I.7.2. Semi-conducteurs intrinsèques à gap indirect

Dans le cas des semi-conducteurs à gap indirect le minimum de la bande conduction est situé à une distance  $\Delta\vec{k} \neq \vec{0}$  du maximum de la bande de valence dans la zone de Brillouin (ZB), figure I-4. La transition électronique entre le haut de la bande de valence (BV) et le bas de la bande de conduction (BC) est accompagnée par le changement de la quantité de mouvement  $\Delta\vec{p}$ , c'est-à-dire le vecteur d'onde n'est pas conservé ( $\Delta\vec{k} \neq \vec{0}$  et  $\Delta\vec{p} = \hbar\Delta\vec{k} \neq \vec{0}$ ) [5].



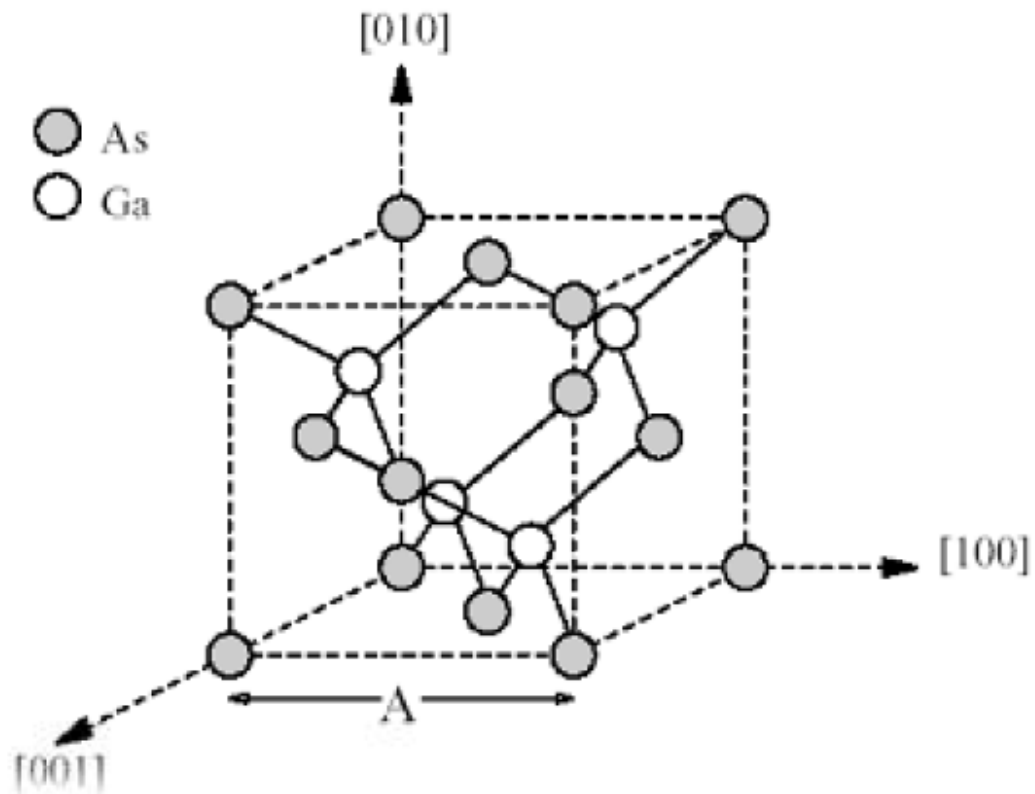
**Figure I.4.** Semi-conducteurs à gap indirect.

### **I.8. Arsenic de gallium (GaAs)**

Le choix d'un matériau permettant d'obtenir de hautes performances en circuits intégrés ne dépend pas uniquement de ses propriétés électriques. Il résulte d'un compromis entre différents critères tels que ses propriétés métallurgiques (tenue aux divers processus technologiques, par exemple), la diversité de composants élémentaires réalisables, et la tenue en fiabilité. Pour la réalisation des circuits intégrés numériques très rapides, l'arséniure de gallium présente de nombreux avantages. [7].

### **I.9. Structure cristalline**

Le GaAs présente une structure cristallographique de la blende de zinc qui se compose de deux réseaux cubiques à face centrée (FCC) déplacée par un vecteur  $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ , avec  $a_0$  la longueur de l'arête du cube élémentaire ( $a_0 = 5.653 \text{ \AA}$ ), le premier réseau se compose entièrement d'atome de gallium(Ga) et l'autre d'atomes d'arsenic(As). La figure (I-5) présente la structure cristalline du GaAs et sur le tableau 1 nous avons reporté les principales propriétés du GaAs à température ambiante. [7].



**Figure(I-5).** Structure cristalline du GaAs.

### I.10. Propriétés électronique du GaAs [8]

La structure de bande directe du GaAs, lui confère des propriétés électroniques intéressantes:

1). Il se prête facilement à la réalisation de diodes Schottky de hauteur de barrière élevée à partir de métaux divers qui rendent possible la fabrication de transistors à effet de champ à jonction métal-semi-conducteur (MESFET).

2). Il permet, par l'épitaxie d'un composé ternaire (par exemple Ga-Al-As de largeur de bande différente), de réaliser des composants nouveaux tels que le transistor à effet de champ à gaz d'électrons bidimensionnel (HEMT), ou encore les transistors bipolaires à hétérojonctions HBT.

3). Les propriétés de transport électronique du GaAs sont remarquables : mobilité très élevée ( $8000 \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1}\text{s}^{-1}$  pour un matériau peu dopé), vitesse de saturation élevée ( $2 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$ ) obtenue pour un champ électrique trois fois plus faible que pour le silicium. Ces propriétés garantissent l'obtention de vitesses de commutation élevées sous de faibles consommations.

4). De par sa grande largeur de bande interdite, le GaAs peut être obtenu sous forme d'un semi-isolant de haute résistivité ( $10^7$  à  $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$ ). L'épitaxie ou l'implantation de la  $10^7$  couche active dans ce semi-isolant, permet d'assurer l'isolation inter dispositif et, ainsi, d'offrir des capacités parasites entre les dispositifs et le plan de masse extrêmement faibles.

### **I.11. Propriétés élastiques des matériaux**

L'élasticité des solides c'est la réponse du matériau aux sollicitations appliquées, ces sollicitations peuvent provoquer des déformations réversibles (retour à l'état initial). La loi de Hooke s'applique seulement aux faibles déformations et établit que dans un solide élastique, la déformation est proportionnelle à la contrainte. Lorsque les déformations sont si élevées, la loi de Hooke n'est plus satisfaisante. On peut dire que dans le domaine linéaire, l'allongement est proportionnel à la force dans le cas d'un étirement, et l'angle est proportionnel au couple dans le cas d'une torsion [9]. La théorie d'élasticité exige des connaissances mathématiques afin d'établir un modèle mathématique du problème de déformation, puis comprendre les procédés de formulation et de solution. [10-12].

### I.11.1. Energie et tenseur des constantes élastiques

Soumettre un cristal idéal à des contraintes externes afin d'estimer sa résistance à la déformation (dureté). La déformation dans ce cas est proportionnelle au module de cisaillement élastique, alors que dans le cas d'un solide réel cette résistance est déterminée par les défauts cristallins (dislocations et/ou défauts ponctuels). Le module de compressibilité et de cisaillement peuvent être exprimés comme une combinaison linéaire d'un ensemble de constantes d'élasticité  $C_{ij}$  et sont actuellement considérées comme les meilleurs prédicteurs de dureté pour les solides.

### I.11.2 Le tenseur de déformation

Les corps solides se déforment, sous l'action des forces extérieures [13]. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position au repos de l'objet. Les éléments du tenseur des déformations  $\epsilon_{ij}$  sont définis par la relation suivante :

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{I-1})$$

avec  $(( X_1 = X , X_2 = Y , X_3 = Z ))$ .

Le tenseur de déformation symétrique s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{I-2})$$

Les éléments diagonaux de ce tenseur définissent les déformations d'élongation, et expriment un changement de longueur dans les directions x, y ou z alors que les déformations notées

$\epsilon_{xy}, \epsilon_{yz}, \epsilon_{zx}$  représentent les variations d'angles entre les axes Ox, Oy et Oz. Les composantes de la déformation sont des rapports de longueurs et par conséquent ils n'ont donc pas de dimension.

L'allongement relatif  $\frac{\delta l}{l}$  mesuré dans une direction quelconque indiquée par le vecteur unitaire  $\vec{d} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  est donné par le calcul ci-dessous :

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right) (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \quad \text{(I-3)}$$

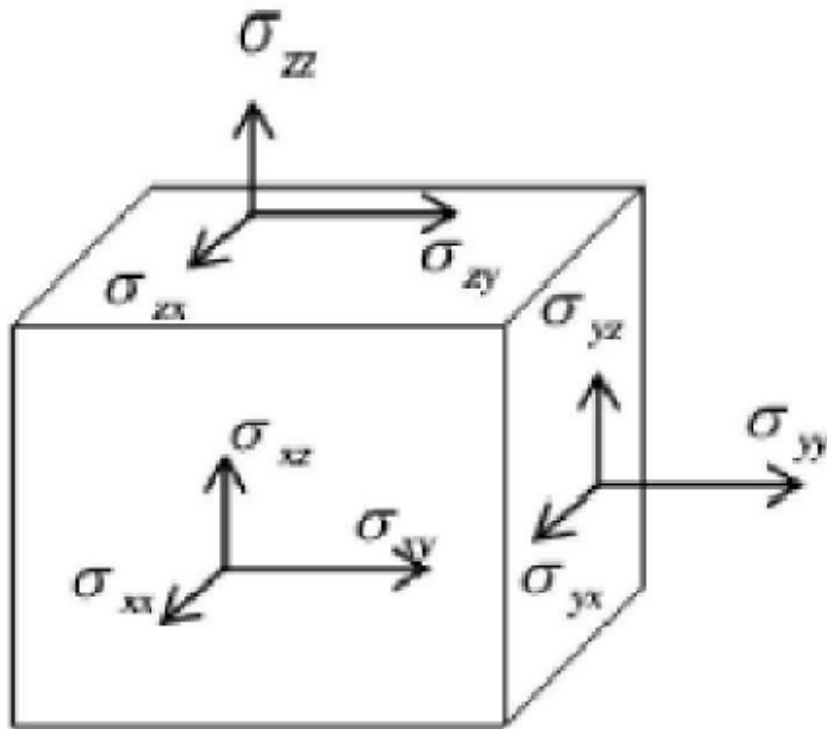
### I-11-3) Le tenseur des contraintes

La contrainte est la force qui s'exerce sur l'unité de surface du solide. Le tenseur des contraintes noté  $\sigma$ , est également représenté par une matrice  $3 \times 3$  symétrique, comme le tenseur des déformations.

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{(I-4)}$$

Dans cette notation,

- Le premier indice (i) indique la direction de la force .
  - Le deuxième indice (j) indique la normale à la facette sur laquelle s'applique la force.
- (voir figure I-6 , ci- dessous)

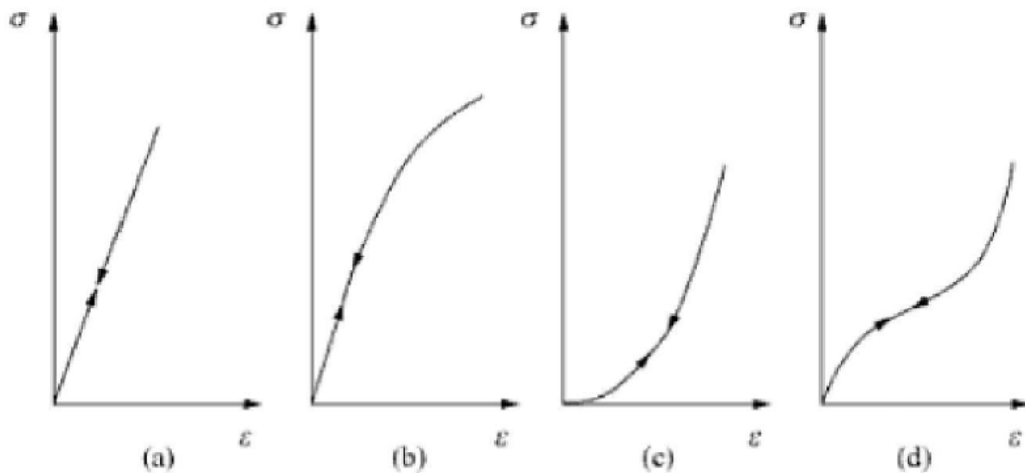


**Figure I.6.** Les composantes du tenseur des contraintes.

Les composantes  $\sigma_{ii}$  sont appelées contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement à une facette de normale  $Ox$ ,  $Oy$  ou  $Oz$ . Les éléments  $\sigma_{ij}$  avec  $j \neq i$  sont les contraintes tangentielles puisque elles agissent dans le plan de la surface. Les composantes de la contrainte ont la dimension d'une force par unité de surface ou d'une énergie par unité de volume [14].

#### **I.11.4 Relation contrainte-déformation**

Le comportement d'un matériau élastique divise en quatre cas sont présentées à la figure I-7 : (a) élasticité linéaire, (b) élasticité non linéaire avec assouplissement, (c) élasticité non linéaire avec raidissement et (d) élasticité non linéaire avec assouplissement suivi d'un raidissement [15] .



**Figure I.7.**Présentations des comportements élastiques.

Deux tenseurs d'ordre 2 peuvent être définis : le tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  et le tenseur des déformations  $\varepsilon_{ij}$ . Ils sont tous les deux symétrique, c'est-à-dire que  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  et  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ . Il existe une relation linéaire entre  $\sigma_{ij}$  et  $\varepsilon_{ij}$ , donnée par la loi de Hooke généralisée [13].

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{I-5})$$

$C_{ijkl}$  est un tenseur d'ordre 4 appelé tenseur de rigidité élastique et il définit les constantes élastiques du matériau. Le nombre de combinaisons possibles de quatre indices  $ijkl$  est de

$3^4 = 81$  éléments . Dans le cas le plus général et par raison de symétrie de  $\sigma_{ij}$  et de  $\varepsilon_{kl}$  et en appliquant la relation de Maxwell  $C_{ijkl} = C_{klij}$  les éléments  $C_{ijkl}$  se réduisent à 21 éléments indépendants.

Les constantes  $C_{ijkl}$  sont donc notées par une nouvelle notation (notation de voigt) , à savoir  $C_{\alpha\beta}$ [10,16] telles que les indices  $ij$  ou  $kl$  sont abrégés en remplaçant chaque paire d'indices initialement quadruplés par un seul indice  $\alpha$  ou  $\beta$ . Ainsi , les abréviations seront comme suit :

$$11 \rightarrow 1 \qquad \qquad \qquad 32 \text{ ou } 23 \rightarrow 4$$

$$22 \rightarrow 2 \qquad \qquad \qquad 31 \text{ ou } 13 \rightarrow 5$$

$$33 \rightarrow 3 \qquad \qquad \qquad 21 \text{ ou } 12 \rightarrow 6$$

Exemple :

$$C_{1111} = C_{11}, C_{1112} = C_{16}, C_{2232} = C_{24}$$

La loi de Hooke généralisée peut écrire sous la forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (\text{I-6})$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{I-7})$$

Le nombre des coefficients  $C_{\alpha\beta}$  indépendants dépend de la symétrie du matériau. Il croît si la symétrie du cristal est réduite : 3 pour un cristal cubique.

### I.11.5. Tenseur des constantes élastiques (cristal à symétrie cubique)

Pour les cristaux de symétrie cubique, le tenseur des constantes élastiques se simplifie symétrie [17] et prend la forme suivante:

$$C_{(\alpha\beta)} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{I-8})$$

Cubique (Contient 3 constantes indépendantes )

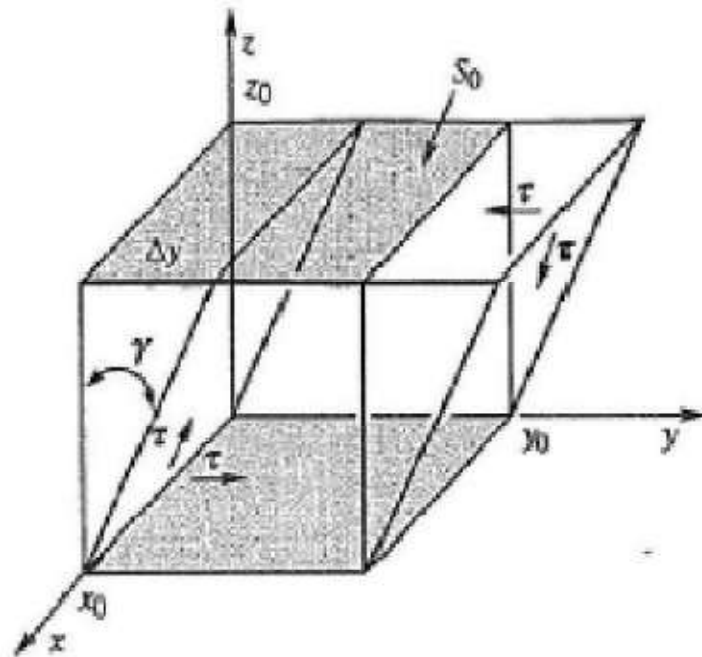
### I.11.6. Cisaillement simple

Soit une tige prismatique fixée par une surface  $s_0$  sur un support rigide, on applique sur la face opposée une force transversale  $F$  parallèle au plan  $xy$ . La relation liant l'angle de

cisaillement  $\gamma = \frac{\Delta y}{z_0}$  et la contrainte de cisaillement  $\tau = \frac{F}{s_0}$  est :

$$\tau = C' \tan \gamma \approx C' \gamma \quad (\text{I-9})$$

C'est le module de cisaillement.



**Figure I.8.** L'angle de cisaillement et la contrainte de cisaillement.

### I.11.7. Extension uni-axiale( Module de Young )

Si on applique une force de traction F sur une éprouvette prismatique figure I-9. On constate:

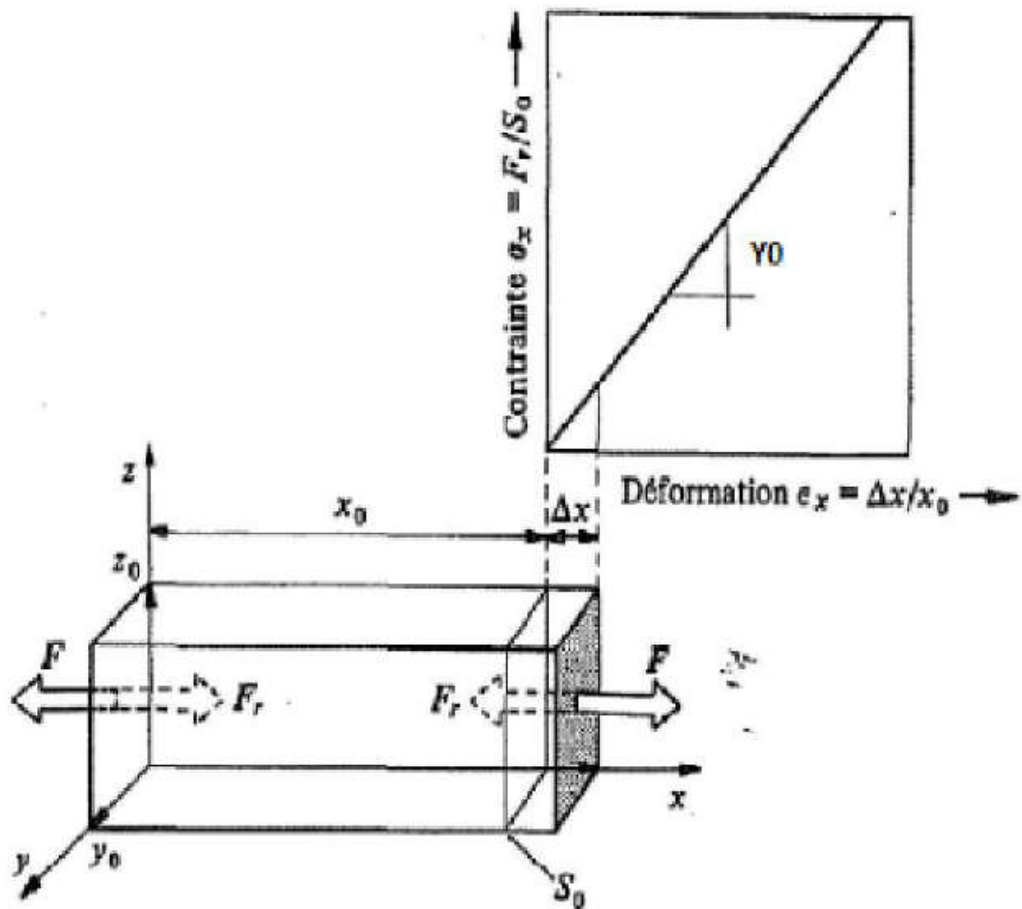


Figure I.9. Allongement d'éprouvette.

- Un allongement de l'éprouvette proportionnel à sa longueur initiale  $x_0$ .

$$\epsilon_x = \frac{\Delta x}{x_0} \quad (\text{I-10})$$

- Apparition d'une force de rétraction  $F_r$  qui est égale en valeur absolue et de sens opposée à la force appliquée  $F$ .

Si on se limite aux petites déformations (max 0.1 %) :

$$\sigma_x = \frac{FR}{S_0} = Y_0 \epsilon_x \quad (\text{I-11})$$

$Y_0$  est le Module de Young ou d'élasticité caractérise la résistance du solide à la déformation uni axiale [18]. Ce module dépend de:

- L'énergie des liaisons entre atomes.
- La nature des forces élastiques de rappel.

La structure du matériau (amorphe, cristallin).

### **I.11.8. Contraction latérale et coefficient de Poisson**

L'allongement  $x$  de l'éprouvette dans le sens de la traction est accompagné d'une augmentation de volume. Si la déformation est élastique il y a une compensation partielle de cette augmentation du volume par contraction latérale de l'éprouvette ( $\Delta y$  et  $\Delta z$ ) suivant les directions perpendiculaires à la traction. Les déformations relatives dans les directions  $y$  et  $z$  sont égaux pour un matériau isotropes et peuvent s'écrire sous la forme [19],

$$\epsilon_y = \frac{\Delta y}{y_0}, \quad \epsilon_z = \frac{\Delta z}{z_0} \quad (\text{I-12})$$

On définit le coefficient de Poisson comme suite:

$$\sigma_0 = -\frac{\epsilon_y}{\epsilon_x}, \quad -\frac{\epsilon_z}{\epsilon_x} \quad (\text{I-13})$$

### **I.11.9. Formules des modules d'élasticités pour les symétries cubiques**

Pour obtenir les grandeurs élastiques des symétries cubiques on utilise souvent deux approches de Voigt et de Reuss. Les modules de Voigt correspondent à faire une moyenne sur les  $C_{ij}$  dans toutes les orientations possibles des grains alors que les modules de Reuss correspondent à la moyenne sur la relation inverse en faisant intervenir les complaisances.

Pour la symétrie cubique les formules qui nous permet de calculer le module de cisaillement et de rigidité sont données par les relations suivantes [20],

$$\begin{cases} G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})} \\ G_V = \frac{3C_{44}+C_{11}-C_{12}}{5} \end{cases} \text{(I-14)}$$

Ainsi le module de rigidité est :

$$B_S = \frac{C_{11}+2C_{12}}{3} \text{(I-15)}$$

Le module de cisaillement est:

$$C' = \frac{C_{11}+2C_{12}}{3} \text{(I-16)}$$

Le module de Young est:

$$Y_0 = \frac{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}{(C_{11}+C_{12})} \text{(I-17)}$$

Le coefficient de Poisson est :

$$\sigma_0 = \frac{C_{12}}{C_{11}+2C_{12}} \text{(I-18)}$$

#### **I.11.10. Les conditions de stabilité mécanique**

Pour les composés III-V la stabilité mécanique traditionnelle conditionne des constantes élastiques dans les cristaux cubiques est su être:

$$c_{11} - c_{12} > 0$$

$$c_{11} > 0$$

$$c_{44} > 0$$

$$c_{11} + 2c_{12} > 0$$

$$c_{12} < B_s < c_{11}$$

#### **I.11.11. Le factor anisotropie**

L'anisotropie élastique est la propriété mécanique de l'être dépendant de la direction. Le facteur d'anisotropie (A) est un paramètre mécanique utile lie aux constantes élastiques dans les cristaux cubiques. Le factor d'anisotropie :

$$A = \frac{c_{11} - c_{12}}{2c_{44}} \quad (\text{I-19})$$

#### **I-12) Propriétés mécaniques (micro-dureté) des matériaux**

La dureté d'un matériau définit la résistance qu'oppose une surface de l'échantillon à la pénétration d'un poinçon. S'il y résiste bien, il est dit dur, sinon il est dit mou. La dureté se mesure sur différentes échelles selon le type de matériau considéré. La micro-dureté est utilisée depuis longtemps pour caractériser le comportement mécanique des matériaux [21] .

Elle est exprimée par la relation suivante :

$$H = 0.139G_v \quad (\text{I-20})$$

Avec:

$$G_v = \left( \frac{c_{44} + c_{11} - c_{12}}{5} \right) (\text{I-21})$$

### **I.13. Les avantages des semi-conducteurs III-V**

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants:

- Leur résistance aux radiations.
- Leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- Leur propriété semi-isolant (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.

Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHz à plus de 100GHz.

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz [20].

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence donc la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des couts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium [20] .

## I.14. Applications Technologiques

Ces propriétés singulières font en sorte que ces matériaux sont destinés à des applications technologiques variées telles que des dispositifs optoélectroniques pour les télécommunications et des cellules photovoltaïques[23,24] plus précisément, les dispositifs ou ces matériaux s'avèrent prometteurs sont les transistors bipolaires à hétérojonctions (HBT) [25] les photodiodes à avalanche (APD), [26] les lasers à émission de surface à cavité verticale (VCSEL), les photo-détecteurs à cavités résonantes (RCE) et les diodes électroluminescentes (LED).

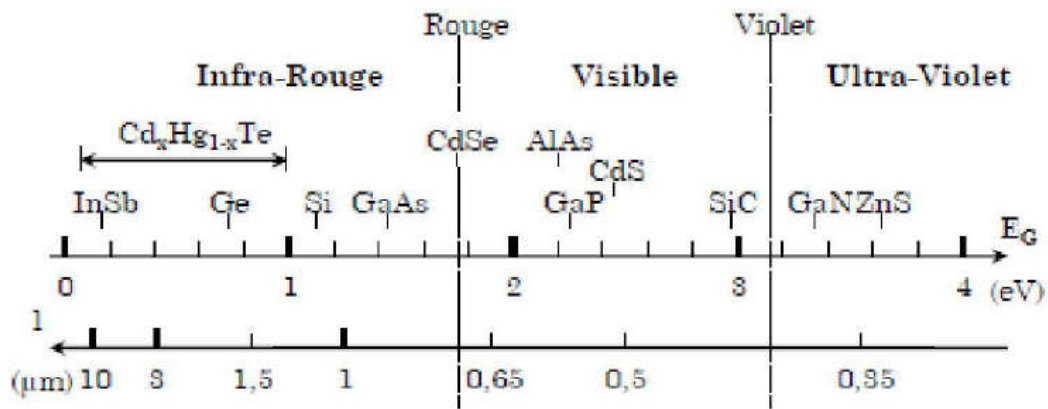


Figure I.10. Spectre optique des semi-conducteurs.

## I.15. Effet de la température :

La structure de bande est la relation entre l'énergie de la particule et son vecteur d'onde  $k$  dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de valence et bande de conduction. La bande de valence est la plus basse, la bande de conduction est la plus haute et la bande interdite ou le gap [27]. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le

maximum absolu de la bande de valence. Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Les semi-conducteurs à gap indirect, leur bande de conduction correspond à de grande masse électrons effective, donc ayant une faible mobilité [28].

La plupart des matériaux binaires possèdent un gap direct. Dans ce cas le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont pour un même point k de la Zone de Brillouin. La largeur du gap varie en fonction de la température, généralement, cette variation est donnée par l'équation de Varshni [29],

$$\mathbf{E}_g(\mathbf{T}) = \mathbf{E}_g(\mathbf{0}) - \frac{\alpha\mathbf{T}^2}{(\mathbf{T}+\beta)} \quad (\mathbf{I-22})$$

Où  $E_g(0)$  est l'énergie de bande interdite pour  $T=0$  K,  $\alpha$  et  $\beta$  sont des paramètres servant à décrire la variation de la bande interdite en fonction de la température. En générale, les semi-conducteurs ont une bande énergétique entre zéro et 4 eV.

Lautenschlager et al. [30], ont récemment proposé une dépendance de la température avec le diamant, par exemple, possède un gap de 5.5 eV, mais encore considéré comme un semi-conducteur. Les matériaux qui ont  $E_g = 0$  s'appellent les semi métal comme HgS, HgTe. Les Semi-conducteurs qui ont  $0 < E_g \leq 0.5$  eV s'appellent les semi-conducteurs étroits d'espace Comme PbS, PbSe. Dans la gamme  $0,5 \text{ eV} < E_g \leq 2 \text{ eV}$ , on trouve les semi-conducteurs les plus importants pour le domaine optoélectronique comme GaAs, GeS, InSb et autres [31,32].

Une équation contenant le facteur d'occupation des phonons de Bose-Einstein [30],

$$\mathbf{E}_g(\mathbf{T}) = \mathbf{E}_B - \alpha_B \left( \mathbf{1} + \frac{2}{\theta} \frac{1}{\exp\frac{\mathbf{T}}{\theta} - 1} \right) \quad (\mathbf{I-23})$$

Où  $E_B$  est le paramètre qui décrit la fréquence moyenne des phonons impliqués et  $\alpha_B$  la force d'interaction.

## Références bibliographiques

- [1] <https://crppwww.epfl.ch/avcp/images/AMMAN.PDF>.
- [2] K. Singh, R.K. Pathak, *Electrochim. Acta* 39 (1994) 2693
- [3] A.H. Souici, Cours de Physique des Semi-conducteurs, Université de Béjaia, 2013/2014
- [4] K.R. Murali, M. Balasubramanian, *Curr. Appl. Phys.* 10 (2010) 734
- [5] K. Singh, R.K. Pathak, *Electrochim. Acta* 39 (1994) 2693
- [6] A. Gueddim, N. Bouarissa, A. Villesuzanne, *Phys. Scr.* 80 (2009) 055702
- [7] M. R. Brozel, G. E. Stillmann: *Properties of Gallium Arsenide*, Centre for Electronic Materials, third edition, 1999, UMIST, UK
- [8] S. Mellal, *Memoire de Magister*, Université de Oum-El-Bouaghi, Algérie, 2008
- [9] T. Chihi, *Thèse de Doctorat*, Université de Sétif, Algérie, 2013
- [10] E. Dieulesaint, D. Royer, *Ondes Elastiques dans les Solides, Application au Traitement du Signal*, Ed. Masson, Paris 6 (1974) 407 p.
- [11] N. Bouarissa, *Comput. Condens. Matter* 22 (2020) e00435
- [12] H. Algarni, O. A. Al-Hagan, N. Bouarissa, T. F. Alhuwaymel, M. A. Khan, *Philos. Mag.* 98 (2018) 2582
- [13] A. Gicquel, *Diamond and Related Materials*, 20 (2011) 875
- [14] T. Ouisse, D. Chaussende, L. Auvray, *J. Appl. Cryst.* 43 (2010) 122
- [15] P. Navi, *Propriétés acoustiques des matériaux : Propagation des ondes planes harmoniques*, 2006
- [16] P. Pavlov, A. Khokhlov, *Physique du Solide*, Ed. Mir, Moscou, 1989, 416p
- [17] J. Nye, *Propriétés Physiques des Cristaux* (Edition Dunod, Paris, 1961)
- [18] C. Kittel, *Introduction a la Physique de l'Etat Solide*, Dunod, 1972

- [19] K. B. Panda, K. S. R. Chadran, *Acta Mater* 54 (2006)1641
- [20] T. Derri, Mémoire de Master, Université de M'sila, Algeria, 2019
- [21] J. Zimmermann, Thèse de Doctorat D'état, Université de Lile I, France, 1980
- [22] W. T. Anderson, Simulation of Semiconductor Device Failure Mechanisms, Naval Research Laboratory, Washington. D. C, Fraunhofer Institute, Freiburg, Germany, 2003
- [23] J. F. Geisz, D. J. Friedman, III-N-V Semiconductors for Solar Photovoltaic Applications, *Semicond. Sci. Technol.* 17 (2002) 769
- [24] Y. Zhang, A. Mascarenhas, S. K. Deb, H. P. Xin, C. W. Tu, Heavily Nitrogen-doped III-V Semiconductors for High-efficiency Solar Cells, Proceedings of 28th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2001, p.1189, IEE
- [25] C. W. Tu, *J. Phys. Condens. Matter.*13 (2001) 7169
- [26] G. S. Kinsey, D. W. Gotthold, A. L. Holmes Jr., J. C. Campbell, *Appl.Phys.Lett.*77 (2000) 1543
- [27]P.Y.Yu , M. Cardona, "Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties, Springer, Berlin, 1996
- [28] K. Guerra, Mémoire de Master, Université de M'sila, Algérie, 2016
- [29] F. Guillot, Thèse de Doctora, Université Joseph Fourier-Grenoble I., France, 2007
- [30] N. Baghdadli, Memoire de Magister, Université de Tlemcen, Algérie, 2013
- [31] M. A. Khan, H. Algarni, N. Bouarissa, *Optik*176(2019) 366
- [32] K. Kassali, N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 76 (2002) 255

## **Chapitre II**

### **Laméthodedupseudo-potentiel**

## II.1. Introduction

Le pseudo-potentielle a été proposé dans les années 1930 par Fermi pour l'étude des états atomiques des couches minces [1,2]. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Phillips et Kleinman [3,4] qui sont basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W.).

Ainsi, le théorème d'annulation de Phillips-Kleinman [3,4] qui est pris de la méthode des ondes planes orthogonalisées, a montré que les électrons de valence présentent expérimentalement un potentiel répulsif lorsqu'ils sont proches du cœur, ce potentiel répulsif agit pour tenir les électrons de valence en dehors du cœur. Finalement, on obtient par effet d'annulation le "pseudo-potentiel".

Ceci est obtenu par l'utilisation de la méthode des éléments finis non linéaires (N.F.E.M) ou autre méthode pour résoudre l'équation de Schrödinger.

## II. 2. Formulation mathématique

Le potentiel du cristal est faible, donc la résolution de l'équation de Schrödinger, est faite à partir de la méthode des N.F.E.M.

La fonction d'onde du cristal est donnée par:

$$\Psi = \Phi + \sum c_{\mathbf{G}} \Phi_{\mathbf{G}} \quad (\text{II-1})$$

La fonction d'onde doit être orthogonale aux états du cœur, c'est à dire:

$$\langle \Phi_c | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{II-2})$$

Ce qui nous donne:

$$\Psi = \Phi - \sum \langle \Phi_c | \Phi \rangle \Phi_c \quad (\text{II-3})$$

Avec  $\Psi$  est la fonction d'onde, elle satisfait l'équation de Schrödinger:

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{II-4})$$

En remplaçant la fonction d'onde par son expression dans l'équation de Schrödinger on obtient:

$$H\Phi + \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle = E\Phi \quad (\text{II-5})$$

Phillips et Kleinman ont noté que l'orthogonalisation des ondes planes aux états du cœur est formellement équivalente à l'introduction d'un terme répulsif  $V_R$ , donc on peut réécrire l'équation (II-5) d'une façon condensée comme suit [5,6],

$$(H + V_R) \Phi = E \Phi \quad (\text{II-6})$$

Où

$V_R$  est le potentiel répulsif

$$V_R \Phi = \sum (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle \quad (\text{II-7})$$

On est donc arrivé à formuler l'équation qui est satisfaite par  $\Psi$  sans oublier de noter que la valeur propre de l'énergie  $E$  n'est pas un pseudo-énergie mais la vraie énergie correspondant à la vraie fonction d'onde.

Le pseudo-potentiel est défini comme étant la somme du potentiel cristallin et le potentiel  $V_R$ :

$$H + V_R = T + V_c + V_R = T + V_P \quad (\text{II-8})$$

ou  $V_P = V_C + V_R$  est le pseudo-potentiel, la pseudo-équation de Schrödinger est donnée par:

$$(\mathbf{H} + V_R)\Phi = E\Phi \quad (\text{II-9})$$

Le potentiel  $V_R$  s'oppose au potentiel attractif cristallin  $V_C$ . Il est important de noter que  $V_R$  est très faible ce qui justifie l'utilisation de la méthode N.F.E.M pour résoudre l'équation de Schrödinger [7].

L'équation (II-9) devient:

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_C + V_R \right) \Phi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \quad (\text{II-10})$$

$V_P$  devient faiblement attractif dans la

région du cœur et faiblement répulsif dans la région des électrons de valence.

Le pseudo-potentiel est considéré comme une perturbation, les éléments matrices du potentiel  $V_R$  sont données par [6]:

$$\langle \Psi | V_R | \Psi \rangle = \sum_c (E^V - E^c) \langle \Psi | \int dr \Psi^{c*} \Psi | \Psi \rangle^2 \quad (\text{II-11})$$

Etant donné que  $E^V$  est légèrement supérieure à  $E^c$ , donc  $V_R$  est toujours positif ainsi  $V_P$  est très faible, d'où l'utilisation de la théorie des électrons presque libres pour le calcul

des niveaux de valence.

Si on néglige l'effet du cœur, le pseudo-potentiel devient local et dépend explicitement de la position  $r$ . Si on néglige l'effet du cœur, le pseudo-potentiel peut être écrit comme suit [8]:

$$V_R = V(R, r) = \sum_c (E - E_c) | Q(r) \rangle \langle Q_c(r) | Q \rangle \quad (\text{II-12})$$

Où la fonction  $Q$  dépend de  $r$ .

Si on tient compte de l'effet du cœur, le pseudo-potentiel devient non local.

L'expression non locale du pseudo-potentiel est réservée pour le moment angulaire, puisque  $V_R$  est la somme sur les états occupés du cœur.

### II.3. Les modèles du pseudo-potentiel

La méthode du pseudo-potentiel est basée principalement sur des données expérimentales telle que l'analyse des paramètres cristallins au rayon X, la réflexion et l'absorption des cristaux [5]. Il existe deux sortes de pseudo-potentiels : le pseudo-potentiel local et le pseudo-potentiel non local.

### II.3.1. Le modèle local

Dans cette méthode, pour déterminer les fonctions propres et les valeurs propres de l'équation de Schrödinger, on s'attend nécessairement que l'on ait toujours une forme de potentiel. En fait, un potentiel local dépendant de la variable  $r$ , reste le modèle le plus simple pour ce fait, plusieurs formes du potentiel ont été proposées.

Le premier est considéré comme un potentiel Coulombien à une distance large et un potentiel constant dans la région du cœur, il est présenté sous la forme suivante [9].

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z e^2}{r} & r > r_c \\ -Z_c e^2 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-13})$$

Où:

$Z$ : est la valence atomique.

$r_c$  est le potentiel utilisé pour ajuster les données atomiques.

Abarenkov

et

Heine ont introduit un potentiel considéré comme constant dans la région du cœur, dans ce cas le potentiel est [10],

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-14})$$

Enfin Ashcroft a proposé dans son modèle une autre forme de potentiels similaire qui est beaucoup utilisée, c'est le potentiel du cœur inoccupé. Ashcroft a proposé dans son modèle une autre forme de potentiels similaire qui est beaucoup utilisée, c'est le potentiel du cœur inoccupé « the empty core potential » donnée par [9, 11],

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-15})$$

### II.3.2. Le modèle non local

Le pseudo potentiel est à l'origine non local, il dépend de  $r$  et de l'énergie  $E$ . La dépendance en énergie peut être ainsi introduite, en remplaçant la constante  $A$  par des constantes différentes  $A_l(E)$  dans la région du cœur et cela pour chaque valeur  $l$  du nombre quantique.

On peut donc écrire le pseudo potentiel non local sous la forme suivante [12],

$$V^P = V_{NL}(r, E) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{II-16})$$

*Ou*

*A<sup>l</sup>*: Une fonction dépendante de l'énergie des états du cœur.

*F<sup>l</sup>*: Une fonction qui représente l'effet des états du cœur.

*P<sub>z</sub>*: L'opérateur projecteur de la 1<sup>ème</sup> composante des moments angulaires.

La fonction  $f_l(r)$  peut prendre plusieurs formes telles que la forme Gaussienne, Heine-Abernkov et la forme de Ashcroft.

### **II.3.2.1. Le modèle de Heine-Abernkov [13,14]**

Heine et Abernkov ont proposé une méthode pour obtenir un modèle de pseudo-potentiel pour les métaux. L'information sur l'ion est déduite des niveaux d'énergie atomiques des données spectroscopiques plutôt que d'un calcul élaboré de mécanique quantique. Le pseudo-potentiel peut se mettre sous la forme suivante (Figure II-1):

$$V^l = A^l \Theta(R^l - r) \quad (\text{II-17})$$

Ou:

$A^l$ : caractérise la profondeur du puits de potentiel carré.  $S(r)$

$R^l -$

$r$ ): est une fonction stimulant l'effet du cœur.  $R^l$  représente

le rayon du cœur ionique.

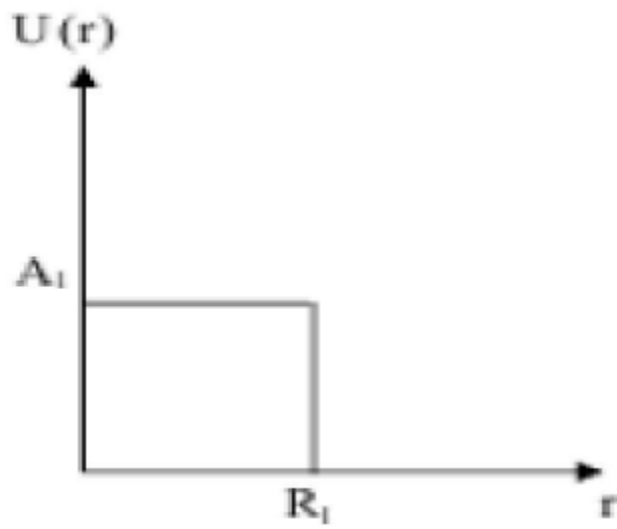
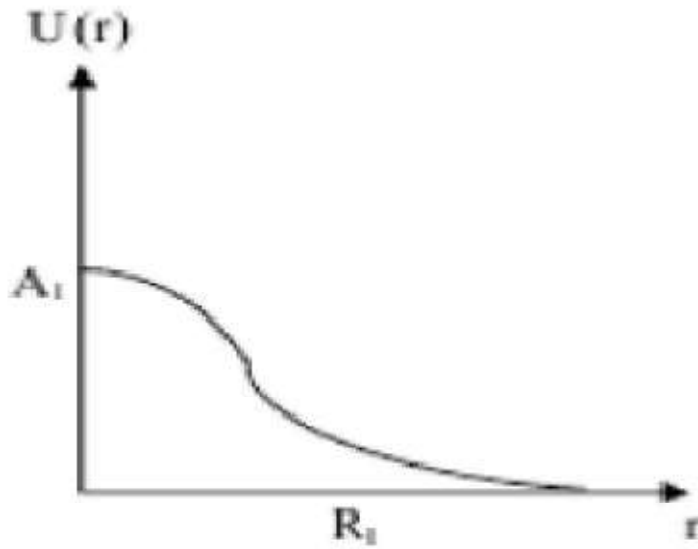


Figure 11.1. Fonction de Heine-Abarenkov

### II.3.2.1. Le modèle de Gauss [15-17]

La fonction de Gauss est donnée par l'expression [18],

$$F(r) = \exp\left(-r/R\right)^2 \quad (\text{II-18})$$



**Figure 2.** Fonction de Gauss

### II.3.2. 3. Le modèle d'Ashcroft [11,19]

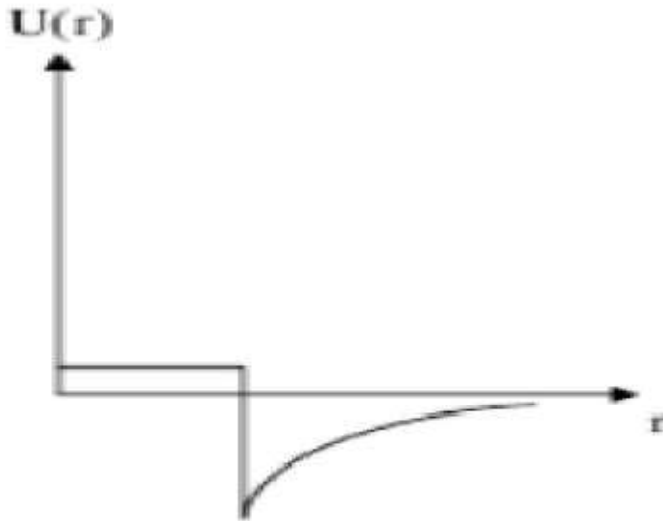
Dans ce modèle:  $F(r)=0$  (II-19)

Cette dernière

équation confirme que le potentiel répulsif dû à l'orthogonalisation de la fonction d'onde des électrons

de conduction sur les états du cœur,

invalide le potentiel coulombien à l'intérieur du cœur ionique.



**Figure II.3.** Fonction d'Ashcroft

#### **II.4. La méthode empirique du pseudo potentiel (l'E.P.M)**

C'est une autre variante de la méthode des pseudo potentiels permettant de déterminer les paramètres entrant dans le calcul de la structure de bande électronique, en utilisant des données expérimentales [20]. On peut dire que cette technique a été appliquée avec succès aux semi-conducteurs de structure spécifique, diamant et zinc blende [21-26].

L'EPM a deux approximations importantes :

- L'approximation empirique locale.
- L'approximation empirique non locale.

### II.4.1. La méthode empirique de pseudo-potentiel local (EPM)

La méthode empirique de pseudo-potentiel se applique dans les semi-conducteurs diamants ou zincblende, l'étude sur ces matériaux est basée sur une approximation locale [27]. Cette méthode est très importante dans les calculs de la structure des bandes électroniques [28].

Dans cette technique, la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelques termes de  $V(G)$  que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations faites sur la réflexion et l'absorption des cristaux. On peut dire autrement que L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de formes  $V(G)$  du pseudo potentiel  $V_p(r)$  que l'on imagine être une superposition linéaire des pseudo potentiels atomiques et peut être écrit comme suit [29],

:

$$V_p(r) = \sum_G V_\alpha(r - R - \tau) \quad (\text{II-20})$$

$R$  est un vecteur du réseau direct.

$\tau$  est le vecteur de translation du réseau direct.

Si on étend le potentiel dans le réseau réciproque, il aura la forme suivante:

$$V_P(r) = \sum_{G \leq G_0} V(G) \exp(iG.r) \quad (\text{II-21})$$

Avec

$$V(G) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(G) V_{\alpha}(G) \quad (\text{II-22})$$

$V_{\alpha}(G)$  est le facteur de forme

$S(G)$  est le facteur de structure donné par [30],

$$S_{\alpha}(G) = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_r \exp(iG.r) \quad (\text{II-23})$$

$N_{\alpha}$  étant le nombre d'atomes de base.

Dans le cas des composés  $A^N B^{\&N}$  cristallisant dans la structure zincblende, les facteurs

de formes symétriques et antisymétriques sont donnés par [31].

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) + V_B(G)] \quad (\text{II-24})$$

$$V^A(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) - V_B(G)] \quad (\text{II-25})$$

Avec :

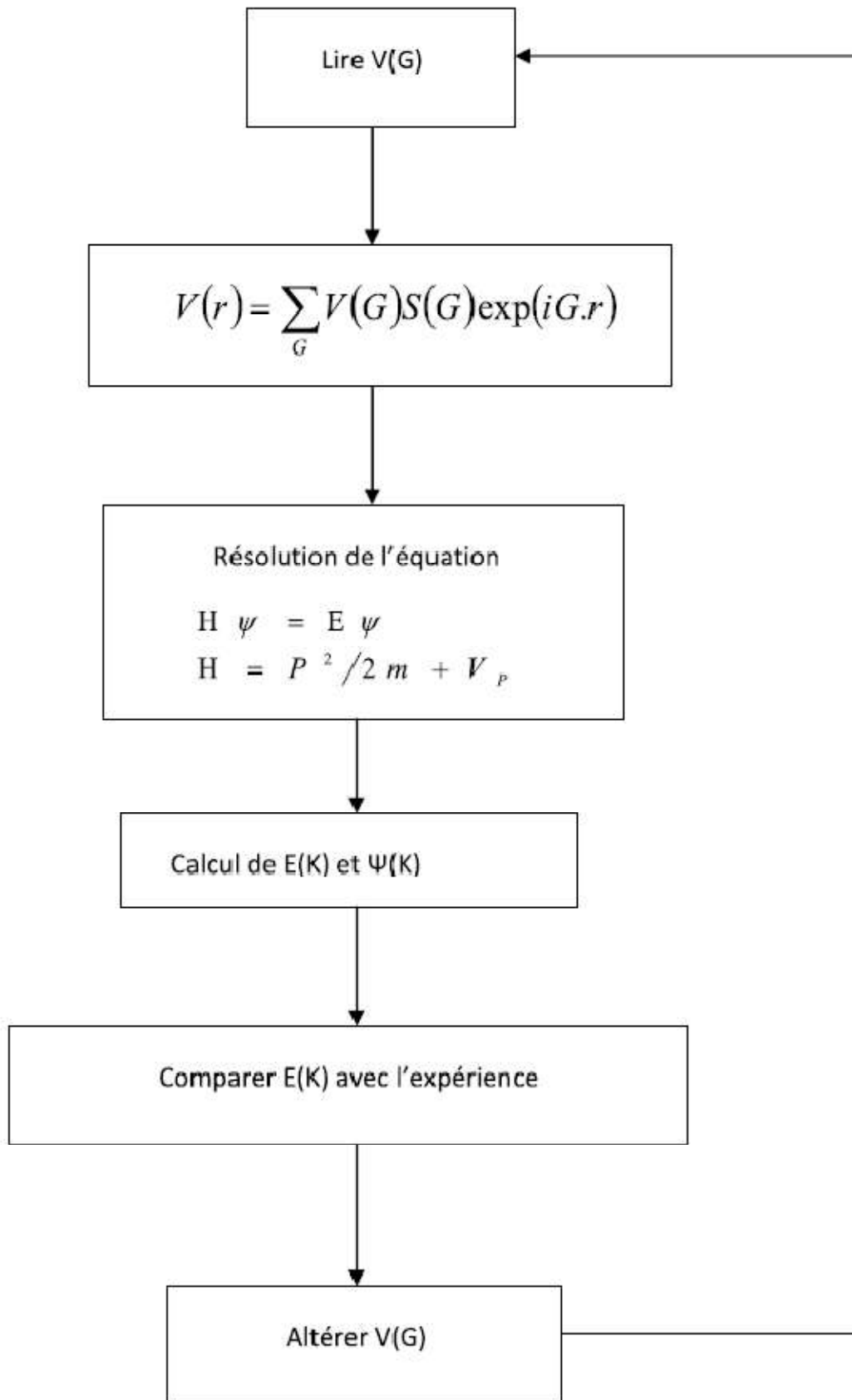
$V^S$  est le facteur de forme symétrique.

$V^A$  est le facteur de forme antisymétrique.

Le potentiel  $V(G)$  est attractif pour les  $G$  faibles et devient positif à cause de la nature répulsive du cœur atomique pour les grands  $G$  et lorsque  $G$  devient très petit le potentiel devient faible [8].

Cette approximation se base sur l'interpolation des facteurs de forme à partir de expériences comme l'expérience de la réflectivité et pour la raison que le potentiel  $V(G)$  soit plus faible pour les petites valeurs de  $G$ , on se limite à quelques facteurs de forme [30,31].

La procédure de calcul de la méthode EPM est illustrée dans le diagramme suivant:



**Figure.11.4.** Diagramme de la procédure de calcul par EPM.

## References

- [1] R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* Cambridge University Press, 2004
- [2] R. D. Lide, *CRCHandbook of Chemistry and Physics*, 87th (2007)
- [3] J. C. Phillips, L. Kleinman, *Phys. Rev.* 116(1959)287
- [4] J. C. Phillips, *Phys. Rev.* 112(1958) 685
- [5] F. D. Mumaghan, J. Wang, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 300(1944)244
- [6] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot, D. Wolf, *Phys. Rev. B* 52(1995) 12627
- [7] T. Kobayasi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci., Tokoku. Univ.* 2(1993)7
- [8] A. KanGarlu, *Phys. Rev. B* 38(1998)9790
- [9] K. Ichino, Y.-H. Wu, Y. Kawakami, S. Fujita, S. Fujita, *J. Crystal Growth* 117 (1992) 527
- [10] J. C. Philips and K. C. Pandey, *Phys. Rev. Lett.* 30(1973) 787
- [11] N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. Lett.* 23(1966) 48
- [12] G.-D. Lee, M. H. Lee, J. Ihm, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 1459
- [13] L. V. Abarenkov, V. Heine, *Phil. Mag.* 13(1965)559
- [14] M. L. Cohen and V. Heine, *Solid State Physics* 24, Eds, H. Emenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic press, New York) p37-248 (1970)
- [15] V. Heine, *Solid State Phys.* 24(1970) 1
- [16] M. Gellertal., *Phys. Rev. B* 35(1987) 1196
- [17] H. Nara and A. Morita, *J. Phys. Soc. Jpn.* 21(1966) 1852
- [18] F. Mezrag, PhD thesis, University of Biskra, Algeria, 2012
- [19] W. A. Harrison, «Pseudopotentials in the theory of metals», Benjamin, New York,

1966, 336 p.

[20] A. G. Areshkin, G.S. Pekar, G.N.Polissskii, T.B. Popova, L.G. Suslina, D.L.Fedorov,  
Sov.Phys.-Solid State 28 (1986) 2109

[21] K. Kassali, N. Bouarissa, Microelectron. Eng. 54 (2000) 277

[22] N. Bouarissa, Infrared Phys. Technol. 39 (1998) 265

[23] F. Benmakhlouf, A. Bechiri, N. Bouarissa, Solid State Electron. 47 (2003) 1335

[24] N. Bouarissa, S. Bougouffa, A. Kamli, Semicond. Sci. Technol. 20 (2005) 265

[25] N. Bouarissa, Phys. B 406 (2011) 2583

[26] N. Bouarissa, Solid State Electron. 44 (2000) 2193

[27] N. Bouarissa, R. Bachiri, Physica B 322 (2002) 193

[28] M.L.Cohen

and J.R.Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Berlin: Springer (1989)

[29] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285

[30] J.M.Baranowski, J.Phys. C 17 (1984) 6287

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

# **Chapitre III**

## **Résultats et discussion**

## Résultats et discussion

Dans ce travail, nous avons effectué un calcul semi-empirique à l'aide de la méthode du pseudopotential [1-3], afin d'étudier la dépendance en température des propriétés élastiques du composé semi-conducteur binaire GaAs. La température d'étude a été étalée dans une gamme allant jusqu'à 600 K.

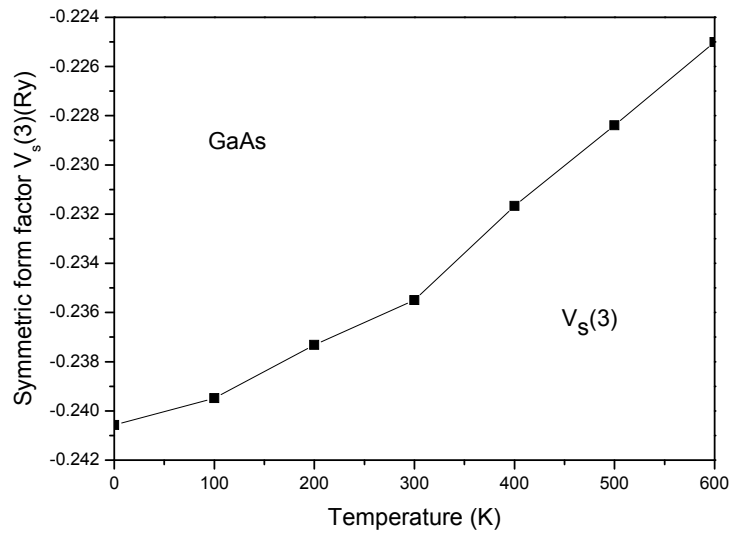
Les calculs semi-empiriques exigent l'ajustement de certains facteurs de formes dites symétriques et antisymétriques des semi-conducteurs d'intérêt. Pour cela, nous avons effectué un ajustement des facteurs de formes du composé binaire semi-conducteur GaAs en utilisant la méthode des moindres carrés non linéaires comme décrit dans les références [4-6]. Nos résultats concernant les facteurs de formes symétriques et antisymétriques ajustés du composé binaire semi-conducteur GaAs dans la phase zinc-blende et à température ambiante sont présentés dans le tableau III.1.

**Tableau III.1.** Facteurs de formes symétriques ( $V_S$ ) et antisymétriques ( $V_A$ ) ajustés, exprimés en Ryd du composé semi-conducteur GaAs dans la phase zinc-blende et à température ambiante.

$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01

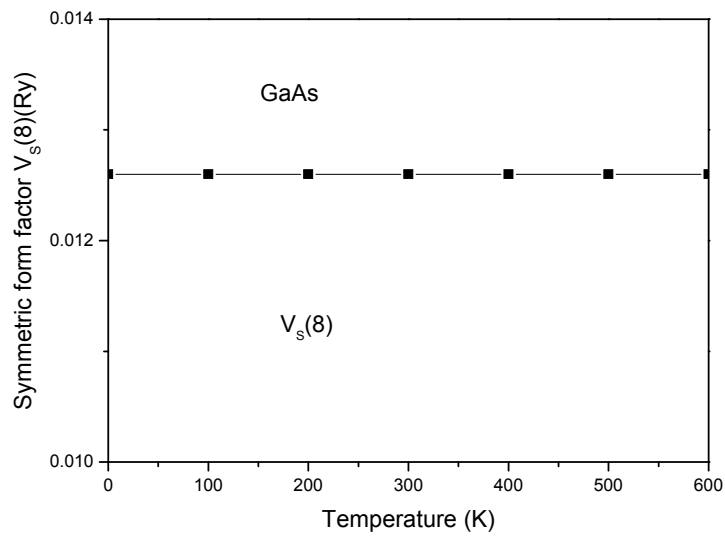
L'ajustement des facteurs de formes a été réalisé pour les différentes températures dans la gamme 0-600 K. Figure III.1 représente la variation du facteur de forme symétrique  $V_S(3)$  en fonction de la température dans l'intervalle allant de 0 à 600 K pour le semi-conducteur

binaire GaAs. On remarque que lorsqu'on augmente la température en allant de zéro à 600 K,  $V_S(3)$  augmente aussi. Le comportement de  $V_S(3)$  en fonction de la température varie d'une manière monotone et non-linéaire.



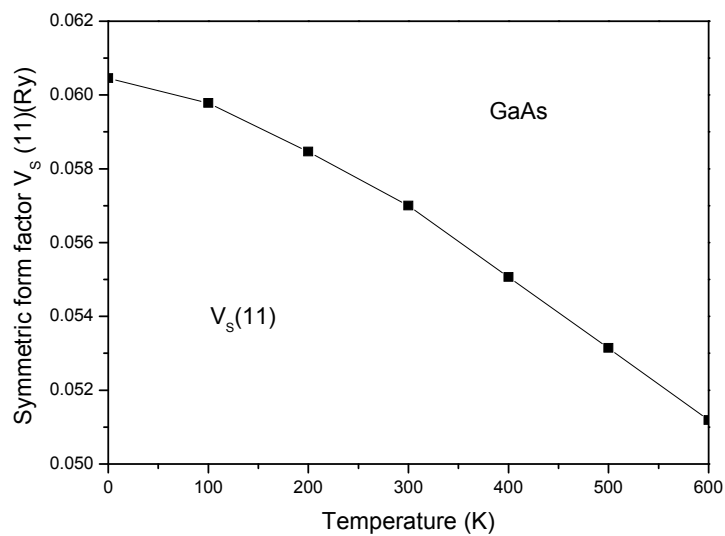
**Figure III.1.** Variation du facteur de forme symétrique  $V_S(3)$  en fonction de la température pour GaAs.

Figure III.2 montre le changement du facteur de forme symétrique  $V_S(8)$  en fonction de la température dans la gamme allant de 0 à 600 K pour le semi-conducteur binaire GaAs. Notons que lorsque la température est augmentée en allant de zéro à 600 K,  $V_S(8)$  reste toujours constant à une valeur de 0.0126 Ryd. Donc on peut dire que  $V_S(8)$  est indépendant de la température (n'est pas sensible à la température).



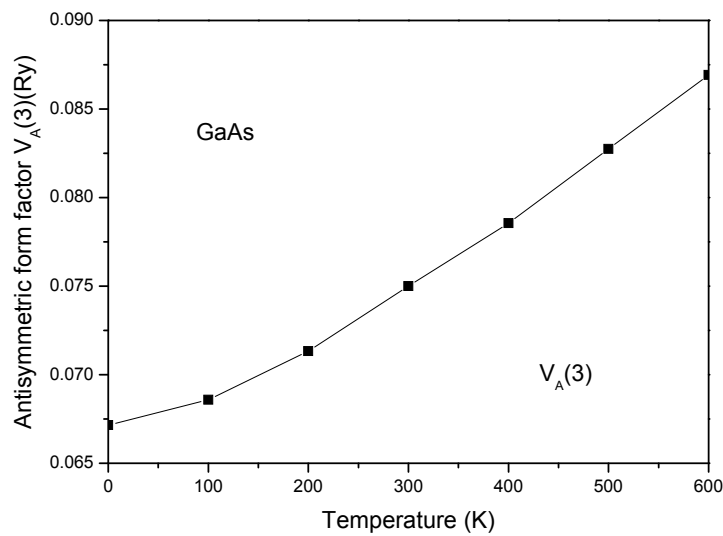
**Figure III.2.** Variation du facteur de formesymétrique  $V_s(8)$  en fonction de la température pour GaAs.

Figure III.3 représente la dépendance en température du facteur de forme symétrique  $V_s(11)$  pour le semi-conducteur binaire GaAs. On remarque que lorsqu'on augmente la température en allons de zéro a 600 K,  $V_s(11)$  diminue d'une manière monotone et non-linéaire.



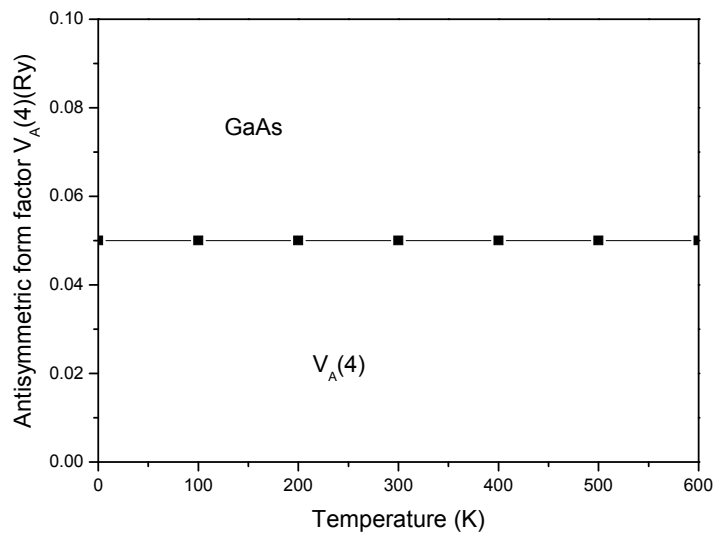
**Figure III.3.** Variation du facteur de formesymétrique  $V_s(11)$  en fonction de la température pour GaAs.

Figure III.4 représente le changement du facteur de forme antisymétrique  $V_A(3)$  en fonction de la variation de la température dans l'intervalle allant de 0 à 600 K pour le semi-conducteur binaire GaAs. Nous observons que l'élévation de la température de zéro à 600 K mène à une augmentation non-linéaire de  $V_A(3)$ . Cette augmentation de  $V_A(3)$  varie d'une façon monotone.



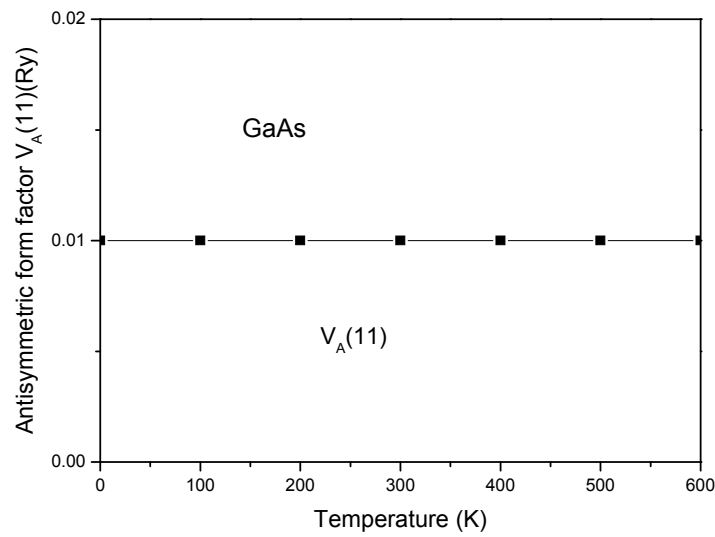
**Figure III. 4.** Variation du facteur de forme antisymétrique  $V_A(3)$  en fonction de la température pour GaAs.

La variation du facteur de forme antisymétrique  $V_A(4)$  en fonction de la température dans l'intervalle allant de 0 à 600 K pour le semi-conducteur binaire GaAs est illustrée dans la Figure III.5. Notons que l'augmentation de la température dans l'intervalle zéro à 600 K, n'affecte pas  $V_A(4)$  qui reste constant et égale à une valeur de 0.05 Ryd. Donc on peut conclure que l'effet de la température sur  $V_A(4)$  est négligeable.



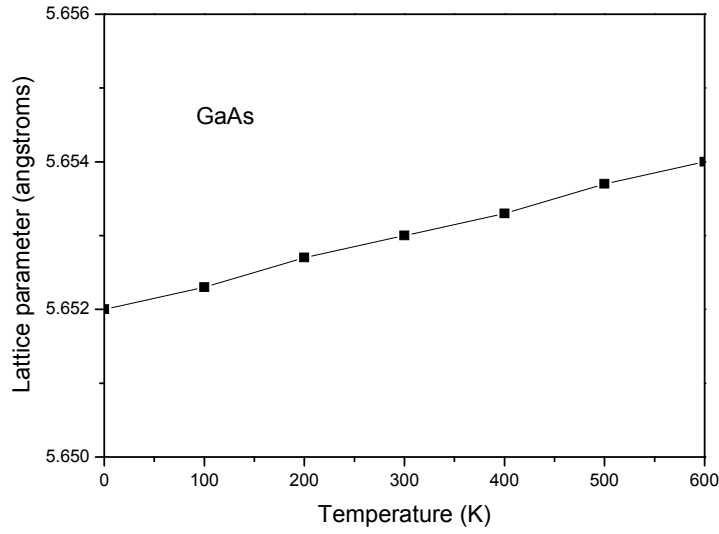
**Figure III.5.** Variation du facteur de forme antisymétrique  $V_A(4)$  en fonction de la température pour GaAs.

Figure III.6 représente la variation du facteur de forme antisymétrique  $V_A(11)$  en fonction de la température dans l'intervalle allant de 0 à 600 K pour le semi-conducteur binaire GaAs. On remarque que lorsqu'on augmente la température en procédons de zéro à 600 K,  $V_A(11)$  reste toujours constant à une valeur de 0.01 Ryd. Donc on peut dire que  $V_A(11)$  n'est pas sensible à l'effet de la température.



**Figure III.6.** Variation du facteur de forme antisymétrique  $V_A(11)$  en fonction de la température pour GaAs.

Le paramètre du réseau cristallin est aussi important pour décrire la maille d'un cristal. Ce paramètre dépend de la température. Donc, la dépendance en température de ce paramètre est très utile. A cet effet, la figure III.7 représente la variation du paramètre de réseau en fonction de la température pour le gallium d'arsenic (GaAs). Nous remarquons que lorsque la température augmente en allant de 0 à 600 K, le paramètre de réseau augmente aussi. Le comportement est monotone. L'augmentation du paramètre de réseau avec l'élévation de la température est due au phénomène de la dilatation thermique. En effet, pour des températures proches de la température zéro, les atomes restent centrés sur leur position moyenne. A basses températures, les potentiels interatomiques peuvent être décrits de façon harmonique. Cela n'est pas le cas pour des températures élevées: l'anharmonicité des potentiels interatomiques introduit une dépendance de la position moyenne des atomes avec la température.



**Figure III.7.** Variation de paramètre du réseau en fonction de la température pour GaAs.

Les propriétés élastiques des matériaux semi-conducteurs sont très importantes pour la compréhension de beaucoup de leurs propriétés fondamentales [7-18]. Pour les cristaux qui possèdent des éléments de symétrie, ce qui est exactement le cas des cristaux cubiques, le nombre des constantes élastiques est réduit et devient trois à savoir:  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ [19]. .

Dans ce présent travail, les constantes élastiques  $C_{11}$  et  $C_{12}$  ont été calculée en utilisant la même méthodologie que celle utilisée par Bouarissa [20], ou  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont exprimées par les relations suivantes:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[ 4.37 \frac{\hbar^2}{m} (5 + \lambda) (1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} - 0.6075 (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} \right] \quad (\text{III.1})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[ 4.37 \frac{\hbar^2}{m} (3 - \lambda) (1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} + 0.6075 (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} \right]$$

(III.2) Dans les équations (III.1) et (III.2),  $m$  représente la masse de l'électron,  $d$  représente la distance entre les plus proches voisins qui est égale  $a$ :

$$d = \frac{\sqrt{3}a}{4} \quad (\text{III.3})$$

$\alpha_p$  représente la polarité définie par Vogl [21,22 ] comme suit:

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{III.4})$$

et  $\lambda$  est un paramètre sans dimension qui a une valeur de 0.738 [23].

La constante élastique  $C_{44}$  est calculée en utilisant la relation suivante qui a été obtenue en se basant sur le modèle de champ de la force de valence [24,25],

$$C_{44} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{7C_{11} + C_{12}}$$

(III.5)

Les constantes élastiques ( $C_{ij}$ ) évaluées pour le GaAs a température de 300 K sont portées dans le tableau III.2. Les résultats expérimentaux rapportés dans la littérature sont aussi présentés a titre de comparaison. Nos résultats semblent être en bon accord avec ceux de l'expérience.

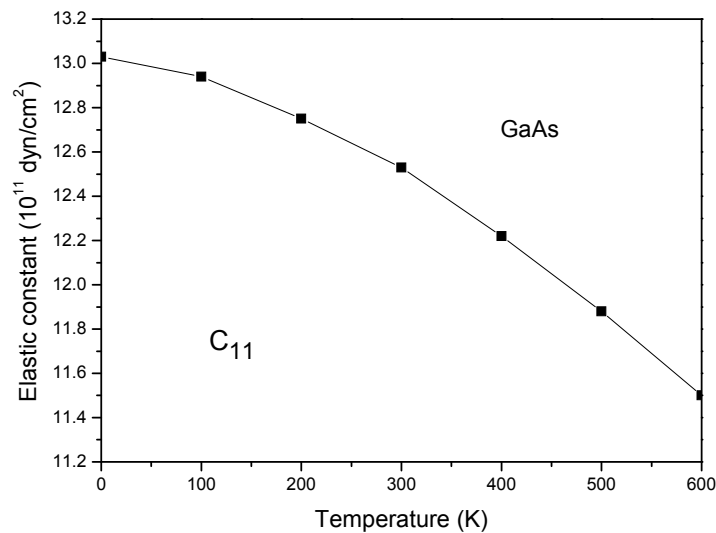
**Tableau III.2.** Constantes élastiques ( $C_{ij}$ ) du composé semi-conducteur GaAs dans la phase zinc-blende et a température ambiante.

$C_{11}(\times 10^{11} \text{dyn/cm}^2)$		$C_{12}(\times 10^{11} \text{dyn/cm}^2)$		$C_{44}(\times 10^{11} \text{dyn/cm}^2)$	
Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]	Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]	Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]
12.45	11.88	5.42	5.38	5.07	5.94

<sup>a</sup>Nos calculs.

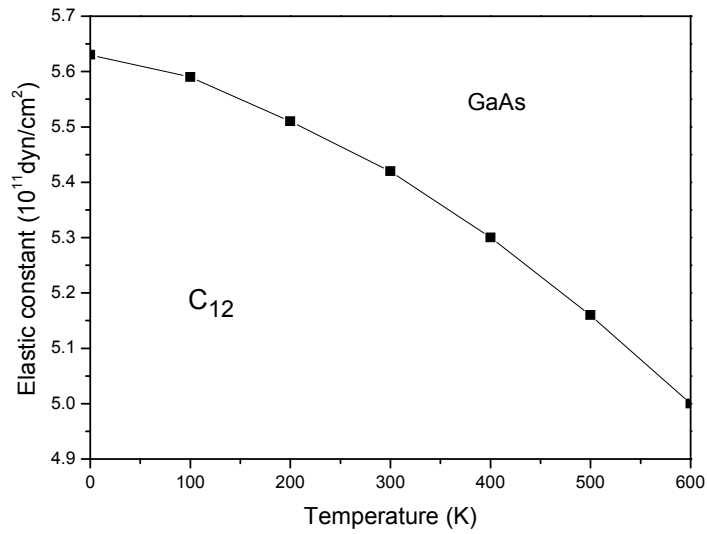
Il est important de remarquer que la valeur de  $C_{11}$  est supérieure à ceux de  $C_{12}$  et  $C_{44}$ . Cela indique que le matériau sous investigation est plus résistant à la compression unidirectionnelle qu'à la déformation de cisaillement.

La variation de la constante élastique indépendante  $C_{11}$  en fonction de la température pour le composé binaire GaAs est montrée sur la figure III.8. La figure III.8 montre qu'en augmentant la température de zéro jusqu'à 600 K,  $C_{11}$  diminue. Son comportement est monotone et non-linéaire.



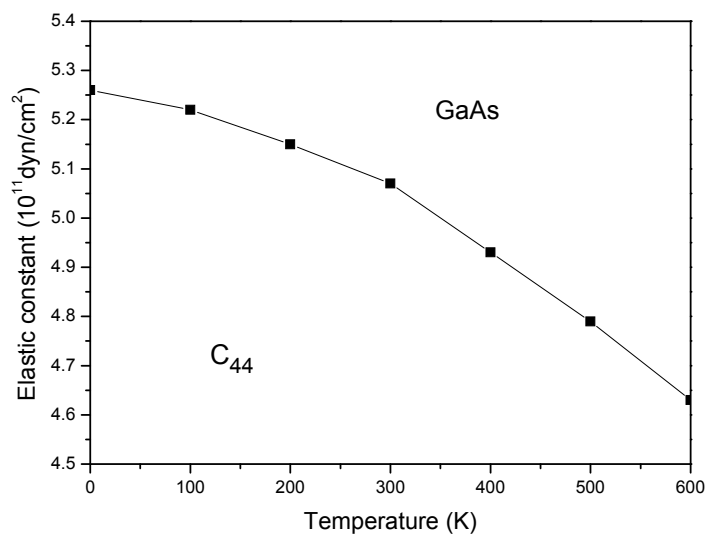
**Figure III.8.** Constante élastique  $C_{11}$  en fonction de la température pour GaAs.

La figure III.9 montre l'évolution de la constante élastique indépendante  $C_{12}$  en fonction de la température pour le composé binaire GaAs. D'après cette figure on remarque que lorsque la température augmente en allant de zéro jusqu'à 600 K,  $C_{12}$  diminue. La diminution de  $C_{12}$  en fonction de la température est monotone et son comportement est non-linéaire.



**Figure III.9.** Constante élastique  $C_{12}$  en fonction de la température pour GaAs.

La variation de la constante élastique indépendante  $C_{44}$  en fonction de la température pour le composé binaire GaAs est montrée sur la figure III.10. On remarque que  $C_{44}$  diminue par l'augmentation de la température en allant de zéro jusqu'à 600 K.  $C_{44}$  montre aussi un comportement monotone et non-linéaire.



**Figure III.10.** Constante élastique  $C_{44}$  en fonction de la température pour GaAs.

On remarque que le comportement de tous les  $C_{ij}$ 's par rapport a la température est monotone et non-linéaire. Néanmoins, le taux de variation de  $C_{11}$  par rapport a la température semble être plus important que ceux de  $C_{12}$  et  $C_{44}$ . Il est important de noter que le comportement des  $C_{ij}$ 's par rapport a la température est opposé a celui des  $C_{ij}$ 's par rapport a la pression où il a été rapporté dans la littérature que les  $C_{ij}$ 's augmente avec l'augmentation de la pression [27-30].

Le module de compressibilité  $B$  est un paramètre important qui donne une mesure de sa dureté. Pour les cristaux cubiques, on peut généralement obtenir  $B$  au moyen de l'expression [31],

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{III.6})$$

A température ambiante, notre valeur calculée de  $B$  est de  $7.76 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup>. Cette valeur est en bon accord avec celle de l'expérience qui est de  $7.55 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup> [26] (voir tableau III.3).

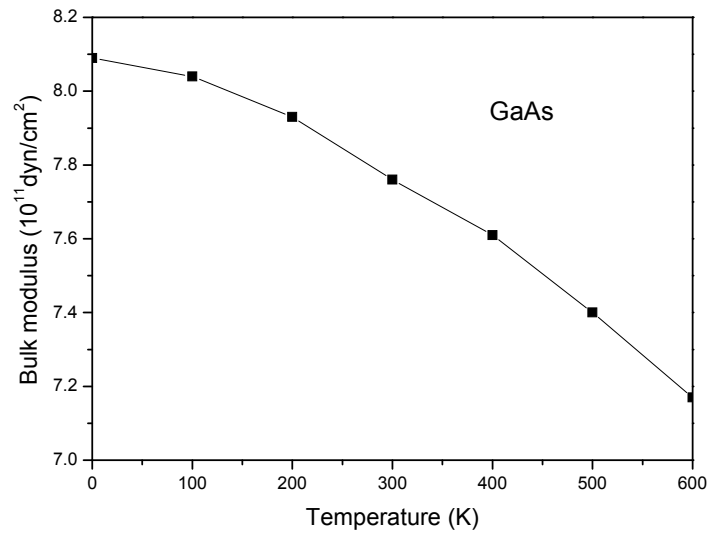
**Tableau III.3.** Module de compressibilité  $B$ , module de cisaillement  $C'$ , et module de Young  $Y_0$  du composé semi-conducteur GaAs dans la phase zinc-blende et a température ambiante.

$B(\times 10^{11} \text{dyn/cm}^2)$		$C'(\times 10^{11} \text{dyn/cm}^2)$		$Y_0(\times 10^{11} \text{dyn/cm}^2)$	
Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]	Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]	Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]
7.76	7.55	3.52	3.25	9.16	8.53

<sup>a</sup>Nos calculs.

La variation du module de compressibilité en fonction de la température est présentée sur la figure III.11. On note qu'en augmentant la température de zéro jusqu'a 600 K, le module de compressibilité diminue d'une façon monotone. Cela veut dire que le semi-conducteur

d'intérêt devient moins rigide a haute température. Notons que l'évolution de B en fonction de la température est non-linéaire.



**Figure III.11.** Module de compressibilité B en fonction de la température pour GaAs.

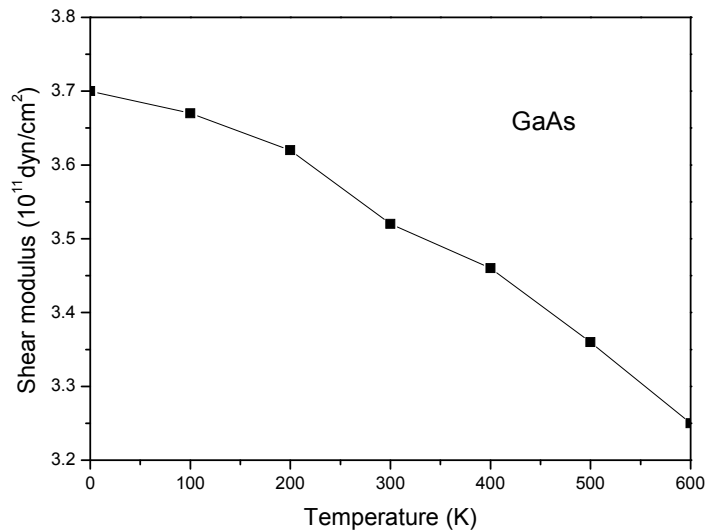
Le module de cisaillement dénoté par  $C'$  est une grandeur physique intrinsèque a chaque matériaux. Elle intervient dans la caractérisation des déformations causées par des effets de cisaillement. Dans le présent travail,  $C'$  est obtenue a partir de la connaissance des constantes élastiques  $C_{11}$  et  $C_{12}$  en utilisant la relation suivante [32],

$$C' = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (\text{III.7})$$

A température ambiante, notre valeur calculée de  $C'$  est  $3.52 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup>. Cette valeur est en bon accord avec celle de l'expérience qui est de  $3.25 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup> (voir tableau III.3).

La variation du module de cisaillement  $C'$  en fonction de la température est montrée sur la Figure (III.12). On remarque qu'en augmentant la température dans l'intervalle 0-600 K,  $C'$

diminue. Cela indique que lors de l'élévation de la température, GaAs devient plus résistant aux déformations transversales.



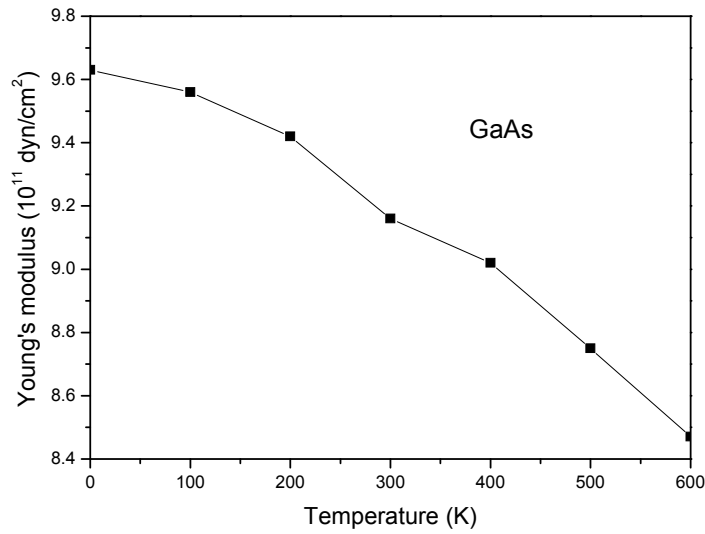
**Figure III.12.** Module de cisaillement C' en fonction de la température pour GaAs.

Le module de Young  $Y_0$  est le paramètre qui relie la contrainte de compression et le début de la déformation d'un matériau élastique isotrope. Dans ce présent travail, [100]  $Y_0$  est calculé en utilisant la relation suivante [31],

$$Y_0 = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (\text{III.8})$$

A température ambiante, notre valeur calculée de  $Y_0$  est de  $9.16 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup>. Cette valeur est en bon accord avec celle de l'expérience qui est de  $8.53 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup> (voir tableau III.3).

La figure III.13 montre la variation du module de Young [100]  $Y_0$  en fonction de la température. Nous observons que l'élévation de la température dans la gamme 0-600 K mène à la diminution du module de Young. Cette diminution est monotone et non-linéaire.



**Figure III.13.** Module de Young  $Y_0$  en fonction de la température pour GaAs.

L'anisotropie élastique est la propriété mécanique de l'être dépendant de la direction. Le facteur d'anisotropie ( $A$ ) est un paramètre mécanique utile lié aux constantes élastiques dans les cristaux cubiques par la relation suivante [26],

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (\text{III.9})$$

A température ambiante, notre valeur calculée de  $A$  est 0.70. Cette valeur est supérieure à celle de l'expérience qui est de 0.55 [26] (voir tableau III.4).

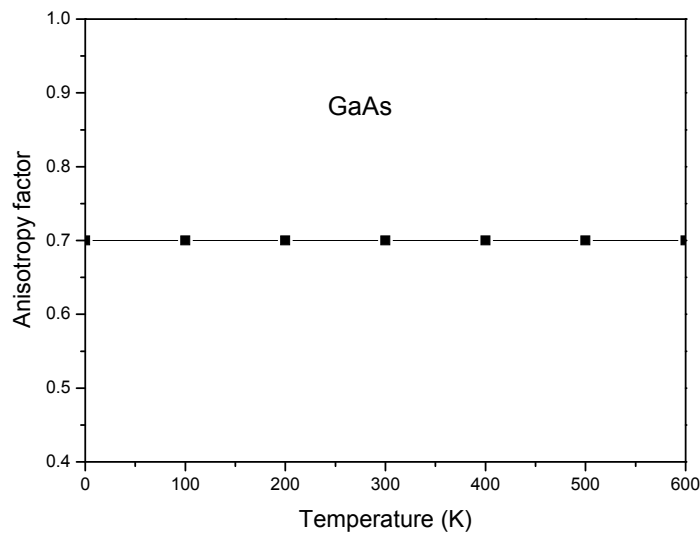
**Tableau III.4.** Facteur d'anisotropie  $A$ , coefficient de Poisson  $\sigma_0$  et micro-dureté  $H$  du composé semi-conducteur GaAs dans la phase zinc-blende et à température ambiante.

$A$		$\sigma_0$		$H (\times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$	
Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]	Cal. <sup>a</sup>	Exp. [26]	Cal. <sup>a</sup>	Exp. [11]

0.70            0.55            0.30            0.31            0.62            0.7-0.75

<sup>a</sup>Nos calculs.

La variation du facteur d'anisotropie ( $A$ ) en fonction de la température pour GaAs est montrée sur la figure III.14. On remarque qu'en augmentant la température, le facteur d'anisotropie reste toujours constant à une valeur de 0.70. En effet, un matériau semi-conducteur isotrope doit avoir  $A=1$ . Par conséquent, le degré d'anisotropie élastique dépend de la déviation de  $A$  par rapport à 1. Le matériau d'intérêt est donc caractérisé par une anisotropie de cisaillement pour toutes les températures dans l'intervalle 0-600 K. La variation de  $A$  s'avère très faible (négligeable). Ceci suggère que le degré d'anisotropie dans le matériau en question reste presque identique lorsque la température augmente.



**Figure III.14.** Facteur d'anisotropie  $A$  en fonction de la température pour GaAs.

Le [100] coefficient de Poisson  $\sigma_0$  est un paramètre mécanique important qui permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effet appliqué. Il est exprimé par la relation suivante [33],

$$\sigma_0 = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{III.10})$$

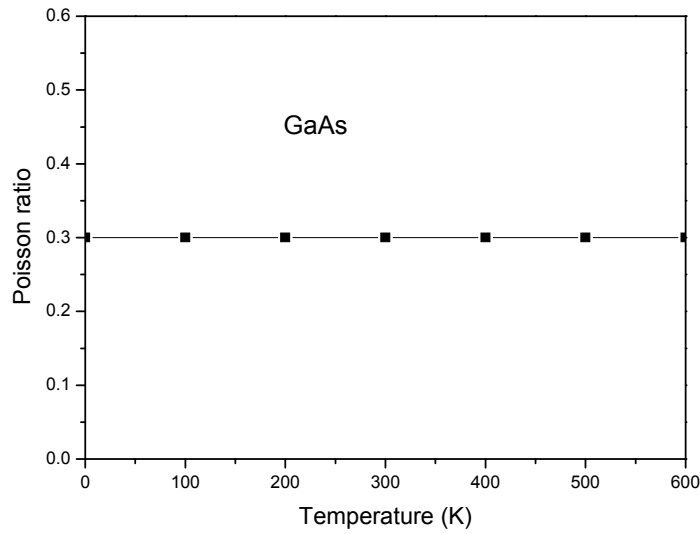
A température ambiante, notre valeur calculée de  $\sigma_0$  est 0.30. Cette valeur est en excellent accord avec celle de l'expérience qui est de 0.31 (voir tableau III.4). La figure III.15 montre la variation de [100] coefficient de Poisson en fonction de la température pour le composé semi-conducteur GaAs. On note que lorsque la température augmente de zéro jusqu'au 600 K, le coefficient de Poisson reste toujours constant et égale à 0.30. En outre, on peut déduire que l'augmentation de la température peut modifier les liaisons chimiques de notre composé GaAs qui ne sont pas purement covalentes.

Le coefficient de Poisson a été utilisé par Frantsevich et al. [34] pour faire la distinction entre la ductilité et la fragilité des matériaux. La règle de Frantsevich et al. est:

Si la valeur de  $\sigma_0$  est inférieure à 0.33, le matériau d'intérêt est considéré se comporter de manière fragile.

Si la valeur de  $\sigma_0$  est supérieure à 0.33, le matériau d'intérêt est considéré se comporter de manière ductile.

Dans nos calculs on a trouvé que  $\sigma_0=0.30$ , c'est-à-dire inférieure à 0.33. Donc on peut conclure que le GaAs se comporte de manière fragile pour toutes les températures dans l'intervalle 0-600 K selon la règle de Frantsevich et al. [34].



**Figure III.15.** Coefficient de Poisson  $\sigma_0$  en fonction de la température pour GaAs.

La micro-dureté est utilisée depuis longtemps pour caractériser le comportement mécanique des matériaux [11]. Elle est exprimée par la relation suivante [11,31,35],

$$H=0.139G_V \text{ (III.11)}$$

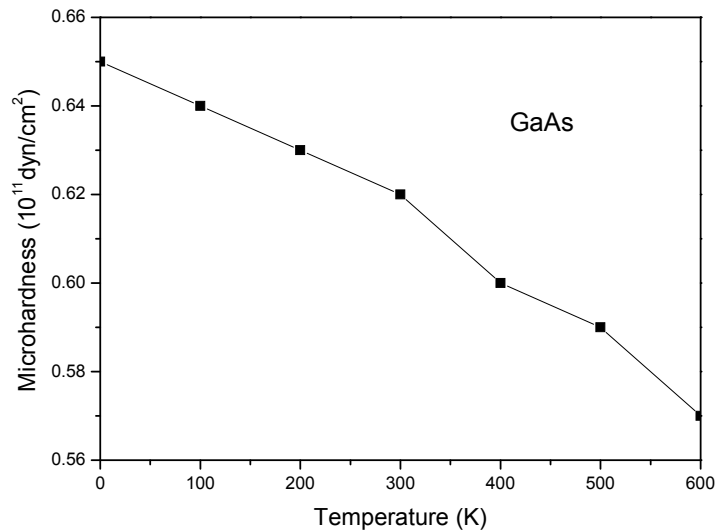
avec

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \text{ (III.12)}$$

A température ambiante, notre valeur calculée de H est de  $0.62 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup>. Cette valeur est proche de l'intervalle de H de  $0.7-0.75 \times 10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup> suggéré par Adachi [11]. (voir tableau III.4).

En utilisant les équations (III.11) et (III.12), la variation de H en fonction de la température est présentée sur la figure III.16. On remarque qu'en augmentant la température de zéro jusqu'au 600 K, H de GaAs diminue. Le comportement semble être monotone. Cela indique que l'élévation de la température mène à ce que le H du composé semi-conducteur

GaAs devient mauvais, ce qui augmente l'effet nuisible sur les performances opérationnelles des dislocations et la dégradation induite pendant la fabrication du dispositif.



**Figure III.16.** Micro-dureté H en fonction de la température pour GaAs.

#### References:

- [1] R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge, University Press, 2004
- [2] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer-Verlag, Berlin, 1989, see for example.
- [3] N. Bouarissa, Mater. Sci. Eng. B 86 (2001) 53
- [4] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 2 (1993) 7
- [5] N. Bouarissa, M. Boucenna, Phys. Scr. 79 (2009) 015701
- [6] A. Bechiri, N. Bouarissa, Superlattice. Microstruct.39 (2006) 478

- [7] N. Kaurav, Y. K. Kuo, G. Joshi, K. K. Choudhary, D. Varshney, *High Press. Res.* 28 (2008) 651
- [8] R. M. Martin, *Phys. Rev. B* 1 (1970) 4005
- [9] S. Saib, N. Bouarissa, P. Rodríguez-Hernández, A. Muñoz, *Eur. Phys. J. B* 73 (2010) 185
- [10] S. Saib, N. Bouarissa, *J. Phys. Chem. Solids* 67 (2006) 1888
- [11] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V, and II-VI Semiconductors*, Wiley, Chichester, 2005
- [12] S.-G. Shen, *J. Phys. Condens. Matter* 6 (1994) 8733
- [13] R. I. Cottam, G. A. Saunders, *J. Phys. C* 6 (1973) 2105
- [14] N. Bouarissa, F. Annane, *Mater. Sci. Eng. B* 95 (2002) 100
- [15] S. Daoud, N. Bouarissa, *Theor. Chem. Acc.* 138 (2019) 49
- [16] O. Madelung (Ed.), *Semiconductors-Basic Data*, Springer, Berlin, 1996
- [17] N. Bouarissa, K. Kassali, *Phys. Stat. Sol. B* 228 (2001) 663; Erratum *Phys. Stat. Sol. B* 231 (2002) 294
- [18] N. Bouarissa, S. Saib, *Curr. Appl. Phys.* 13 (2013) 493
- [19] T. Derri, Master Dissertation, University of M'sila, Algeria, 2019
- [20] N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 100 (2006) 41
- [21] P. Vogl, *J. Phys. C* 11 (1978) 251
- [22] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A* 245 (1998) 285
- [23] J. M. Baranowski, *J. Phys. C* 17 (1984) 6287
- [24] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Freeman, New York, 1980
- [25] L. Hannachi, N. Bouarissa, *Phys. B* 404 (2009) 3650
- [26] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, vol.2, World Scientific, Singapore, 1999

- [27] A. Khaldi, N. Bouarissa, L. Tabourot, *Acta Phys. Pol. A* 137 (2020) 480
- [28] S. Daoud, N. Bouarissa, A. Benmakhlouf, O. Allaoui, *Phys. Status Solidi B* 257 (2020) 1900537
- [29] N. Bioud, X.-W. Sun, N. Bouarissa, S. Daoud, *Z. Naturforsch. A* 73 (2018) 767
- [30] S. Saib, N. Bouarissa, P. Rodríguez-Hernández, A. Muñoz, *Comput. Mater. Sci.* 81 (2014) 374
- [31] N. Bouarissa, H. Algarni, M. A. Khan, O. Al-Hagan, T. F. Alhuwaymel, *Pramana J. Phys.* 94 (2020) 82
- [32] N. Bouarissa, S. Saib, M. Boucenna, F. Mezrag, *Comput. Condens. Matter* 17 (2018) e00346
- [33] N. Bouarissa, *Mater. Sci. Eng. B* 100 (2003) 280
- [34] N. Frantsevich, F. F. Voronov, S. K. Bocuta, in I. N. Frantsevich (Ed.), *Elastic constants and elastic moduli of metals and insulators, Handbook*, Naukova Dumka, Kiev, 1983, pp.60-180.
- [35] S. Daoud, N. Bioud, N. Bouarissa, *Mater. Sci. Eng. B* 31 (2015) 124

# **Conclusion générale**

## Conclusion générale

Au cours de ce travail, nous avons étudié quelques propriétés fondamentales à savoir, structurales et élastiques du composé GaAs sous l'effet de la température dans l'intervalle (0-600) K. Les calculs ont été effectués par la méthode du pseudo-potentielle empirique (E.PM). Le but de ce travail est l'investigation de l'effet de la température sur les propriétés fondamentales du composé semi-conducteur GaAs.

Nos résultats concernant les propriétés structurales obtenus par l'EPM sont en accord avec les valeurs de la littérature. L'étude des structures de bandes électroniques nous a permis de conclure que le gap est direct pour GaAs.

Nous avons évalué à température ambiante les propriétés élastiques tel que les constants élastiques ( $C_{11}=12.45 \times 10^{11}$ ,  $C_{12}=5.42 \times 10^{11}$ ,  $C_{44}=5.07 \times 10^{11}$ ) dyn/cm<sup>2</sup>, et les paramètres élastique (module de Young  $Y_0$  ( $Y_0 = 9.16 \times 10^{11}$ ) dyn/cm<sup>2</sup>, coefficient de Poisson  $\sigma_0$  ( $\sigma_0=0.30$ ), le module de compressibilité B ( $B=7.76 \times 10^{11}$ ) dyn/cm<sup>2</sup>, et le module de cisaillement  $C'$  ( $C'=3.52 \times 10^{11}$ ) dyn/cm<sup>2</sup>, facteur d'anisotropie A ( $A=0.70$ ), et la micro-dureté H ( $H=0.62 \times 10^{11}$ ) dyn/cm<sup>2</sup>, en se basant essentiellement sur la méthode de pseudo-potentiel.

Nous avons étudié l'évolution de ces paramètres en fonction de la température dans l'intervalle 0-600 K. Nos résultats ont montrés que le composé GaAs est stable mécaniquement pour toute les températures d'intérêt. Contrairement à l'effet de la pression, l'augmentation de la température rend le semi-conducteur en question moins résistant à la déformation de cisaillement, moins anisotrope et plus fragile.

## Abstract

The present work deals with the effect of temperature on elastic constants and related mechanical properties of GaAs. The temperature range is taken to be from 0 to 600 K. The objective of this contribution is to show the behavior of the properties of interest when raising temperature up to 600 K. The calculations are carried out using a pseudopotential approach. The authors findings are showed generally a good accord with data existing in the present literature. The effect of temperature is found to decrease the stiffness of the material under focus, to reduce its resistance to the deflection or deformation and to diminish its microhardness.

## Résumé

Le présent travail traite l'effet de la température sur les constantes élastiques et les propriétés mécaniques associées du GaAs. La plage de température est comprise entre 0 et 600 K. L'objectif de cette contribution est de montrer le comportement des propriétés d'intérêt lors de l'élévation de la température jusqu'à 600 K. Les calculs sont effectués par la méthode du pseudo potentiel. Les résultats des auteurs sont généralement en bon accord avec les données existantes dans la littérature actuelle. On constate que l'effet de la température diminue la rigidité du matériau mis au point, diminue sa résistance à la déflexion ou à la déformation et diminue sa micro dureté.

## الملخص

يدرس هذا العمل مدى تأثير درجة الحرارة على ثوابت المرونة والخواص الميكانيكية المصاحبة لها للمركب نصف الناقل GaAs. يتراوح نطاق درجة الحرارة بين 0 و 600 كلفن. والهدف من هذه المساهمة هو إظهار سلوك الخصائص موضع الاهتمام عندما ترتفع درجة الحرارة من الصفر إلى 600 كلفن. وقد تم إجراء الحسابات بواسطة طريقة شبه الكمون. تتوافق نتائجنا بشكل عام مع البيانات الموجودة

في المنشورات الحالية. ويلاحظ أن تأثير درجة الحرارة يقلل من صلابة المادة المطورة ، ويقلل من مقاومتها للانحراف أو التشوه ويقلل من صلابتها الدقيقة.