

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/APP/19/2023



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique Appliquée

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Yahia Fatima Zahra

Intitulé

**Étude sur les alliages ternaires
semiconducteurs: Masses effectives et
distributions de charges.**

Soutenu le / 06 /2023 devant le jury composé de:

Nadir BOUARISSA	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Président
Fadila MEZRAG	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Promotrice
Nafissa MEGAG	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Examinatrice

Année universitaire : 2022/2023

REMERCIEMENTS

Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

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

Je tiens à remercier, le président de jury Pr. BOUARISSA Nadir, et l'examinatrice, Maa. MEGAG Nafissa , pour l'honneur qu'elles m'ont fait en acceptant de juger ce travail.

Mes remerciements vont également à tous les enseignants du département de Physique.

Je ne pourrai jamais oublier le soutien moral, l'aide et les encouragements que ma famille et mes amis m'ont donné

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à ma famille et mes amis

Dédicace

*Je dédie ce travail:
A mes parents
A mon mari et mes enfants
A toute la famille
A tous mes amis*

YAHIA Fatima Zahra EP/BOUCHAREB

Liste des matières

Remerciement	I
Dédicace	II
Liste des matières	III
Introduction générale	1
Références bibliographiques	2
CHAPITRE1: Généralités sur les semiconducteurs	
1.1 Introduction	4
1.2 Définition d'un semiconducteur	4
1.3 Les composés semiconducteurs.....	5
1.4 Les propriétés des semiconducteurs	5
1.4.1 Les propriétés électroniques	5
1.4.1.1 Bandes d'énergie	6
1.4.1.2 Notion de gap direct et de gap indirect.....	7
1.4.2 Propriétés structurales	8
1.5 Classification des alliages semiconducteurs	9
1.6 L'intérêt des alliages semiconducteur	10
1.7 Méthodes d'étude des alliages semiconducteurs	11
1.8 L'approximation du cristal virtuel (VCA)	12
1.8.1 Le cas d'un alliage ternaire	12
1.9 L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)	13
1.10 Applications des matériaux semi-conducteurs II-VI	13
1.11 Conclusion	14
Références bibliographiques citées dans le chapitre 1	15
CHAPITRE 2: Densité de charges électroniques et Masse effective	
2.1 Introduction	17
2.2 Densité de charges électroniques	17
2.3 Représentation de la densité de charges	19
2.4 Masse effective	20
2.4.1 Masse effective des trous	22
2.4.2 Masse effective des électrons	24
2.5 Phénomènes de transport dans les semiconducteurs	26
2.6 Conclusion	26

Références bibliographiques citées dans le chapitre 2	27
CHAPITRE 3: Résultats et discussion	
3.1 Introduction	28
3.2 Etude des propriétés électroniques	29
3.2.1 La méthode empirique de pseudopotentiel	29
3.2.2 Structure de bandes des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}	31
3.2.3 Structure de bandes de CdS et de CdTe.....	32
3.2.3.1 Le composé CdS.....	32
3.2.3.2 Le composé CdTe	32
3.3 Gap énergétique des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}	34
3.4 Densité de charges électroniques	40
3.5 Méthode de la masse effective	45
3.6 Conclusion	48
Références bibliographiques citées dans le chapitre 3	49
Conclusion générale	50
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Résumé	

Introduction générale

Introduction Générale

La physique des matériaux a joué et continuera de jouer un rôle fondamental dans le développement de notre société moderne en permettant l'émergence de nombreuses applications technologiques. L'électronique, le stockage de données, la communication, les capteurs et les transducteurs nécessitent l'utilisation de matériaux aux propriétés spécifiques qui, par leur comportement spécifique, pourront jouer un rôle actif dans l'appareil et assurer des fonctions spécifiques. L'existence de nombreux dispositifs et l'évolution itérative de leurs performances (rapidité, sensibilité, réduction de taille) reposent souvent de manière critique sur la découverte de nouveaux matériaux aux propriétés uniques ou détériorantes. [1]

La technologie moderne et les développements technologiques dans de nombreux domaines sont basés sur la science des matériaux.

Les semiconducteurs sont le domaine le plus étudié en raison de leur importance dans notre société. Ils sont utilisés dans l'électronique (diodes, transistors, etc.), l'informatique, la médecine, l'industrie, les télécommunications, l'optoélectronique, l'électroménager, etc.

Toutefois, les alliages ternaires à base de composés semiconducteurs II-VI sont considérés comme une classe importante de matériaux, obtenus en ajustant leurs paramètres de réseau, leurs gaps d'énergie, leurs masses effectives, leurs densités de charges et leurs paramètres mécaniques associés, ainsi que d'autres paramètres physiques pouvant être réglés et contrôlés. [2]

Les alliages ternaires CdS_xTe_{1-x} a connu un intérêt croissant dans ces dernières années vu que son gap et son paramètre cristallin peuvent être variés systématiquement par le choix de composition de l'alliage.

Pour cela, des outils informatiques doivent être utilisés et c'est pour cette raison que les ordinateurs et leur développement facilitent l'apprentissage. Grâce aux mathématiques et aux simulations des différentes propriétés physiques.

La modélisation et la simulation des matériaux semiconducteurs par conséquent, sont intéressantes pour étudier les différentes possibilités qui se présentent et orientent l'industrie pour le principe la meilleure option pour le coût le plus bas. [3]

Bien que diverses méthodes théoriques puissent être utilisées pour calculer la structure de bande, la méthode empirique du pseudo potentiel (E.P.M) combinée à l'approximation du cristal virtuel reste la méthode la plus simple et la plus rapide, qui donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés empiriquement, mais la VCA (l'approximation du cristal virtuel) est connue pour

rendre les paramètres de flexion du gap fondamental aussi bas que ceux trouvés expérimentalement. [4]

Le plan de travail que nous présentons dans ce mémoire est organisé comme suit :
Après une introduction générale, le premier chapitre présente des généralités sur les semiconducteurs.

Dans le deuxième chapitre nous parlons de la densité de charges électroniques et la masse effective des électrons et des trous lourds.

Le troisième chapitre est consacré aux résultats et discussions.
Enfin, le manuscrit se terminera avec une conclusion générale qui résume les principaux résultats obtenus dans le cadre de cette étude.

Références bibliographiques

[1] P. Arnaud, "chimie physique" édition Dunod, (2001).

[2] N. Bouarissa, R. Bachiri , Phys B .322(2002)

[3] <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>

[4] Q.Tridoan, thèse de doctorat, Université de Reims, Champagne.Ardenne, (2011).

CHAPITRE1:

Généralités sur les semiconducteurs

CHAPITRE1: Généralités sur les semiconducteurs

1.1 Introduction

Les matériaux de tous les jours jouent un rôle plus important dans le monde qui nous entoure, ces matériaux peuvent être classés en trois catégories : Isolants, conducteurs et semiconducteurs.

Les semiconducteurs sont à mi-chemin entre les matériaux métalliques et les isolants - à température ambiante, ce sont des isolants. Cependant, lorsqu'ils sont chauffés, ils commencent à conduire l'électricité. La résistivité d'un semi-conducteur peut aller de $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ à $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$. Alors que les métaux ont des résistivités autour de $10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$ et les isolants ont des résistivités de $10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$ [1].

Une illustration de cette classification est présentée dans la (Figure 1.1). Dans ce chapitre, nous fournissons des définitions des composés et alliages semiconducteurs avec plus de détails, ainsi que les propriétés des des semiconducteurs.

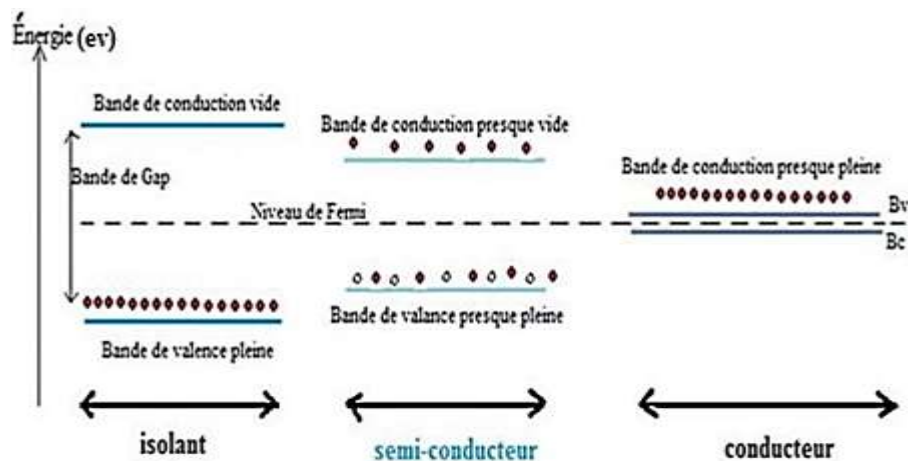


Figure 1.1: Structure de Bandes d'énergie pour les isolants, les semiconducteurs et les conducteurs [1].

1.2 Définition d'un semiconducteur

Les semiconducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique se situe entre celles des isolants et des conducteurs, variant de plusieurs ordres de grandeur sous l'influence de :

- ✓ Température,
- ✓ Eclairage,
- ✓ Présence d'impuretés (dopage) [2].

1.3 Les composés semiconducteurs

Les composés semiconducteurs sont des matériaux très importants pour leurs propriétés électroniques (mobilité des charges) et optoélectroniques (gap direct). Pour faire varier ces propriétés, il faut jouer sur la structure électronique et convenir à la largeur de la bande interdite. Ceci est réalisé à l'aide d'alliages. Les domaines étendus de la composition chimique variable sont des atouts pour la réalisation de dispositifs adaptés aux exigences.

Tableau 1.1: Les groupes des composés semiconducteurs [2].

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

1.4 Les propriétés des semiconducteurs

1.4.1 Les propriétés électroniques

Dans les semiconducteurs il existe deux bandes autorisées, la bande de valence contenant les électrons et la bande de conduction remplie par les électrons de la bande de valence, ces bandes sont séparées par un gap, également appelé bande interdite, dont la largeur est inférieure à celle des isolants, comme dans le silicium, la bande interdite est égale à 1,12 eV. Par chauffage ou d'autres facteurs, le bord de la bande de valence se déplace vers la bande de conduction. La plupart des semiconducteurs III-V sont à bande interdite directe. Les matériaux semiconducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire qui aident à former des liaisons chimiques. Les autres électrons n'interfèrent pas avec les propriétés optiques de l'hétérostructure. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome (comme l'hybridation orbitale du gallium Ga et de l'atome d'arséniure As) forment des liaisons covalentes tétraédriques sp^3 : 4 orbitales de liaison et 4 orbitales antiliantes [5].

Les semiconducteurs des groupes II-VI sont caractérisés par de grandes bandes interdites correspondant aux longueurs d'onde du visible à la lumière ultraviolette. La bande interdite directe de ces matériaux semiconducteurs varie de 3,741 eV pour le ZnS [6] à 1,45 eV CdTe [7]. Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés au centre de la zone de Brillouin, (Figure 1.2). La bande de valence en $k^{\rightarrow} = 0^{\rightarrow}$ consiste en trois courbures distinctes

- Bande de trous lourds (hh pour heavy hole) ;
- Bande de trous légers (lh pour light hole) ;
- Bande spin-orbite Δ_{so} .

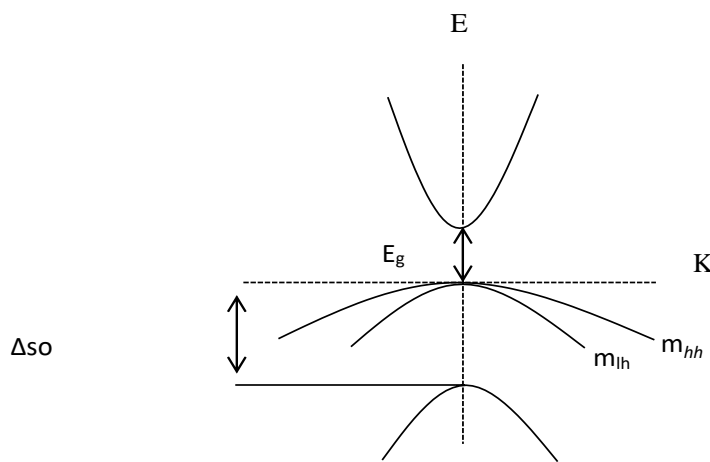


Figure 1.2 : Structure de Bande d'un semiconducteur à gap directe [6].

1.4.1.1 Bandes d'énergie

Les électrons des atomes isolés ont des niveaux d'énergie autorisés bien définis, mais ils se comportent tout à fait différemment dans les réseaux périodiques. Les atomes sont admissibles si la distance entre les atomes adjacents crée une certaine perturbation entre les niveaux d'énergie, ce qui nécessite des états multiples quasi-continus autour de chaque niveau d'énergie admissible d'un seul atome, un groupe très proche les uns des autres, plutôt que d'être considérés comme des bandes d'énergie admissibles, ont une densité d'états associée.

Les niveaux d'énergie des électrons de valence et les niveaux d'énergie d'ionisation donnent donc deux bandes d'énergie autorisées particulièrement intéressantes. Les bandes de valence et de conduction sont séparées par une bande qui n'autorise pas les niveaux d'énergie, appelée bande interdite (figure 1.3). Ces propriétés de bande de conduction admissibles sont dues au fait

que les électrons peuvent circuler librement dans le réseau et ainsi générer un courant de conduction [3].

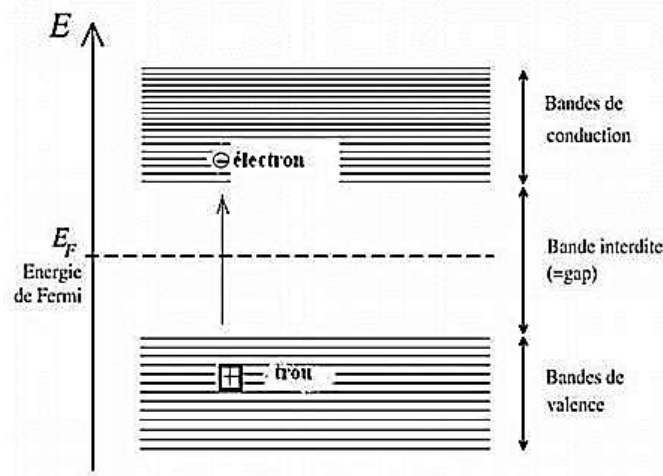


Figure 1.3: Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs [3].

1.4.1.2 Notion de gap direct et de gap indirect

Cette notion de gap est liée à la représentation de la dispersion énergétique $E=f(k)$ d'un semiconducteur, donnant la variation de l'énergie en fonction du vecteur d'onde k .

Ce diagramme permet de définir les extrema des bandes de conduction et de valence. Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [4].

Les différentes structures de bande des (figures 1.4a, 1.4b) montrent deux types de base de semiconducteurs.

Un semiconducteurs à bande interdite indirecte (gap indirect) a un minimum dans la bande de conduction et un maximum dans la bande de valence. Leurs positions dans l'espace k sont différentes les unes des autres. Considérons un semi-conducteur à bande interdite directe (gap direct) dont les extrémités touchent le même point dans l'espace k . Ces semiconducteurs ont des propriétés tridimensionnelles.

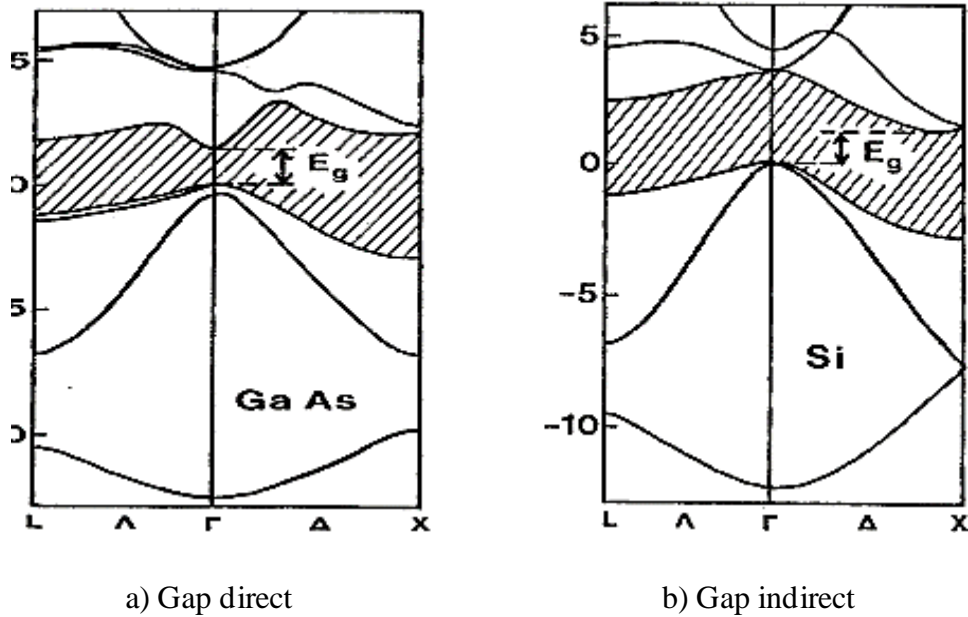


Figure 1.4: Gaps direct et indirect des semiconducteurs Si et GaAs [4].

1.4.2 Propriétés structurales

L'état cristallin diffère des autres états solides car les atomes sont disposés dans un certain ordre. Cet état est formé par la répétition périodique d'atomes ou de groupes d'atomes (de propriétés identiques ou différentes), appelé motif cristallin, ou maillage selon les trois directions de l'espace, et permet la translation en produisant une structure cristalline. Un ensemble de noyaux et d'électrons ordonnés sont essentiellement maintenus ensemble par les forces de Coulomb. La grande majorité des semiconducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si, Ge) ou optoélectroniques (GaAs, InP) sont basés sur la même structure cristalline, la structure diamant (Si, Ge) ou sphalérite. (Arséniure de Gallium, Phosphure d'Indium). Les deux structures sont représentées sur la Figure 1.5 [8].

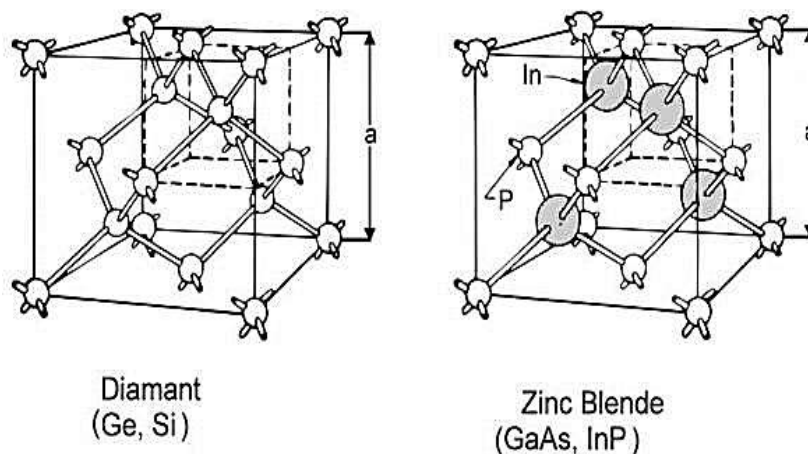
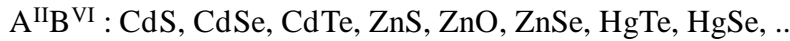


Figure 1.5: Structure cristalline Diamant et Zinc Blende [8].

1.5 Classification des alliages semiconducteurs

Les alliages semiconducteurs sont divisés en plusieurs groupes selon le nombre de constituants [9] :

- Alliages binaires sous forme $A^N B^{8-N}$:



$A^{III} B^V$: Antimoniures, Arséniures, Phosphures et Nutriments des éléments : Aluminium, Gallium, Indium et Bore (GaAs, InSb, BN, AlAs, InP, etc.). $A^{IV} B^{IV}$: SiC, SiGe,...

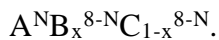
- Alliages binaires sous forme d' $A^N B^{10-N}$:



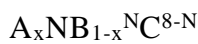
- Alliages binaires sous forme d' $A^N B^{7-N}$:

$A^I B^{VI}$: CuS, CuO, Cu₂O, ... Lorsque les éléments binaires $A^N B^{8-N}$ et $A^N C^{8-N}$ sont associés, les alliages formés peuvent être :

- Alliage ternaire anionique :



- Alliages ternaires cationiques :



Ces alliages se caractérisent par la présence d'un coefficient stœchiométrique x. Cependant, il existe une autre classe d'alliages semiconducteurs : ce sont les matériaux quaternaires. Cette classe d'alliages semiconducteurs comprend quatre composés binaires, caractérisés par la présence de deux coefficients stœchiométriques x et y. Il y a eu récemment un intérêt particulier pour les alliages quaternaires, principalement en raison de leurs avantages dans la conception de dispositifs aux propriétés physiques souhaitables. Ces alliages peuvent être divisés en deux catégories [10-11] :

- Solution quadratique :



- Solutions triangulaires :

Il existe deux cas de solutions triangulaires dans cette classe, la solution anionique pure $A^N B_x^{8-N} C^{8-N} D^{8-N}$ et la solution cationique pure $A^N B^N C^{8-N} D^{8-N}$.

Les alliages quaternaires secondaires sont les plus anciens et les plus étudiés, en particulier $Ga_x In_{1-x} As_y P_{1-y}$, $Ga_{1-x} In_x As_y Sb_{1-y}$. Pourtant, les alliages triangulaires semblent devenir tout aussi importants. Les critères concernant la cohérence des paramètres de réseau et l'identité de la

structure cristalline des éléments parents binaires sont toujours valables dans le cas des alliages quaternaires [12].

1.6 L'intérêt des alliages semiconducteur :

A la fin des années 1950, une nouvelle classe de matériaux semi-conducteurs a été découverte, les groupes III-V (combinaisons d'éléments des colonnes III et V de la classification de Mendeleïev). L'idée de former des solutions solides de ces composés binaires est apparue presque simultanément. L'extension permet d'envisager des semiconducteurs dont la bande interdite peut prendre toutes les valeurs de 0,18 à 2,42 eV. Les résultats se sont longtemps limités à la détermination de la structure des bandes et des paramètres de réseau en fonction de la composition. L'arséniure de gallium (GaAs) est entré dans la phase de développement au début des années 70, tandis que les alliages ternaires sont restés au niveau du laboratoire. Seuls les composés $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ apparaissent dans le champ des LED (diode émettant de lumière visibles). L'avènement des fibres optiques à très faible absorption a été le point de départ d'un développement important dans l'étude des composés ternaires et quaternaires III-V, visant à obtenir des dispositifs optoélectroniques adaptés aux propriétés de ces fibres. (Tableau 1.2) .

Tableau 1.2: Systèmes des matériaux avec leurs applications optoélectroniques importantes [13].

Matériaux	substrat	Accord de maille	membres importants	applications dans l'optoélectronique
AlGaAs	GaAs	GaAs Al _x Ga _{1-x} As AlAs	Ga _{1-x} In _x As 0 ≤ x ≤ 0.25	Emetteurs et modulateurs: 0.75 μm ≤ λ ≤ 1.1 μm DéTECTEURS: 0.4 μm ≤ λ ≤ 1.1 μm
GaInAsP/InP	InP	Ga _{0.47} In _{0.53} As Ga _x In _{1-x} As _y P _{1-y} x=0.47y; 0 ≤ y ≤ 1 InP	Ga _{1-x} In _x As 0.4 ≤ x ≤ 0.6 InAs _x P _{1-x} 0 ≤ x ≤ 0.2	Dispositifs optoélectroniques à λ = 1.3 μm et λ = 1.55 μm
AlGaInAs/InP	InP	Ga _{0.47} In _{0.53} As (Al _x Ga _{1-x}) 0.47In _{0.53} As 0 ≤ x ≤ 1 Al _{0.48} In _{0.52} As	Ga _{1-x} In _x As 0.4 ≤ x ≤ 0.6	Dispositifs optoélectroniques à λ = 1.3 μm et λ = 1.55 μm
AlGaInP	GaAs	GaAs Ga _{0.5} In _{0.5} P (Al _x Ga _{1-x}) 0.5In _{0.5} P 0 ≤ x ≤ 1	Ga _{1-x} In _x As 0 ≤ x ≤ 0.25 Ga _{1-x} In _x P 0.4 ≤ x ≤ 0.6	Emetteur rouge
AlGaAsSb /GaInAsSb /GaSb	GaSb	GaSb Al _x Ga _{1-x} As _y Sb _{1-y} x = 1.2y; 0 ≤ x ≤ 1 Al _x In _{1-x} As _y Sb _{1-y} x = 1.1y; 0 ≤ x ≤ 1		Emetteurs et détecteurs λ ~ 2-3 μm
GaAsP	GaAs InP	GaAs GaP	GaAsP	LED's visible

1.7 Méthodes d'étude des alliages semiconducteurs

Les études optiques et électroniques des alliages semiempiriques (III-V, II-VI, ...) ont utilisé différentes approches, y compris des méthodes basées sur des modèles de liaisons serrées semiempiriques [14], des modèles pseudopotentiels semiempiriques [15] et des modèles auto-

cohérents locaux tels que l'approximation de densité (LDA) [16], CPA [14] et l'approche cristalline virtuelle (VCA) [15]. Mais l'approche EPM combinée à la VCA prenant en compte les effets du désordre, reste la plus simple et fournit des résultats cohérents avec les données expérimentales [17, 18]. C'est cette méthode que nous utilisons pour calculer la dépendance compositionnelle et le traitement du désordre chimique des alliages semiconducteurs.

1.8 L'approximation du cristal virtuel (VCA)

1.8.1 Le cas d'un alliage ternaire

L'approximation du cristal virtuel (VCA) est l'approche la plus simple, elle considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen. Cet alliage ternaire de la forme $A_{1-x}B_xC$ est composé des molécules AC avec une fraction molaire $(1-x)$ et des molécules BC avec une fraction molaire (x) [19].

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter cet alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [20].

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

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

Certaines propriétés suivent une interpolation linéaire, comme le paramètre du réseau donné par la loi de Vegard [21]:

$$a_{A_x B_{1-x} C}(x) = \overline{a(x)} = xa_{BC} + (1-x)a_{AC} \quad (1.2)$$

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

a_{AC} est la constante du réseau du composé AC, x est la concentration molaire.

D'autre part, le gap énergétique suit une dépendance quadratique qui est donnée pour la plupart des alliages ternaires par la forme suivante :

$$E_{A_x B_{1-x} C}(x) = xE_{BC} + (1-x)E_{AC} + Cx(1-x) \quad (1.3)$$

Avec :

E_{BC} est le gap énergétique du composé BC.

E_{AC} est le gap énergétique du composé AC.

C'est appelé « paramètre de courbure » ou « Bowing » prouvé expérimentalement. Ce paramètre est une contribution du désordre du réseau généré dans l'alliage ternaire par suite de la distribution des atomes des composés BC et AC dans les sites des deux sous réseaux.

Néanmoins la VCA donne un paramètre de courbure très différent de celui trouvé par l'expérience, d'où la nécessité d'introduire l'effet du désordre compositionnel dans le formalisme de la VCA, en ajoutant un terme correctif à l'Hamiltonien du cristal appelé potentiel du désordre effectif [5].

1.9 L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)

Dans les années 70, Baldereschi et Maschke considéraient l'effet du désordre compositionnel comme une perturbation, mais ne pouvaient toujours pas rendre compte du paramètre de courbure. L'effort requis pour cette méthode est énorme, ce qui rend son application très difficile. Dans l'approximation de cristal virtuel améliorée de VCAA, le potentiel dû au désordre de composition est ajouté au potentiel périodique du cristal, et le pseudo potentiel du système devient :

$$V(r) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (1.5)$$

$$V = V_{VCA} - p(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (1.6)$$

V_{VCA} Le potentiel périodique du cristal virtuel.

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

1.10 Applications des matériaux semiconducteurs II-VI

Les applications des matériaux semi-conducteurs II-VI se sont jusqu'à présent concentrées sur les détecteurs de rayonnement dans la région du proche infrarouge, ce qui présente un intérêt particulier puisque la plupart des émissions de rayonnement thermique se situent dans cette région sur une large plage de températures. Le semiconducteur de cette classe de matériaux est le CdS, qui possède de bonnes propriétés optoélectroniques. Les matériaux II-VI émettent tous de la lumière dans le domaine visible sauf les semi métaux HgSe et HgTe, à cause des atomes de mercure lourds ($Z = 80$) qui émettent du rouge avec CdTe à l'infrarouge en raison de l'incorporation de mercure (le fait que CdTe et HgTe ont presque le même paramètre de réseau, $6,480 \text{ \AA}$ et $6,460 \text{ \AA}$, respectivement).

En particulier dans l'infrarouge, de tels dispositifs ont trouvé leur principale application (militaire). Quant à la lumière visible, les diodes électroluminescentes LED vertes à base de ZnTe [22, 23] et les diodes laser jaune-vert à base de ZnSe [24] conquièrent un marché encore vierge car, contrairement au rouge et au bleu, elles ne sont pas disponibles à 550 nm Il n'existe

toujours pas de diodes laser commerciales dans la gamme des 590 nm. Les semi-conducteurs II-VI sont également des matériaux très prometteurs pour la réalisation de cellules solaires, comme le CdS et le CdTe, en raison de leur bonne adaptabilité à la bande interdite située au milieu du spectre solaire. Les cellules CdS-CdTe atteignent généralement des rendements de conversion de 20,4 % à 21 % en laboratoire [25, 26], ce qui est compétitif avec d'autres matériaux prometteurs tels que CuInGaSe₂ (20,5 %) ou le silicium amorphe (13,4 %). Une fine couche de CdTe d'environ 2 μm d'épaisseur absorbera presque 100% du rayonnement solaire incident [27].

1.11 Conclusion

Dans ce premier chapitre nous avons présenté des généralités sur les matériaux semiconducteurs, en insistant sur les semiconducteurs II-VI des alliages ternaires. Chaque matériau possède ses propres propriétés permettant de le caractériser. La connaissance des propriétés physiques et du comportement de ces matériaux est évidemment essentielle pour l'évaluation de leur domaine d'application.

Références bibliographiques citées dans le chapitre 1:

- [1] A. Aouina, Mémoire de magister, « Rôle du rayonnement dans l'élaboration et l'étude de nano agrégats semi-conducteurs de ZnS », Université Constantine.
- [2] Q. Tridoan, thèse de doctorat, université de Reims, Champagne.Ardenne, (2011).
- [3] A.BECHRI, « effets de désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V », Thèse de Doctorat, Université de Constantine, 2006.
- [4] G. Roosen, « Matériaux semiconducteurs III-V, II-VI et nitrures pour l'optoélectronique », Ed. Hermes Science (2003).
- [5] MEZRAG, F. Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider- Biskra, (2012).
- [6] N. Baghdadli, Thèse de Doctorat en physique, Université Tlemcen, (2013).
- [7] I. Hernández-Calderón, "Optical properties and electronic structure of wide band gap II-VI semiconductors", in II-VI Semiconducteur Materials and their Applications, TaylorandFrancisNew York, 113–170 (2002).
- [8] Q. Tridoan, thèse de doctorat, Université de Reims, Champagne.Ardenne, (2011).
- [9] P. Kiréev, « La Physique des semiconducteurs », édition Mir, Moscou (1975).
- [10] F. Aymerich, Phys. Rev. B26, 1968 (1982).
- [11] H. Abid, Thèse de doctorat d'état, Université de Sidi Bel-Abbes, (1997).
- [12] S. Q. Wang, H. Q. Ye, Phys. Status Solidi (b) 240, 45 (2003).
- [13] A. Mircea, R. Azoulay, L. Dugrand, R. Mellet, K. Kao and M. Sacillotti , J. of Electro. Mat., vol 13, N° 3 (1984).
- [14] T. Kagawa and G. Motosugi, Jpn. J. Appl. Phys. 18, 2317 (1979).
- [15] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 .285. (1998).
- [16] A. Sasaki, M. Nishiuma and Y. Takeda, Jpn. J. Appl. Phys. 19, 1698 (1980).
- [17] I. M. Dolginov, L. V. Druhinina, Soviet. J. Quantum Electro. 8, 416 (1978).
- [18] H. Kano, K. Sugiyama, Electronics Letters, 16, N° 4 (1980).
- [19] J. C. Dewinter, M. A. Pollack, J. of Electro. Mat. 14, 729 (1985).
- [20] I. P. Kaminov, An introduction to electrooptic devices, Academic Press (1974).
- [21] J.E. Bernard, A. Zunger, Phys. Rev. B36, 3199 (1987).
- [22] L. Vegard, Z. Phys. 5 .17. (1921).
- [23] Rolf Enderlein, NommJ. M. Horing, "Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices", World Scientific Publishing ISBN 981-02-2387-0.(1997).
- [24] J.H. Chang, J.S. Song, K. Godo, M.Y. Shen, T. Goto, T.Yao, Appl. Phys. Lett. 78 (2001) 566-568.

- [25] M. Klude, G. Alexe, C. Kruse, T. Passow, H. Heinke, D.Hommel, Phys. Stat. Sol. (b) 229 (2002) 935-942.
- [26] C. Walkons, B. Guralnick, B. M. Candless and R. Birkmire, IEEE, 1567 (2014).
- [27] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta and E. D. Dunlop, Prog. Photovolt: Res. Appl. 23, 1 (2015).

CHAPITRE 2:

Densité de charges électroniques et Masse effective

CHAPITRE 2: Densité de charges électroniques et Masse effective

2.1 Introduction

La connaissance de la densité de charge électronique est essentielle. Elle nous permet de comprendre plusieurs propriétés chimiques et physiques des solides. Grâce à la densité de charge, nous pouvons mieux comprendre les types de liaisons établies entre les composants matériels à l'origine des propriétés optiques, électroniques et structurales. Les théoriciens de l'état solide s'intéressent davantage aux propriétés électroniques qu'aux propriétés structurales. Récemment, avec le développement des méthodes de calcul, l'attention a été portée sur les propriétés structurales, en particulier les propriétés de liaison des semi-conducteurs et des isolants [1].

Contrairement aux structures de bande, qui sont étudiées dans l'espace réciproque, la densité de charge est traitée dans l'espace direct, permettant ainsi une véritable compréhension de la distribution de charge électronique. Par exemple, elle permet le calcul de charges relatives qui ne peuvent pas être calculées par d'autres méthodes. L'étude de la masse effective est un concept important en physique, en particulier dans le domaine de la physique des solides et de la physique des semiconducteurs. Dans un matériau cristallin, les électrons se déplacent sous l'influence du potentiel électrique créé par les atomes du cristal. La masse effective est une mesure de la facilité avec laquelle les électrons se déplacent dans ce potentiel. Elle est définie comme la masse qu'aurait une particule libre (comme un électron libre) pour avoir la même relation entre son énergie et son vecteur d'onde que la particule étudiée dans le matériau cristallin. Elle influence la mobilité, la vitesse de transport et la réponse aux champs électriques et magnétiques des particules. Comprendre la masse effective permet de prédire et d'expliquer les propriétés électroniques des matériaux.

2.2 Densité de charges électroniques

Lorsque l'équation de Schrödinger est résolue pour les fonctions d'ondes $\Psi(r)$, décrivant l'état d'un système, nous pouvons directement évaluer la densité de charges de l'électron dans une certaine région spatiale.

$$\rho(r) = e|\psi(r)|^2 \quad (2-1)$$

Dans le cas d'un solide, la densité de charges totale s'obtient en sommant sur tous les états k des n bandes du cristal

$$\rho(r) = 2e \sum_{n,k} |\psi_{n,k(r)}|^2 \quad (2-2)$$

Pour une bande spécifique d'indice n, la densité de charges correspondante s'obtient en sommant sur tous les états k dans cette bande.

$$\rho_n(r) = 2e \sum_k |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad (2-3)$$

La densité de charges, dans ce cas est :

$$\rho(r) = \sum_n \rho_n(r) \quad (2-4)$$

Le calcul de la densité de charge totale nécessite la connaissance de la fonction d'onde à travers la zone de Brillouin. Afin de réduire le temps de calcul requis, plusieurs méthodes d'approximation ont été développées. Par conséquent, J. P. Walter et al a calculé la densité de charge de certains semiconducteurs. [2] En utilisant un échantillonnage régulier de 3360 points de coordonnées :

$$1/16 (2s+1, 2m+1, 1n+1) \text{ unités de } 2\pi/a$$

Où : s, m, n : sont des entiers.

Sous la même fonction d'onde, Baldereschi [3] a calculé la densité de charge le long de la direction de liaison de la bande de valence Germanium en utilisant la technique du point moyen, et il a trouvé que les résultats étaient similaires à ceux de J. P. Walter avec une différence de 10 %. Pour les structures de mélange de zinc ainsi que pour les structures de seule gemme, ce point médian a les coordonnées suivantes :

$$2\pi/a (0.6223, 0.239, 0.0)$$

Chadi et Cohen ont développé un modèle ponctuel spécial. [4] dans lequel ils ont réussi à calculer la densité de charge totale en utilisant seulement deux points. Des résultats similaires ont été obtenus en utilisant les points Chadi et Cohen et les points Baldereschi lors du calcul de la densité de charge totale des composés binaires [5]. Ces derniers calculs diffèrent de 1 % de ceux utilisant le schéma en 71 points. Les coordonnées des points spéciaux de Chadi et Cohen sont les suivantes :

$$2\pi/a(1/4,1/4,1/4), 2\pi/a (3/4,1/4,1/4)$$

Pour calculer la densité de charge électronique, la structure de bande $E(k)$ doit être calculée. Cette détermination peut se faire selon plusieurs méthodes, parmi lesquelles nous réservons la méthode des pseudopotentiels (EPM). Le calcul de la densité de charge nécessite alors de connaître la fonction appropriée $\Phi_{n,k}(r)$ pour les électrons de valence. Sous forme de Bloch, $\Phi_{n,k}(r)$ est exprimé par :

$$\phi_{nk}(r) = \sum_G \phi(K+G) \cdot \exp[i(K+G) \cdot r] \quad (2-5)$$

Ou encore :

$$\phi_{nk}(r) = \sum_G C_n(k) \cdot \exp[i(k+G) \cdot r] \quad (2-6)$$

La détermination de la pseudo densité d'onde exige donc la détermination des coefficients $C_n(k)$ en résolvant l'équation séculaire que nous établissons à partir de l'équation de Schrödinger. La pseudo densité de charge totale d'un électron de valence dans un cristal se calcule en sommant sur toutes les bandes de valence du cristal et sur tous les états k , soit :

$$\rho(r) = \sum_n p_n(r) = e \sum_{n,k} [|\phi_{nk}(r)|^2] \quad (2-7)$$

$$\rho(r) = e \sum_{n,k} \phi_{n,k}^*(r) \cdot \phi_{n,k}(r) \quad (2-8)$$

$$\rho(r) = e \sum_{G'} C_n^*(k, G') \cdot \exp[i(k+G-G') \cdot r] \cdot \sum_G C_n(k, G) \cdot \exp[i(k+G) \cdot r] \quad (2-9)$$

$$= e \sum_G C_n^*(k, G') \cdot C_n(k, G) \cdot \exp[i(G, r)] \quad (2-10)$$

$$= e \sum_{G, G'} |C_{n, G'}(k, G)|^2 \cdot \exp[i(G, r)] \quad (2-11)$$

$$= e \sum_G \rho(G') \cdot \exp[i(G, r)] \quad (2-12)$$

$$\rho(G') = \sum_G |C_{n, G'}(k, G)|^2 \quad (2-13)$$

2.3 Représentation de la densité de charges

La représentation de la densité de charge $\rho(r)$ se fait de deux manières principales : La première consiste à représenter la variation de $\rho(r)$ le long de l'axe de liaison interatomique $\langle 111 \rangle$ (Figure 2.1). L'utilité de ce choix est due au fait que la direction $\langle 111 \rangle$ est une symétrie primaire. La particularité de cette méthode est que les changements de $\rho(r)$ peuvent être examinés à travers toute la cellule cristalline. Plus précisément, la méthode ne

se limite pas à la variation de $\rho(r)$ dans le volume entre cations et anions, mais étend cette variation à la région interstitielle. La deuxième approche consiste à représenter $\rho(r)$ sous forme de droites isopycniques, c'est-à-dire la projection topographique de $\rho(r)$ sur un plan passant par les deux atomes présents dans des cellules adjacentes. Ce plan est le plan (100).

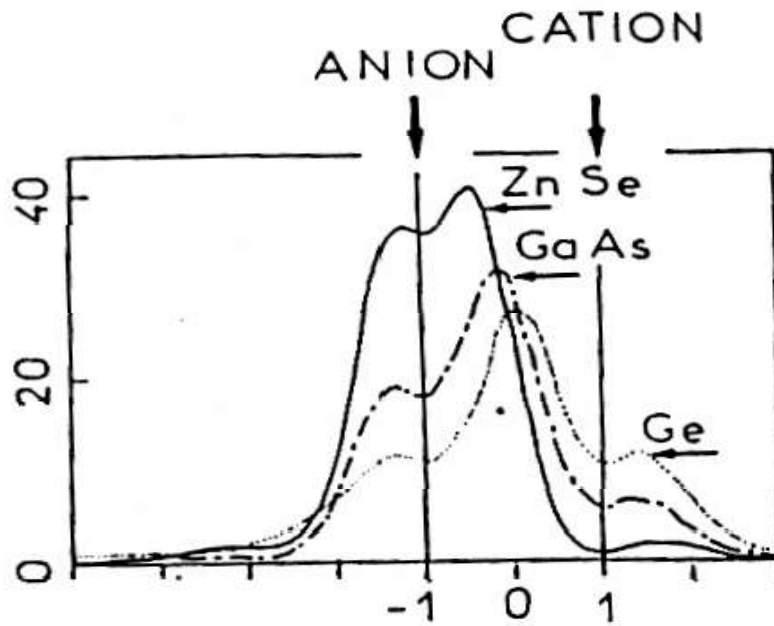


Figure 2.1: Profil de la densité de charges électroniques de valence, le long de l'axe [111] passant par deux atomes proches voisins : cas de Ge, GaAs, ZnSe.

2.4 Masse effective

Les électrons dans la bande de conduction sont caractérisés par une fonction d'onde qui est la somme de Bloch des orbitales antiliantes. En termes de particules, il s'agit d'une particule en potentiel de cristallisation. Cette particule quasi-libre de charge $-e$ et de masse m_0 est représentée par une quasi-particule libre de charge $-e$ et de masse m_e , que l'on appelle la masse effective de l'électron [6]. La fonction d'onde électronique décrivant l'électron peut être exprimée sous la forme d'une combinaison d'ondes progressives. [7]

$$\psi_k(r) = u_k(r)e^{ikr} \tag{2-14}$$

Un paquet d'ondes construit à partir d'une fonction d'onde proche d'un k particulier a une vitesse de groupe classique donnée par la relation de dispersion

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (2-15)$$

C'est-à-dire pour des ondes électroniques structurées en bande :

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E \quad (2-16)$$

Le travail effectué par une force extérieure F pendant un temps dt est :

$$dE = -Fv_g dt \quad (2-17)$$

Or la variation d'énergie du paquet d'onde a aussi pour conséquence la variation de la position moyenne du paquet d'ondes dans la structure de bande donnée par :

$$dE = -\nabla_k E dk = \hbar v_g dk \quad (2-18)$$

Par identification, on voit donc que le centre du paquet d'onde soumis à une force F décrit la structure de bandes en suivant la dynamique :

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (2-19)$$

On constate ainsi que s'il n'y a pas de mécanisme dissipatif pour arrêter la force F, le paquet d'ondes va se mettre à circuler dans la structure de bande, c'est-à-dire osciller de part et d'autre de la zone de Brillouin. : Ce sont des oscillations de Bloch. En l'absence de tout processus dissipatif, un électron soumis à une force uniforme F acquerra donc un mouvement uniforme dans l'espace k et accélérera dans l'espace réel avec une accélération de:

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \nabla_k E = \frac{1}{\hbar} [\nabla_k \nabla_k E] \frac{dk}{dt} \quad (2-20)$$

donc :

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} [\nabla_k \nabla_k E] F = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_k [F \cdot \nabla_k E] \quad (2-21)$$

Ecrivaint

$$F \cdot \nabla_k E = \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial E}{\partial k_i} F_i \quad (2-22)$$

On obtient la composante i (i = x, y, z) de l'accélération

$$a_i = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} F_j \quad (2-23)$$

La masse effective est un tenseur naturellement défini à partir de a comme suit :

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \tag{2-24}$$

La masse effective tire son origine de l'interaction des électrons avec le potentiel périodique du cristal [8].

Comme conclusion, on dit que la vitesse, l'accélération et la masse effective d'un électron dépendent donc de l'énergie d'interaction avec son environnement, donc de k .

2.4.1 Masse effective des trous

Considérons les trous de la bande de valence, dont la masse effective est définie comme l'électron, par l'inverse de la dérivée seconde de la courbe de dispersion. Mais la bande de valence des semi-conducteurs cubiques est constituée de deux branches dégénérées en $k = 0$. La structure est développée dans la Figure (2.2).

La figure (2.2) montre la courbe de dispersion autour de $k = 0$, et l'énergie du trou compte positivement et à la bas. Les bandes les plus courbées, les bandes inférieures, correspondent à des trous de masse effective plus faible. Ces trous sont appelés trous de lumière l_h de bande. La bande avec la plus faible courbure, bande supérieure, est appelée la bande hyperporeuse h_h (heavy holes). [9]

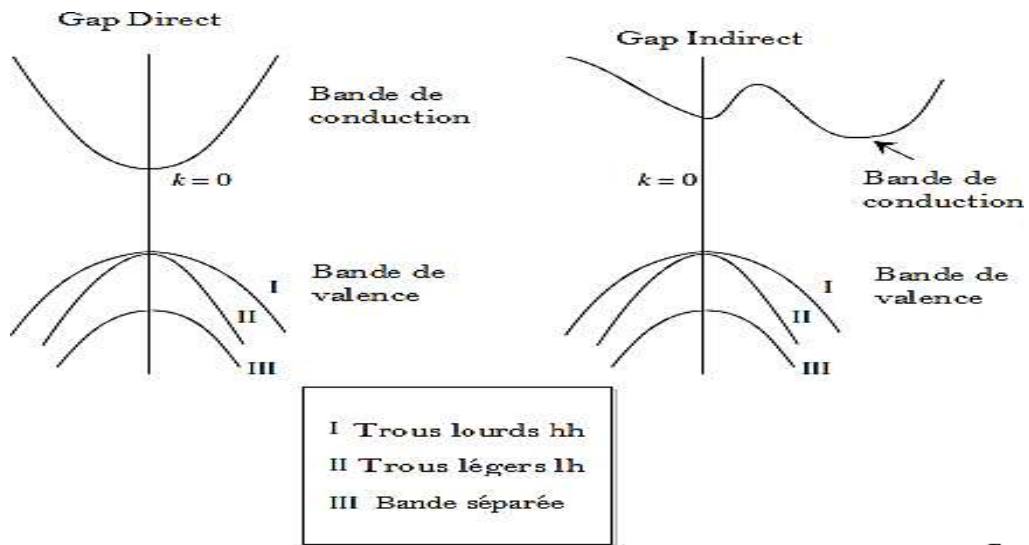


Figure 2.2: Trous lourds et trous légers

Ainsi, près du sommet de la bande de valence, il existe deux types de trous dont les énergies en fonction du vecteur d'onde sont données par des expressions plus complexes que dans le cas des électrons.

$$E(k) = E_v + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 \pm \sqrt{B^2 K^2 + C^2(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)} \right] \tag{2-25}$$

Le signe + correspondant au trou de lumière et le signe - trou lourd. Néanmoins, on peut substituer la sphère représentée par la ligne pointillée sur la figure à la surface réelle par une approximation satisfaisante. Dans ce cas, les masses isotropes effectives sont définies pour les trous lourds et légers. En donnant :

$$\gamma_1 = 1 \quad (2-26)$$

$$\gamma_1 = \frac{B}{2} \quad (2-27)$$

$$\gamma_1 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \sqrt{C^2 + 3B^2} \quad (2-28)$$

$$\bar{\gamma} = \sqrt{2\gamma_2^2 + \gamma_3^2} \quad (2-29)$$

La masse effective des trous lourds et légers est donnée par :

$$m_{hh} = \frac{m_0}{\gamma_1 - \bar{\gamma}} \quad (2-30)$$

$$m_{lh} = \frac{m_0}{\gamma_1 + \bar{\gamma}} \quad (2-31)$$

Les paramètres $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$: sont appelés les paramètres de la bande de valence du semiconducteur. Leur valeur est calculée pour tous les semiconducteurs cubiques et mesurées pour la plupart d'entre eux. On peut alors exploiter la bande de valence dans une approximation parabolique par des lois similaires à celles utilisées pour la bande de conduction. En comptant les énergies vers l'avant et vers le bas, ces lois s'écrivent comme suit :

$$m_{hh}(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \quad (2-32)$$

$$m_{lh}(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} \quad (2-33)$$

Comme les électrons dans la bande de conduction, les trous dans la bande de valence se comportent comme des quasiparticules libres de masses m_{hh} et m_{lh} respectivement. Les masses d'électrons effectives, les paramètres de bande de valence et les masses de trous effectives pour la plupart des semiconducteurs IV-IV, III-V et II-V sont indiqués dans le tableau (2-1).

Tableau 2-1: Masses effectives des électrons et des trous aux extrémités des bandes.

[9] Paramètres caractéristiques de la bande de valence

Semi conducteur	Masses effectives des électrons m_e / m_0		Paramètres de la bande de valence			Masses effectives des trous m_h / m_0	
	m_1 / m_0	m_2 / m_0	γ_1	γ_2	γ_3	m_{lh} / m_0	m_{lh} / m_0
C (Diamant)	1,4	0,36	-	-	-	2,18	0,7
Si	0,916	0,191	4,22	0,39	1,44	0,53	0,16
Ge	1,588	0,082	13,35	4,25	5,69	0,35	0,043
SiC	0,3 _{0e}	0,4 _{1e}	-	-	-	0,84	0,79
AlN	0,3	-	-	-	-	1	0,47
AlP	3	0,2	3,47	0,06	1,15	0,63	0,20
AlAs	1,1	0,19	4,04	0,78	1,57	0,76	0,15
AlSb	1,61	0,23	4,15	1,01	1,75	0,94	0,14
GaN	0,2	-	-	-	-	0,8	0,26
GaP	1,1	0,22	4,20	0,98	1,66	0,79	0,14
GaAs	0,067		7,65	2,41	3,28	0,62	0,074
GaSb	0,043		11,8	4,03	5,26	0,49	0,046
InN	0,1		-	-	-	0,5	-
InP	0,073		6,28	2,08	2,76	0,85	0,089
InAs	0,023		19,67	8,37	9,29	0,60	0,027
InSb	0,012		35,08	15,64	16,91	0,47	0,015
ZnO	0,24		-	-	-	2,27	0,79
ZnS	0,28		2,54	0,75	1,09	1,76	0,23
ZnSe	0,17		3,77	1,24	1,67	1,44	0,149
ZnTe	0,15		3,74	1,07	1,64	1,27	0,154
CdS	0,16		-	-	-	5,0	0,70
CdSe	0,11		-	-	-	2,5	0,45
CdTe	0,09		5,29	1,89	2,46	1,38	0,103
HgS	-		-41,28	-21,0	-20,73	2,78	-0,012
HgSe	0,019		-25,96	-13,69	-13,20	1,36	-0,019
HgTe	0,027		-18,68	-10,19	-9,56	1,12	-0,026

2.4.2 Masse effective des électrons

Les électrons dans la bande de conduction sont caractérisés par une fonction d'onde représentant la somme des ondes de Bloch des orbitales antiliantes. En termes de particules, il s'agit d'une particule en potentiel de cristallisation. On note cette particule quasi-libre par charge e^- et masse m^* , appelée masse effective de l'électron. La masse effective d'un électron est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion d'énergie spatiale $k^{\vec{}}$.

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \tag{2-34}$$

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct, la bande de conduction est univallée, centrée en $k_0=0$ et isotrope au voisinage de k_0 . Si on appelle E_c l'énergie minimum, l'expression $E(k)$ s'écrit :

$$E(k) = E_c + \frac{1}{2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2} k^2 \quad (2-35)$$

Ou compte tenu de la définition de la masse effective d'équation :

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (2-36)$$

Par conséquent, les électrons voisins du minimum de la bande de conduction se comportent comme des électrons libres de masse m_e .

Tant que la courbure de la bande de conduction ne change que légèrement autour du minimum, la masse effective est constante, donc l'énergie $E(K)$ varie quadratiquement avec le vecteur d'onde K . Cette loi de variation constitue une approximation de la ceinture dite parabolique. Lorsque l'énergie cinétique de l'électron devient très grande, l'électron s'éloigne de E_c dans l'espace énergétique, sa masse change et l'approximation parabolique ne tient plus. Dans le cas des semi-conducteurs à gap indirect, la bande de conduction est multivallée et anisotrope, avec plusieurs minima équivalents localisés en différents points de la zone de Brillouin. Une surface d'énergie constante proche du minimum k_0 est un ellipsoïde. L'expression de la masse effective est :

$$m_l^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (2-37)$$

$$m_t^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (2-38)$$

Avec :

m_l^* : Masse effective de l'électron de la vallée considérée, dans son mouvement suivant l'axe de révolution de l'ellipsoïde, appelée aussi masse effective longitudinale.

m_t^* : Masse effective de l'électron dans son mouvement dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution, appelée aussi masse effective transversal. [10]

2.5 Phénomènes de transport dans les semiconducteurs

Dans les semiconducteurs, le courant électrique est généré par le mouvement de porteurs libres (électrons ou trous) sous l'action d'une force extérieure. La source de cette force peut être excitée par un champ électrique ou par un gradient de concentration dans un semiconducteur.

[11]

Dans le premier cas, le courant est appelé de conduction ou d'entraînement, tandis que dans le second cas, le courant est appelé diffusion. Le courant de conduction se produit lorsqu'un champ électrique (ou champ magnétique) est appliqué à un semiconducteur, et nous avons tendance à déplacer les porteurs de charge, les électrons et les trous. La conduction d'un champ électrique dans un matériau peut se faire à deux niveaux :

- Par bande de conduction des électrons qui remontent jusqu'au champ électrique appliqué.
- A travers des trous dans la bande de valence se déplaçant dans le même sens que le champ électrique.

Notant que, puisque les charges équivalentes sont de signes opposés, les courants équivalents résultants sont dans la même direction en s'ajoutant. Les courants de diffusion apparaissent lorsque la densité de porteurs libres change localement dans le semiconducteur, soit par des changements de température ou de lumière, soit souvent par des techniques appropriées telles que le dopage inhomogène. Ce gradient de concentration entraîne le déplacement des porteurs des régions les plus peuplées vers les régions les moins peuplées, un phénomène connu sous le nom de diffusion. En général, les courants électriques sont provoqués par deux phénomènes (le champ électrique et la présence d'un gradient de concentration). Dans notre étude, le courant étudié est le courant de conduction des électrons dans la bande de conduction. [12]

2.6 Conclusion

La densité de charge électronique dans les semiconducteurs est d'un intérêt fondamental pour les chercheurs en science des matériaux car elle fournit des informations utiles sur les propriétés de liaison, les impuretés interstitielles, les réponses d'état de bande spécifiques et les perturbations dans ces matériaux de recherche.[13]

La masse effective est une notion utilisée en physique du solide pour l'étude du transport des électrons. Plutôt que de décrire des électrons de masse fixée évoluant dans un potentiel donné, on les décrit comme des électrons libres dont la masse effective varie. [14]

Références bibliographiques citées dans le chapitre 2

- [1] J. C. Phillips, Science 169, 1035 (1970) ; Rev. Mod. Phys. 42, 317 (1970).
- [2] C. A. Coulson, L. B. Redeï and D. Stocker, Pro. Roy. Soc. 270, 352 (1962).
- [3] J. P. walter and M. L. Cohen, Phys Rev. B4, 1877 (1971).
- [4] A. Baldereschi, Phys. Rev. B7, 5212 (1973).
- [5] D. J. Chadi and M. L. Cohen, Rev. B8, 5747 (1973).
- [6] D. J. Chadi and M. L. Cohen, Phys. Status Solidi (b) 62, 238 (1974).
- [7] H. Mathieu, « Physique des semiconducteurs et composants électroniques » édition Dunod, Paris (2001).
- [8] H. T. Diep, « Physique de la matière condensée » édition Dunod, Paris (2003).
- [9] E. Rosencher et B. Vinter, « Optoélectronique » édition Dunod, Paris (2002).
- [10] Aboukacem, K. H. I. A. L. I. Elaboration des couches minces de ZrO₂ préparées par la technique Dip-coating. Diss. Université Ibn Khaldoun-Tiaret-, 2018.
- [11] B .Hadda : « Modélisation et étude d'un puits quantique contraint à base de GaInAs/GaAs et calcul du courant de seuil », mémoire Magister, Université de Blida, juillet.
- [12] Bonnaud, Olivier. "Physique des Solides, des Semiconducteurs et Dispositifs." Université de Rennes 1: 78 (2003).
- [13] Kalt, Heinz. Optical Properties of III–V Semiconductors: The Influence of Multi-Valley Band Structures. Vol. 120. Springer Science & Business Media, 2012.
- [14] <https://fr.m.wikipedia.org> ».

CHAPITRE 3:

Résultats et discussion

CHAPITRE 3: Résultats et discussion

3.1 Introduction

Ces dernières années les alliages ternaires ont reçu une attention croissante car leurs paramètres interstitiels et cristallographiques peuvent être systématiquement modifiés par le choix des composants de l'alliage, il faut noter qu'ils ont diverses applications, telles que les alliages ternaires préparés par épitaxie, qui ont été utilisés comme couche active dans le laser et les photodétecteurs utilisés comme détecteurs de rayonnement dans les systèmes de communication optique. De plus, ils sont idéals pour les transistors à grande vitesse. [1]

CdSTe est implanté en tant que sous-cellule intermédiaire est utilisé pour couvrir une partie du spectre dans les cellules solaires. Ils est généralement fabriqué sur des substrats InP (Indium Phosphorus).

Dans ce chapitre nous allons étudier la dépendance des propriétés électroniques, les masses effectives des électrons et des trous lourds ainsi que les distributions de charges du système d'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ dans la structure zinc-blende en fonction de la concentration. Les calculs sont effectués en utilisant une approche des pseudopotentiels sous l'approximation du cristal virtuel avec et sans tenir compte de l'effet du désordre. Des caractéristiques telles que la structure de bande électronique, les masses effectives des électrons et des trous lourds, ainsi que les densités de charges de valence et de conduction vont être calculé et discuté. L'objectif de ce travail est de fournir de nouveaux résultats en faisant varier la composition de l'alliage x . Les résultats obtenus pour les alliages ternaires $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ de blende de zinc sont généralement en bon accord avec ceux rapportés dans la littérature.

3.2 Etude des propriétés électroniques

La méthode de pseudopotentiel empirique locale, couplée à l'approximation du cristal virtuel qui introduit l'effet du désordre compositionnel, comme un potentiel effectif est utilisée pour étudier les propriétés électroniques à savoir la structure de bande électronique, le gap énergétique, la masse effective des électrons et des trous le gap et la densité de charge électronique ainsi que leur variations en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$. [2]

3.2.1 La méthode empirique de pseudopotentiel

C'est une autre image de la méthode de pseudopotentiel, elle a été appliquée avec succès aux semiconducteurs de structure diamant et de structure zinc-blende. Dans cette méthode empirique de pseudopotentiel, la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelques termes de $V(G)$ que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux. L'EPM résout le problème d'ajustement des facteurs de formes $V(G)$ du pseudopotentiel $V_p(r)$ présenté par la superposition linéaire des pseudopotentiels atomiques

$$V_P(r) = \sum_{R, \tau} V_a(r - R - \tau) \quad (3-1)$$

R est un vecteur du réseau direct.

τ est le vecteur de translation du réseau direct.

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

$$V_P(r) = \sum_G S(G) V_a(G) \exp(iG \cdot r) \quad (3-2)$$

$V_a(G)$ est le facteur de forme $S(G)$ est le facteur de structure donné par [16] :

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iG \cdot r) \quad (3-3)$$

N_a étant le nombre d'atomes de base.

La fonction d'onde $\Psi_{n,k}(r)$ et les valeurs des bandes d'énergie $E_n(k)$ sont les solutions de l'équation :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_P(r) \right] \Psi(r) = E_n(k) \Psi_{n,k}(r) \quad (3-4)$$

où n représente l'indice de la bande.

Les fonctions $\Psi_n(r)$ ont la forme d'une fonction de Bloch et peuvent être développée en une série d'ondes planes.

Le procédé de calcul d'EPM est comme le montre le diagramme suivant [4] :

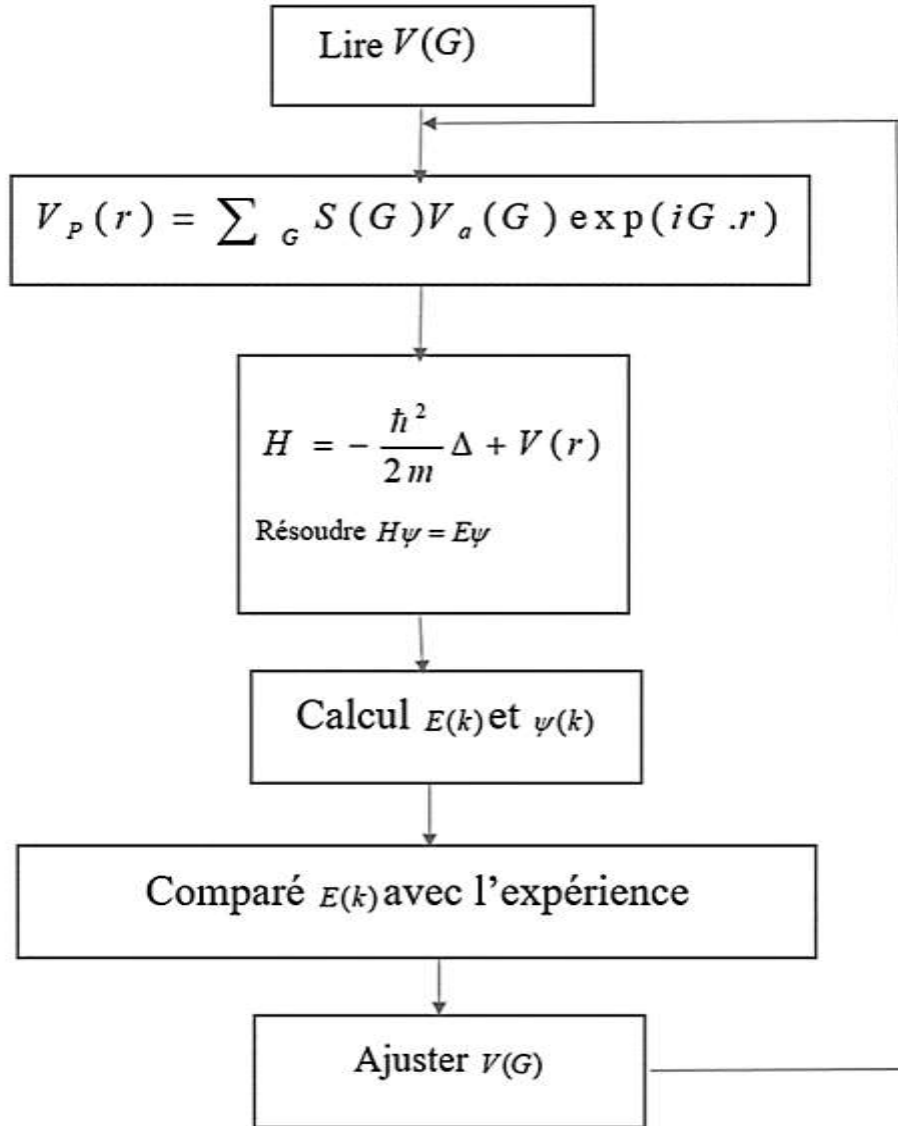


Figure 3.1 : L'Algorithme du calcul de l'EPM

On commence par choisir $V(G)$, la structure est introduite par le facteur de structure, l'équation de Schrödinger est résolue pour les énergies $E_n(k)$ et les pseudofonctions $\Psi_{n,k}$, ces énergies sont par la suite comparées à l'expérience. Dans le cas d'un désaccord entre l'expérience et la théorie, $V(G)$ sera altéré. Néanmoins, la méthode a prouvé sa convergence par un nombre réduit d'itérations.

D'autres méthodes des pseudopotentiels ont été développées pour le calcul de la structure

de bandes, notamment la méthode self-consistante qui utilise la fonction d'onde obtenue par L'EPM adoptée surtout pour le calcul des fonctions diélectriques, la méthode Ab initio appelée aussi pseudopotentiel du premier principe, utilisée dans le calcul de l'énergie totale et les propriétés structurales des solides .

3.2.2 Structure de bandes des alliages ternaires $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$

Les résultats obtenus de la structure de bande de l'alliage semiconducteur étudié en utilisant les facteurs de forme pseudopotentiels locaux symétriques et antisymétriques et paramètres de réseau des composés semiconducteurs binaires CdS et CdTe en phase zinc-blende sont indiqués dans le tableau (3.1).

Tableau 3.1: Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs CdS et CdTe dans la phase zinc-blende ainsi que les constantes du réseau a en (u.a).

Composés	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau a (en unité atomique)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
CdS	-0.23	0.01	0.06	0.134	0.096	0.019	11.0246
CdTe	-0.396388	0.198275	0.455948	0.1311	0.28	0.70814	12.2495

En utilisant ces facteurs de formes, le calcul des gaps d'énergies pour les composés binaires de notre alliage ternaire sont illustrés dans le tableau (3.2). Nos résultats sont en très bonne accord avec l'expérience.

Tableau 3.2: Gaps énergétiques des composés zinc-blende CdS et CdTe

Composé	E_{Γ}^F (eV)	E_{Γ}^X (eV)	E_{Γ}^L (eV)
CdS	2.38 ^a	3.63 ^a	3.49 ^a
	2.36 ^b	3.64 ^b	3.50 ^b
	2.3900 ^c	3.64 ^c	3.50 ^c
CdTe	1.50 ^a	3.47 ^a	2.46 ^a
	1.50 ^b	3.48 ^b	2.47 ^b
	1.5045 ^c	3.48 ^c	2.47 ^c

^a Nos calcul

^b Ref . [3]

^c Ref . [4]

3.2.3 Structure de bandes de CdS et de CdTe

3.2.3.1 Le composé CdS

Le Sulfure de Cadmium CdS est un semiconducteur à gap direct dont l'énergie est : $E_g = 2.5$ eV formé d'un élément métallique, le Cadmium ($Z= 48, 4d^{10}5s^2$), et d'un élément semimétallique, le Sulfure ($Z=16, 3s^2 3p^4$)

3.2.3.2 Le composé CdTe

Le Tellure de Cadmium CdTe est un composé binaire de masse molaire $240 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ formé d'un élément métallique, le Cadmium ($Z = 48, 4d^{10}5s^2$), et d'un élément semi-métallique, le Tellure ($Z = 52, E_g = 0,33 \text{ eV}, 4d^{10}5s^2 5p^6$). [5]

Les structures de bandes de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ et ses composés binaires sont représentées dans les figures (3.1), (3.2) et (3.3) pour $x=0$, $x=1$, $x=0.3$ respectivement avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

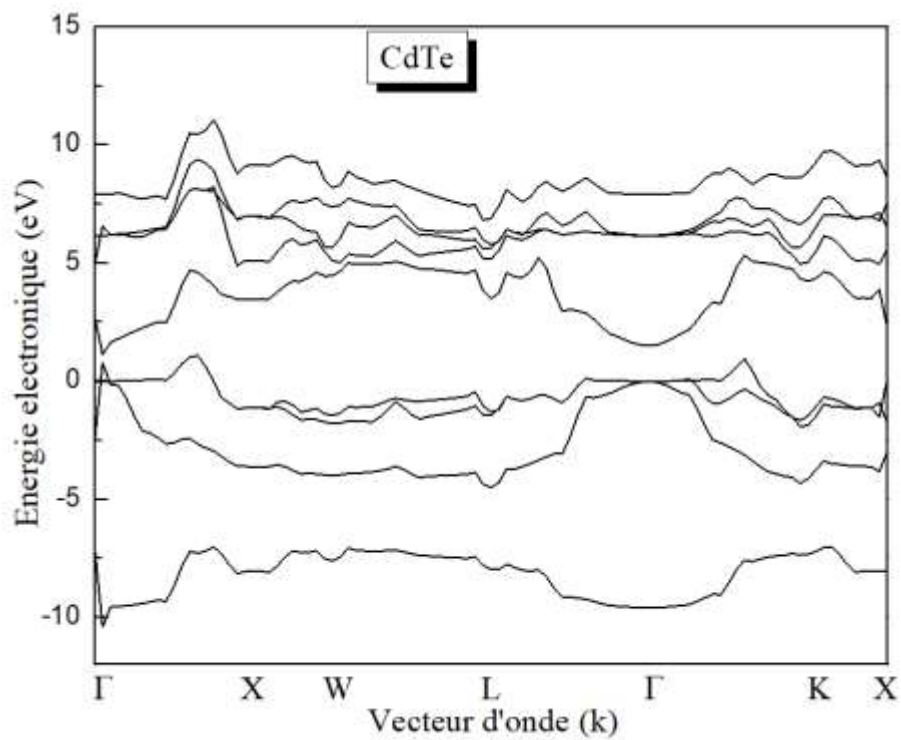


Figure 3.2: La structure de bandes électronique de l'alliage pour $x=0$ (CdTe)

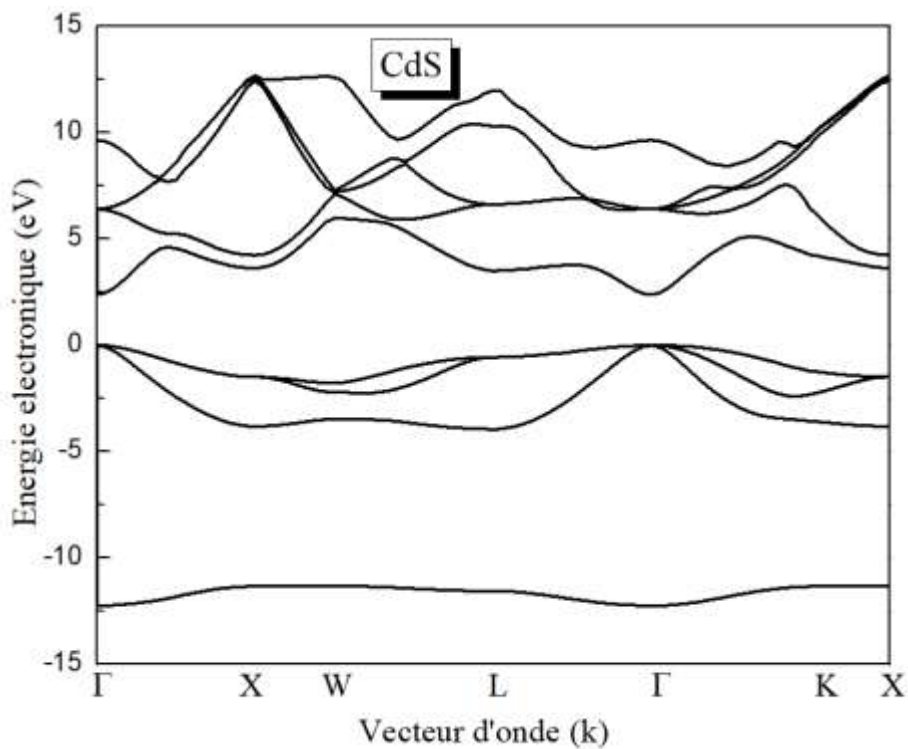


Figure 3.3: La structure de bandes électroniques de l'alliage pour $x=1$ (CdS)

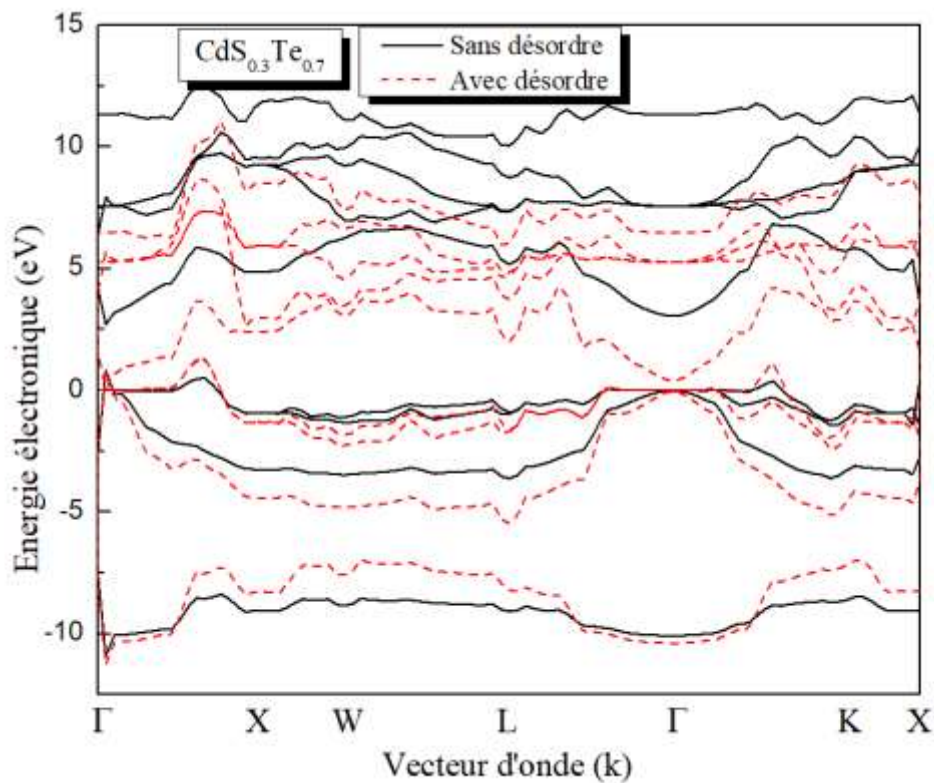


Figure 3.4: La structure de bandes électronique de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ pour $x=0.3$ avec et sans désordre

Le sommet de bandes de valence pour tous les alliages semiconducteurs et leurs parents est pris comme origine des énergies.

Nous remarquons que le maximum de la bande de valence est au point Γ centre de la zone de Brillouin et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ . L'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ est un semi-conducteur à gap direct E_{Γ}^{Γ} pour toutes les concentrations étudiées.

3.3 Gaps énergétiques des alliages ternaires $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$

Les variations du gap direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{Γ}^X , E_{Γ}^L calculées pour différentes compositions x allant de 0 à 1 de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ sont répertoriées dans le tableau (3.3).

Les Valeurs pour nos composés parents par rapport aux données théoriques sont en bon accord. Pour les alliages $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$, nos résultats sont des prédictions.

Tableau 3.3 : Les variations des gaps énergétique de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ fonction de quelques concentrations x avec et sans tenir compte du désordre compositionnel

Composition x	E_g^F	
	sans désordre	Avec désordre
0	1.50 ^a	1.50 ^a
	1.50 ^b	1.50 ^b
	1.50 ^d	1.50 ^d
0.3	3.06	0.36
0.5	3.47	1.45
0.7	3.44	2.63
0.9	2.88	3.28
1	2.38 ^a	2.38 ^a
	2.36 ^c	2.36 ^c
	2.39 ^d	2.39 ^d

^a Nos calculs

^b Ref . [6]

^c Ref . [7]

^d Ref . [3]

La variation des gaps énergétiques E_g^F , E_g^X et E_g^L de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ en fonction de la composition x avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel est présentée sur les figures (3.4), (3.5) et (3.6) respectivement.

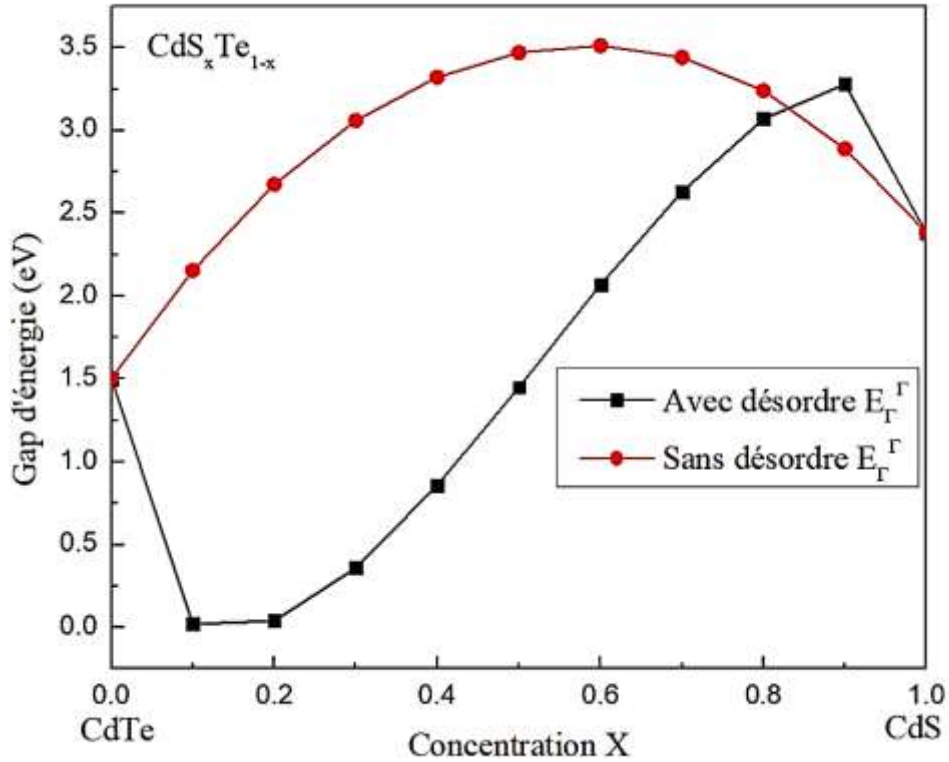


Figure 3.5 : Gap d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire

CdS_xTe_{1-x} avec et sans désordre compositionnel

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (3.51 eV), puis diminue jusqu'à (2.38 eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire et que l'effet du désordre est important. L'équation du fit quadratique est:

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 1.5048 + 7.03715x - 6.12972x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-5)$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 0.42167 + 1.05287x + 1.88143x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-6)$$

L'équation (3-5) Suggère un paramètre d'inclinaison de la bande interdite optique de -6,12 eV. La valeur obtenue n'est pas en accord avec la valeur expérimentale de 1,88 eV rapporté par Lane. [8] Le désaccord est essentiellement attribué à la négligence de l'effet de désordre compositionnel par la VCA. En ajoutant une correction au VCA, c'est-à-dire en tenant compte de l'effet du désordre de l'alliage, les auteurs ont trouvé un paramètre de courbure de la bande interdite de 1,878 eV. Les données sont en excellent accord avec celles de l'expérience. L'accord est atteint pour la valeur de $P = 1.004$. Ceci montre l'importance du désordre de

l'alliage CdS_xTe_{1-x} dans le calcul de la bande interdite et qui ne doit pas être ignoré pour obtenir un accord significatif avec l'expérience. [8]

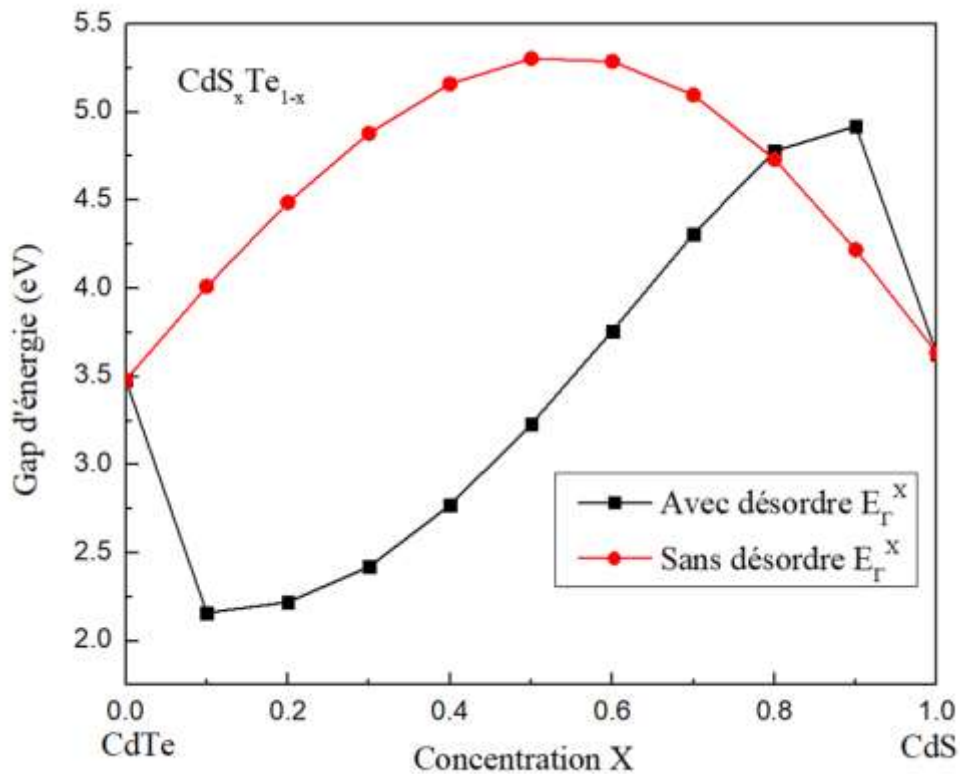


Figure 3.6: Gaps d'énergie indirect E_{Γ}^x en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec et sans désordre compositionnel

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (5.30 eV), puis diminue jusqu'à (3.63eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'équation du fit quadratique est:

$$E_{\Gamma}^x = 3.39044 + 7.26548x - 7.00244x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-7)$$

$$E_{\Gamma}^x = 2.50979 + 0.94889x + 1.25887x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-8)$$

La figure (3.6); représente le gap d'énergie indirect correspondant à la transition entre le minimum de la bande de valence au point de haute symétrie Γ dans la zone de Brillouin et le maximum de la bande de conduction au point de haute symétrie L.

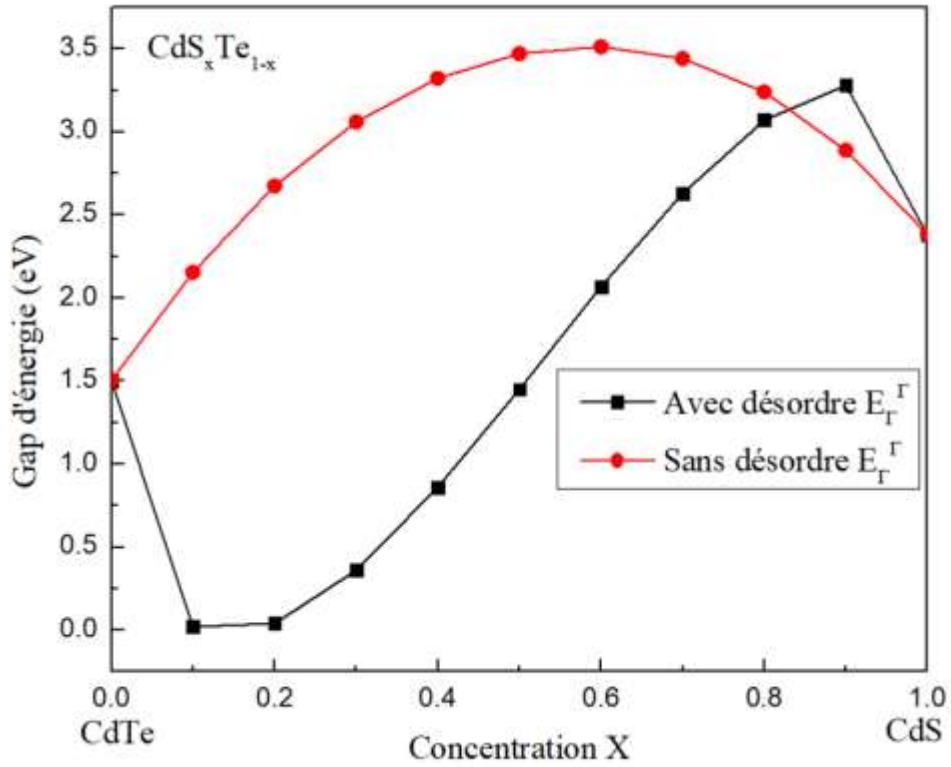


Figure 3.7: Gap d'énergie indirect E_{Γ}^L en fonction de la concentration x del'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec et sans désordre compositionnel.

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (5.32 eV), puis diminuent jusqu'à (3.49 eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire. L'équation du fit quadratique est :

$$E_{\Gamma}^L = 2.40108 + 10.26416x - 9.00717x^2 \quad \text{Avec désordre} \quad (3-9)$$

$$E_{\Gamma}^L = 0.64542 + 2.7207x + 1.69609x^2 \quad \text{Sans désordre} \quad (3-10)$$

Pour une éventuelle transition nous avons tracé les différentes courbes de variation des gaps énergétiques en fonction de la composition x sur la même figure(3.8)

l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} sans désordre compositionnel.

Nous constatons qu'il n'y a pas de transition entre les gaps énergétiques. Ce qui confirme nos résultats précédents, que notre alliage à un gap direct en allant de $x=0$ vers $x=1$, ce résultat est identique à la nature de gap de ses composés parents qui sont tous les deux à gap direct.

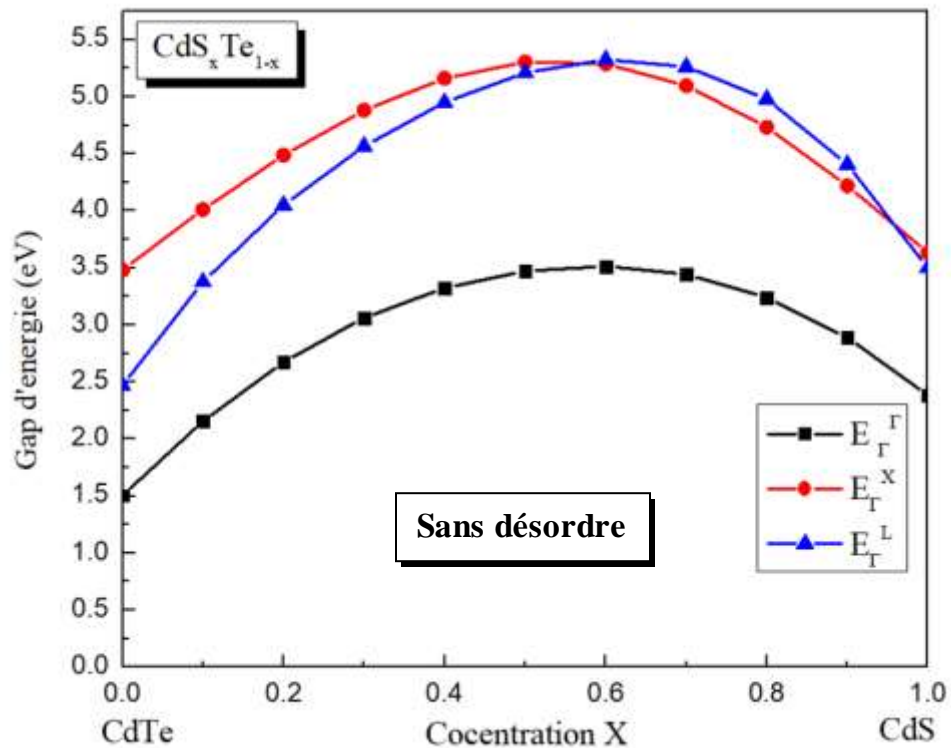


Figure 3.8: Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ sans désordre compositionnel.

Le gap d'énergie indirecte, en revanche, est la différence d'énergie entre le niveau d'énergie le plus élevé de la bande de valence et le niveau d'énergie le plus bas d'une autre bande de valence ou de conduction avec un moment différent. Dans ce cas, une transition électronique nécessite un changement de moment (vecteur d'onde) des électrons, ce qui rend ces transitions moins probables et moins efficaces.

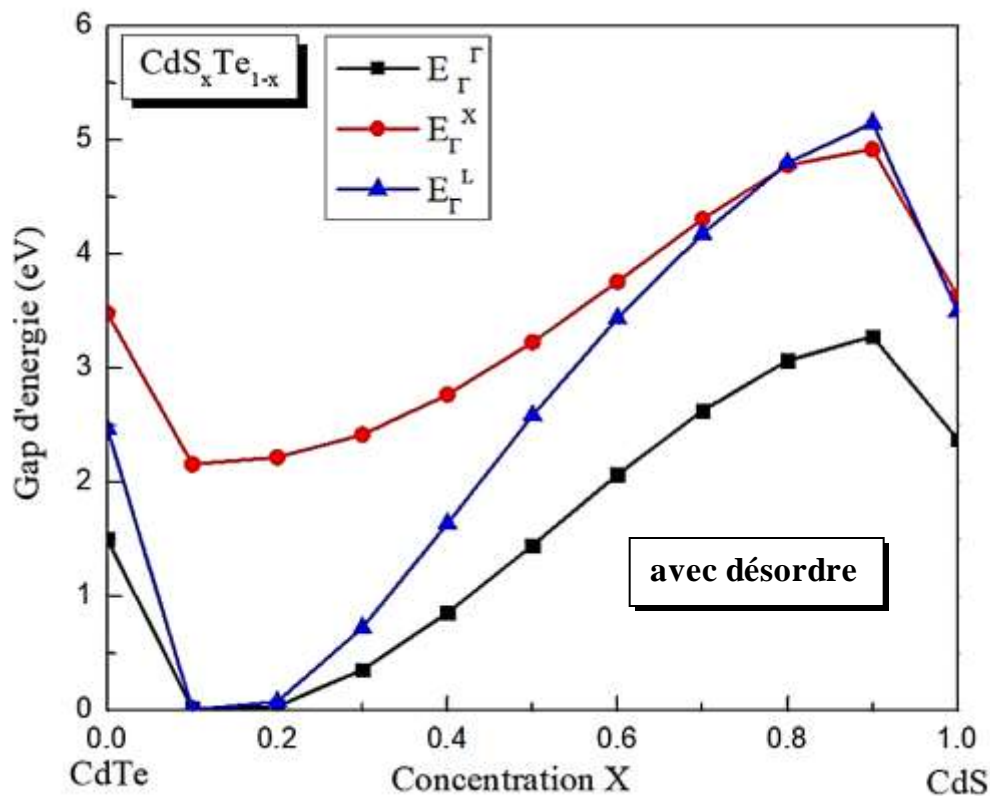


Figure 3.9: Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec désordre compositionnel.

Nous constatons aussi même en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel qu'il n'y a pas de transition entre les gaps énergétiques. Ce qui confirme nos résultats précédents, que notre alliage à un gap direct en allant de $x=0$ vers $x=1$.

3.4 Densité de charges électroniques

Si le calcul de la structure de bande s'avère très utile pour déterminer les propriétés électroniques d'un matériau, l'évaluation de la densité de charge est aussi intéressante.

La densité de charge est un outil complémentaire important utilisé pour décrire la redistribution électronique et la nature des liaisons chimiques dominantes entre les atomes du solide.

La densité de charges électroniques a été calculée, en utilisant les fonctions d'ondes obtenues à partir de l'utilisation de la méthode de pseudopotentiel. La densité de charge pour chaque bande de valence peut être écrite comme l'équation (2.2) [9] où la sommation est sur tous les états dans la zone de Brillouin pour une bande donnée.

La densité de charge totale pour un semiconducteur est obtenue en sommant la densité des charges de toutes les bandes de valences, celle comme c'est donné dans l'équation (2.4) où la somme est sur toutes les bandes occupées.

La forme générale de la courbe peut fournir des informations sur la dispersion des bandes de valence et comment les niveaux d'énergie varient avec le vecteur d'onde dans la direction [111]. Les variations de la densité de charge électronique indiqueront les variations de la population électronique dans la bande de valence.

La somme des quatre bandes de valence peut donner une mesure agrégée de la densité de charge électronique dans la bande de valence Figure (3.10). Cela peut fournir des informations sur la concentration totale d'électrons dans cette région d'énergie.

Les valeurs absolues de la densité de charge électronique dans la courbe reflètent la concentration relative d'électrons dans la bande de valence. Des valeurs plus élevées indiquent une occupation électronique plus importante dans cette région d'énergie.

Il peut être utile de comparer la courbe de densité de charge électronique obtenue avec des données de référence expérimentales ou théoriques pour l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec $x=0$. Cela permet de vérifier la validité des résultats et d'obtenir une meilleure compréhension des propriétés électroniques de l'alliage.

Pour une analyse plus détaillée et précise de la courbe de densité de charge électronique dans la direction [111] pour la somme des quatre bandes de valence de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec $x=0$, il est recommandé de consulter des études scientifiques spécifiques ou des modèles théoriques pertinents pour cet alliage ternaire. Ces ressources fourniront des informations plus détaillées sur la structure de bande et les propriétés électroniques de l'alliage dans cette direction particulière.

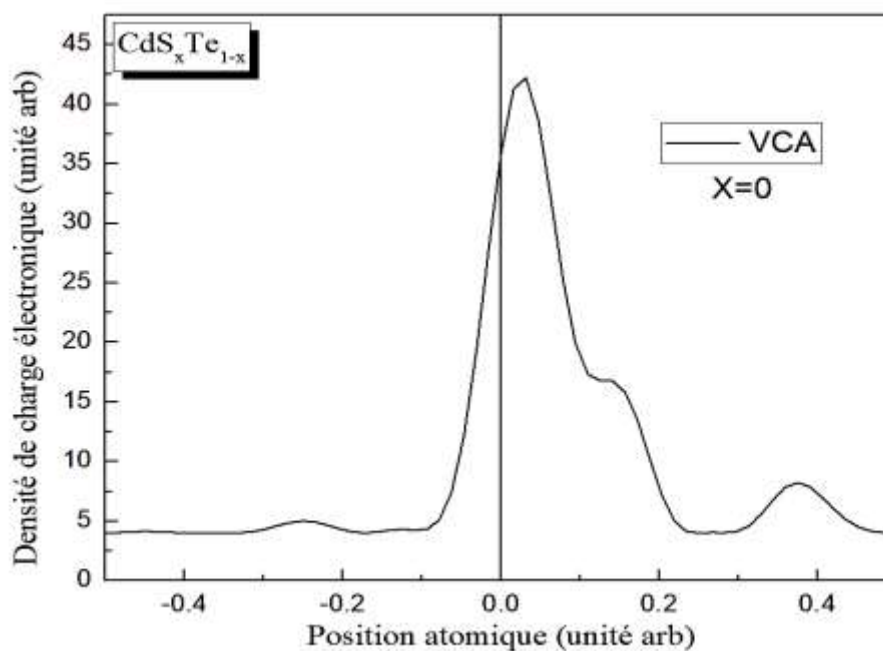


Figure 3.10 : Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence selon la direction [111] de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ pour $x=0$

La forme générale de la courbe peut donner des informations sur la dispersion de la bande de valence dans la direction [111] Figure (3.11) . Les variations de la densité de charge électronique indiqueront comment les niveaux d'énergie évoluent avec le vecteur d'onde.

Les pics et les creux dans la courbe peuvent représenter les sommets et les vallées des niveaux d'énergie de la bande de valence. Les positions et les intensités de ces pics peuvent fournir des informations sur les états électroniques dominants.

La valeur absolue de la densité de charge électronique indique la concentration relative d'électrons dans la bande de valence. Des valeurs plus élevées de densité de charge électronique peuvent correspondre à une plus grande occupation d'états électroniques ou à une plus grande mobilité électronique dans cette direction.

La présence de structures fines dans la courbe peut indiquer la présence d'interactions électroniques complexes, telles que des interactions électron-électron ou électron-trou. Ces structures peuvent donner des informations sur les propriétés optiques et de transport de l'alliage. Pour une analyse plus approfondie et précise de la courbe de densité de charge électronique dans la direction [111] de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ pour $x = 0$ dans la bande de valence, il est recommandé de consulter des études scientifiques spécifiques ou des modèles théoriques pertinents pour cet alliage ternaire. Ces ressources pourront fournir des informations plus détaillées sur la structure de bande et les propriétés électroniques de l'alliage dans cette direction spécifique.

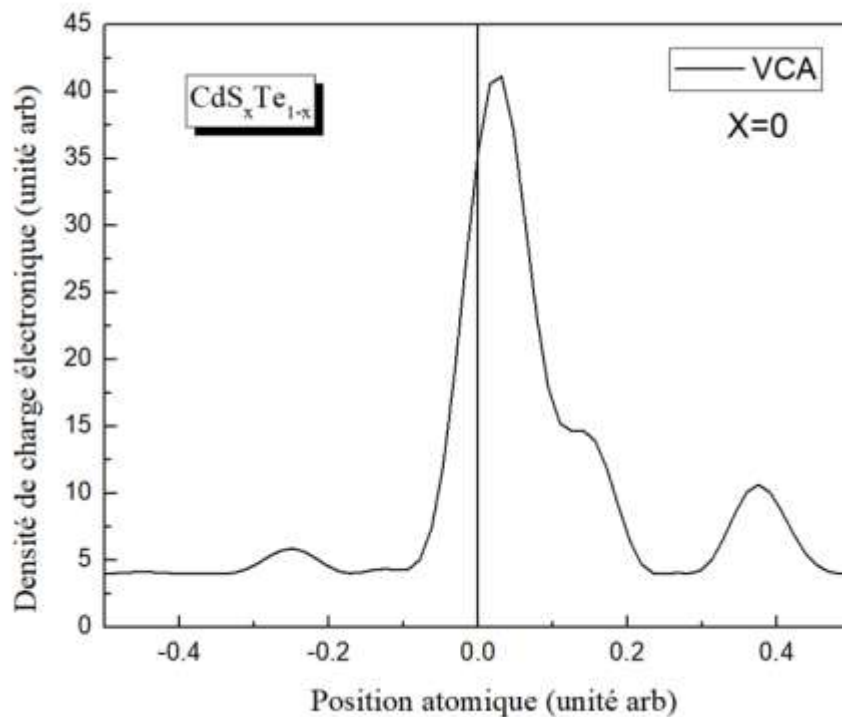


Figure 3.11: Densité de charge électronique au point Γ de la bande de conduction selon la direction [111] de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ pour $x = 0$.

La courbe peut vous montrer comment l'énergie des électrons varie en fonction du vecteur d'onde dans la direction [111]. Des pentes raides indiquent une dispersion élevée, ce qui signifie que les électrons peuvent facilement se déplacer dans cette direction. Des pentes plus faibles indiquent une dispersion plus faible, ce qui peut limiter la mobilité des électrons.

La courbe peut révéler les niveaux d'énergie spécifiques de la bande de conduction. Ces niveaux d'énergie peuvent être utilisés pour déterminer la séparation entre la bande de valence et la bande de conduction, ainsi que les énergies associées aux transitions électroniques.

La courbe de densité de charge électronique peut vous donner des informations sur la concentration d'électrons dans la bande de de bande.

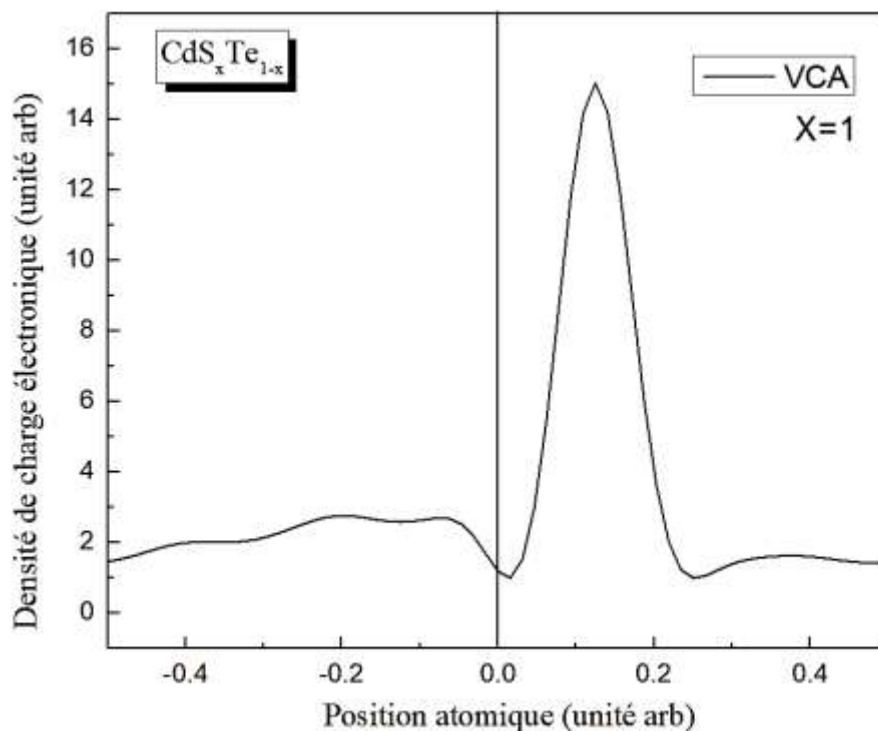


Figure 3.12: Densité de charge électronique au point Γ de la bande de conduction selon la direction [111] de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ pour $x = 1$

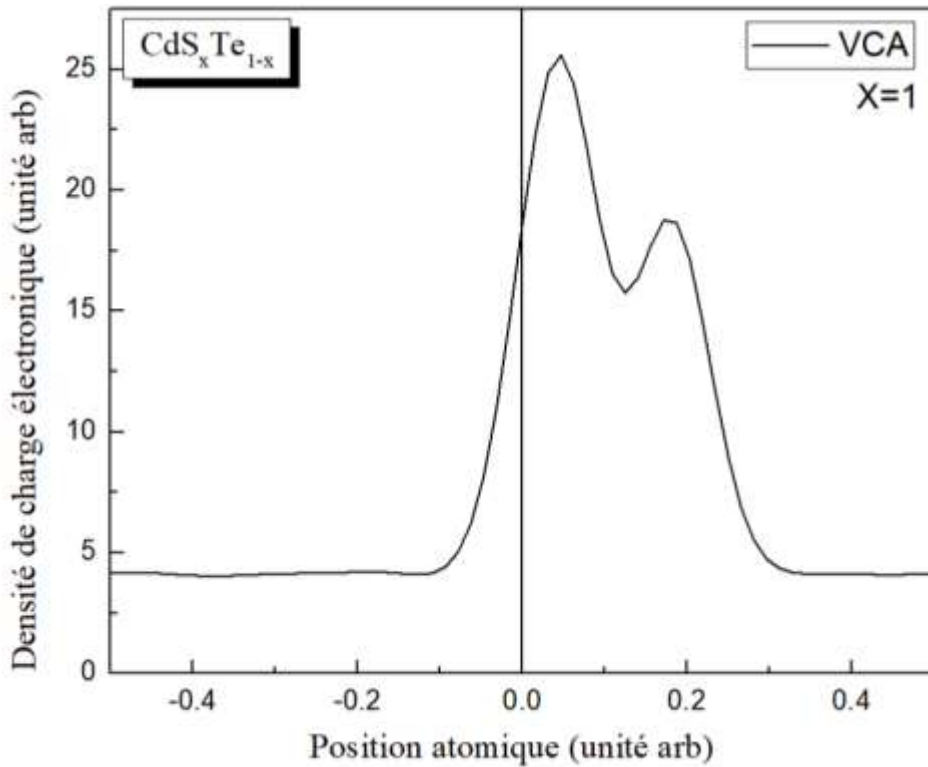


Figure 3.13: Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence selon la direction [111] de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ pour $x=1$

Dans le cas d'un système avec désordre, la densité des états électroniques peut être plus élevée ou plus faible que dans un système sans désordre, en fonction de la nature spécifique du désordre et des caractéristiques du matériau. Il n'est pas possible de déterminer a priori comment la densité des états varierait exactement pour une valeur spécifique de x égale à 0,3 sans connaître les détails spécifiques du système et du désordre impliqués.

En général, le désordre tend à élargir la densité des états électroniques, ce qui peut entraîner des effets tels qu'une mobilité réduite des porteurs de charge, une conductivité électrique réduite ou d'autres propriétés modifiées. Cependant, les effets précis du désordre dépendent de nombreux facteurs, y compris la nature et la concentration du désordre, la dimensionnalité du système, la force des interactions entre les particules, etc.

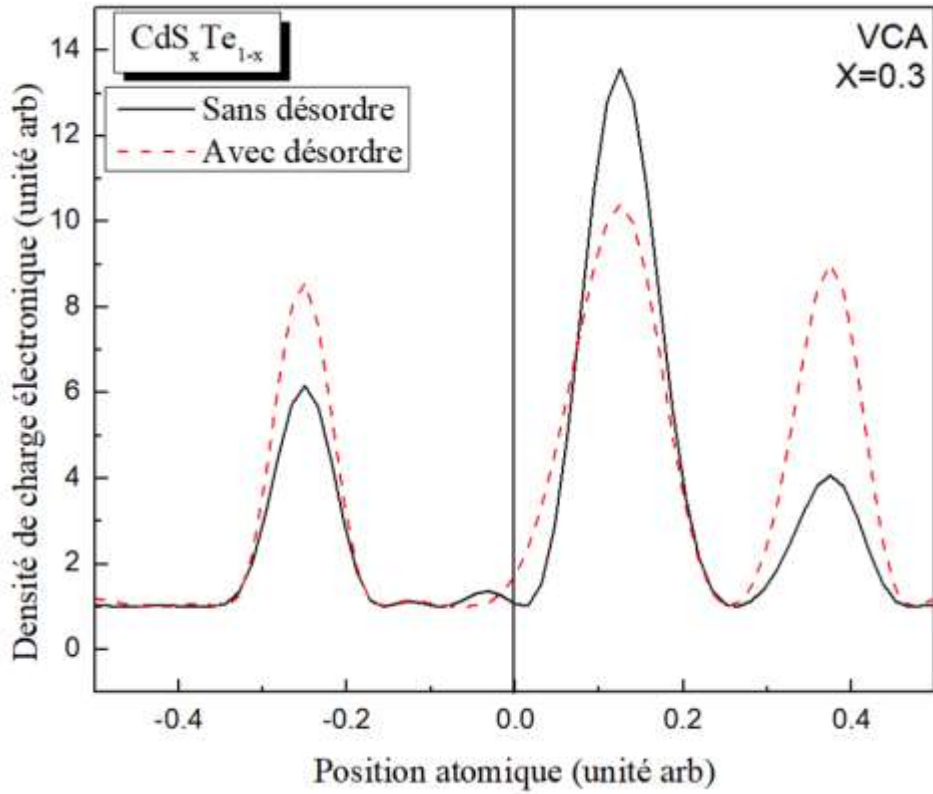


Figure 3.14: Densité de charge électronique au point Γ de la bande de conduction selon la direction [111] de l’alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec et sans désordre pour $x = 0.3$

3.5 Méthode de la masse effective

Le modèle de la masse effective (approximation de la masse effective) est utilisé dans le but de déterminer le gap énergétique et l'énergie d'excitation donnée par la formule suivante:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (3.11)$$

La masse effective de l'électron est un concept utilisé en physique des solides pour décrire le comportement d'un électron dans un cristal. Dans un cristal périodique, la structure de bande électronique détermine les propriétés électroniques, et la masse effective de l'électron est une approximation de la masse réelle de l'électron dans le cristal, en prenant en compte les interactions avec les autres particules et la structure du cristal.

Quelques valeurs de la masse effective des électrons et des trous pour quelques concentrations x de l’alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ sont présentées dans le tableau 3. 4.

Tableau 3.4: Calculs de la masse effective des trous et des électrons pour quelques concentrations de l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$.

Concentration	m_e/m_0	references	m_h/m_0	references
0	0.19	0.09 ^a ;	5.65	0.2 ^d
0.3	0.07		4.55	
0.5	0.16		6.18	
0.7	0.205256571		3.858823529	
0.9	0.200734394		1.754010695	
1	0.131179011	0.14 ^a ;	0.648221344	0.68 ^a ; 0.65 ^b

^a Ref . [12]

^b Ref . [13]

^c Ref . [14]

^d Ref . [15]

Dans le cas de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$, la composition x représente la proportion de soufre (S) dans l'alliage. En variant la composition x , on modifie la structure de bande électronique de l'alliage, ce qui peut avoir un impact sur la masse effective de l'électron.

Les propriétés électroniques des alliages ternaires dépendent de nombreux facteurs.

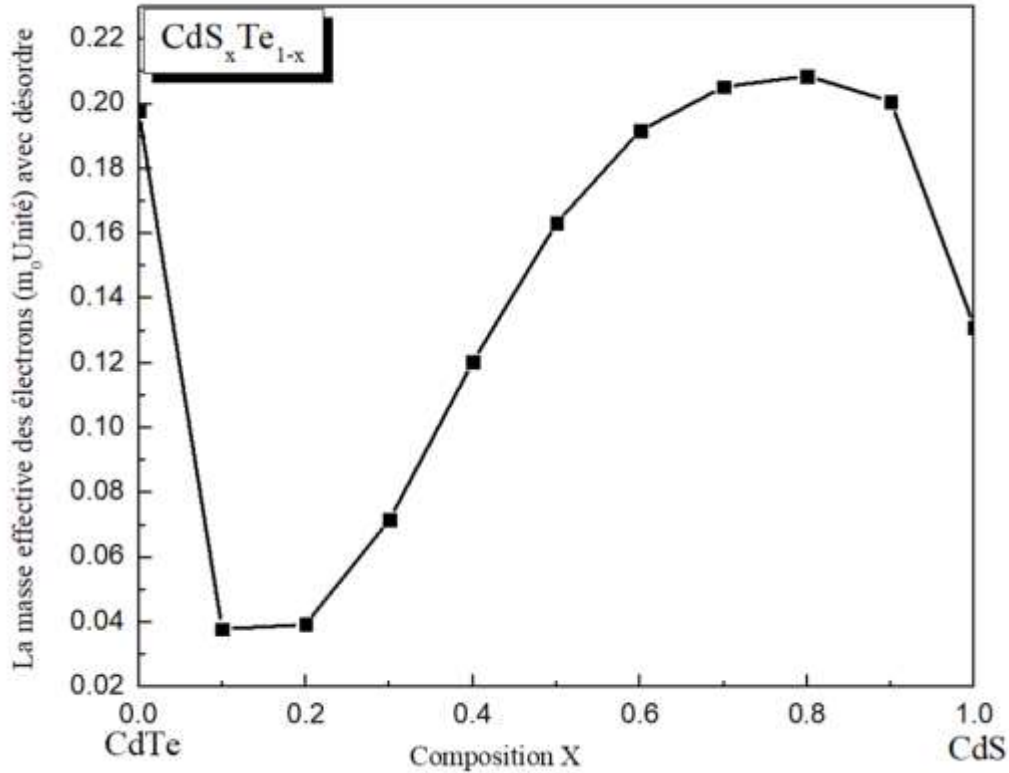


Figure 3.15: Variation de la masse effective de l'électron pour l'alliage ternaire $\text{Cd}_x\text{S}_x\text{Te}_{1-x}$ avec désordre fonction de la composition x .

La masse effective des trous est une propriété quantique qui décrit le comportement des trous (lacunes d'électrons) dans un matériau cristallin. Elle est une mesure de la quantité de masse effective qu'un trou se comporte comme s'il avait dans le vide plutôt que dans le matériau. Une masse effective plus faible indique une mobilité accrue des trous, ce qui est bénéfique pour les applications électroniques et optoélectroniques.

Ainsi, lorsque x varie de 0 à 1, la composition de l'alliage passe d'un matériau principalement constitué de tellure (Te) à un matériau principalement constitué de soufre (S).

L'effet de la composition sur la masse effective des trous dépendra des propriétés intrinsèques du soufre (S) et du tellure (Te), ainsi que des interactions entre les atomes dans l'alliage.

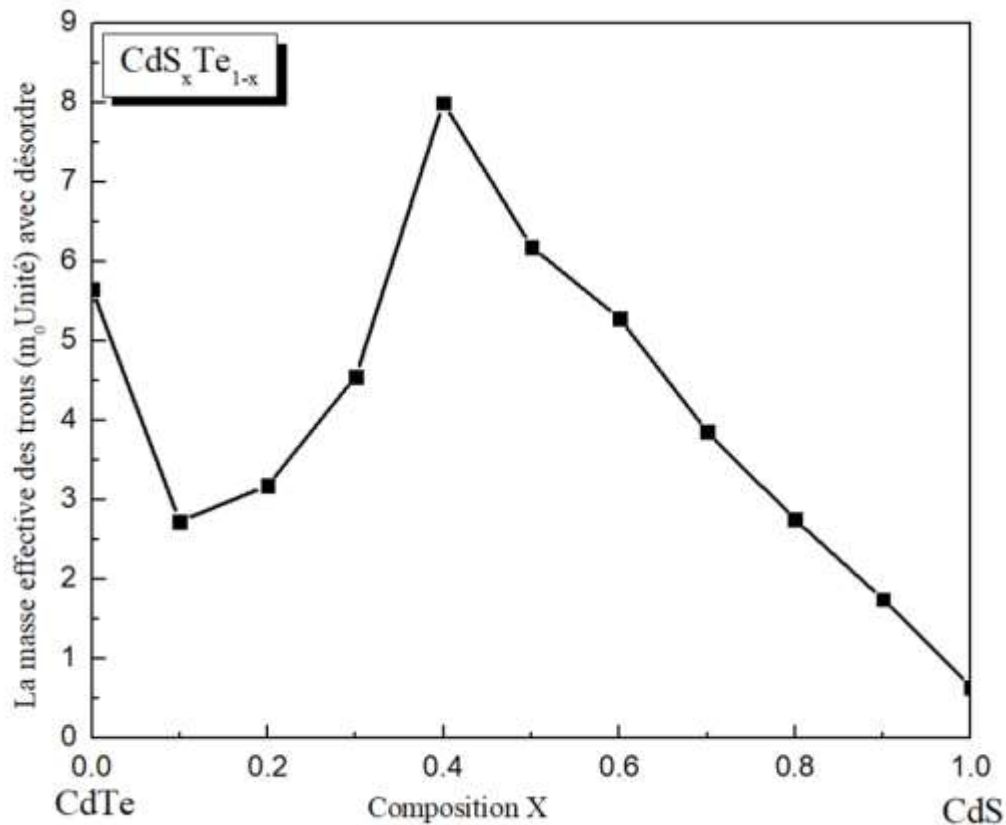


Figure 3.16: Variation de la masse effective des trous pour l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec désordre fonction de la composition x .

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés électroniques (structure de bandes et gaps énergétiques), densité de charge et la masse effective des électrons et des trous lourds des alliages semiconducteurs $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$, avec l'utilisation de la méthode empirique des pseudopotentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la composition x avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nos résultats de toutes les propriétés étudiées de l'alliage sont comparés à des données théoriques.

Références bibliographiques citées dans le chapitre 3 :

- [1] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61. 4869. (1987) .
- [2] K. Ichino, Y.-H.Wu, Y. Kawakami, S. Fujita, S. Fujita, J. Crystal Growth 117 (1992)
- [3] S.Adachi, « Properties of Groups IV, III-V, and II-VI Semiconductors », Wiley, Chichester,(2005).
- [4] MEZRAG, F. Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider- Biskra, (2012).
- [5] F. Aymerich, Phys. Rev. B26, 1968 (1982).
- [6] N. Bouarissa, Microhardness and mechanical stability, (2019).
- [7] H.Algarni.N.Bouarissa,M.Ajmal khan,O.A Al-Hagan.,T.F .Alhuwayme,(2019).
- [8] S. Bounab, Thèse de magister, Univ. de Constantine, Algeria, (2002).
- [9] S. Saib, Etude par les méthodes du premier principe des propriétés structurales,électroniques et vibrationnelles des semi-conducteurs à base de nitrogène, Thèse doctorat,Université Badji Mokhtar-Annaba, 2008.
- [10] Mohamed, W. Kara, F. Mezrag, and N. Bouarissa. "Energy gaps and carrier effective masses of quasi-binary (GaP) $1-x$ (ZnSe) x crystals." Superlattices and Microstructures 47.2 .341-348. (2010).
- [11] S. Adachi, Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors, John Wiley & Sons (2009).
- [12] N.Baghdadli, these de magister, Univ. Abou-Bakr Belkaid, Tlemcen (2010).
- [13] Adachi, Sadao. "Optical properties, properties of group-IV, III-V and II-VI semiconductors." 211-281. (2005).
- [15] Fadila Mezrag et all . "Disorder effect upon energy band gaps and carrier effective masses of $Zn_xCd_{1-x}S$." The European Physical Journal Plus 136.7. 724. (2021).

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce travail a été réalisé dans le cadre de l'étude des propriétés électroniques, la masse effective et la densité de charge des alliages semiconducteurs $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ dans la phase zinc-blende. La méthode de pseudopotentiel empirique local (EPM) a été utilisée dans ce travail avec l'approximation de cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Nos résultats ont montré que pour les alliages semiconducteurs ternaires $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ tous les gaps d'énergie direct (E_{Γ}^{Γ}) et indirects (E_{Γ}^X) et (E_{Γ}^L) étudiés varient de façon non monotone et non linéaire avec la composition x allant de 0 à 1. Les alliages en question ainsi que les composés parents sont tous à gap direct. Nos résultats des gaps d'énergie des alliages $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ sont en bon accord avec les résultats théoriques et que le désordre a un effet considérable sur les propriétés électroniques étudiées.

L'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ présente des propriétés intéressantes en termes de densité de charges électroniques et de masse effective. La densité de charges électroniques fait référence à la quantité d'électrons disponibles pour le transport de courant dans le matériau. Dans le cas de l'alliage ternaire, la densité de charges électroniques dépendra de la composition x , qui représente la fraction de soufre (S) dans le matériau.

Lorsque x augmente, c'est-à-dire lorsque la fraction de soufre dans l'alliage augmente, la densité de charges électroniques tend également à augmenter. Cela est dû au fait que les atomes de soufre introduisent des niveaux d'énergie supplémentaires dans la bande interdite de l'alliage, créant ainsi plus d'électrons disponibles pour le transport de courant.

Quant à la masse effective, elle décrit la mobilité des électrons dans le matériau. Une masse effective plus faible signifie que les électrons peuvent se déplacer plus facilement, ce qui se traduit par une meilleure conductivité. Dans l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$, la masse effective des électrons peut être modulée en ajustant la composition x .

En général, une augmentation de la fraction de soufre (x) dans l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ entraîne une augmentation de la densité de charges électroniques et peut également avoir un effet sur la masse effective des électrons. Cela peut avoir des implications importantes pour les applications électroniques et optoélectroniques de ces matériaux, notamment dans les domaines tels que les cellules solaires, les diodes électroluminescentes et les capteurs. Cependant, il convient de noter que d'autres facteurs, tels que la structure cristalline et les interactions entre les atomes, peuvent également influencer les propriétés électroniques de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$.

La comparaison de nos résultats concernant les composés parents CdS et CdTe et l'alliage $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$ avec les résultats théoriques et expérimentaux montre, en générale, un bon accord, ce qui confirme la fiabilité de notre méthode utilisée.

Les perspectives futures de l'étude des propriétés électroniques, de la masse effective et de la densité de charge sont prometteuses et offrent de nombreuses possibilités pour l'optimisation des matériaux, la conception de dispositifs, le développement de matériaux quantiques et l'avancement des connaissances dans divers domaines de la physique des matériaux.

Liste des figures

N°	Titre	Page
Figure. 1.1	Structure de Bandes d'énergie pour les isolants, les semiconducteurs et les conducteurs	4
Figure. 1.2	Structure de Bande d'un semiconducteur à gap directe	6
Figure. 1.3	Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs	7
Figure. 1.4	Gaps direct et indirect des semiconducteurs Si et GaAs	8
Figure. 1.5	Structure cristalline Diamant et Zinc Blende	8
Figure. 2.1	Profil de la densité de charges électroniques de valence, le long de l'axe [111] passant par deux atomes proches voisins : cas de Ge, GaAs, ZnSe.	20
Figure. 2.2	Trous lourds et trous légers	22
Figure.3.1	L'Algorithme du calcul de l'EPM	30
Figure.3.2	La structure de bandes électronique de l'alliage pour $x=0$ (CdTe)	33
Figure.3.3	La structure de bandes électroniques de l'alliage pour $x=1$ (CdS)	33
Figure 3.4	La structure de bandes électronique de l'alliage pour $x=0.3$ a avec et sans Désordre	34
Figure 3.5	Gap d'énergie direct en fonction de la concentration x del'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec et sans désordre compositionnel	36
Figure 3.6	Gaps d'énergie indirect en fonction de la concentration x del'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} avec et sans désordre compositionnel	37

Figure 3.7	Gap d'énergie indirect L EF en fonction de la concentration x del'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} avec et sans désordre compositionnel.	38
Figure 3.8	Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x del'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} sans désordre compositionnel.	39
Figure 3.9	Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x del'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} avec désordre compositionnel.	40
Figure 3.10	Densité de charge électronique au point de la somme des quatre bandes de valence selon la direction [111] de l'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} pour x= 0	41
Figure 3.11	Densité de charge électronique au point de la bande de conduction selon la direction [111] de l'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} pour x = 0	42
Figure 3.12	Densité de charge électronique au point de la bande de conduction selon la direction [111] de l'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} pour x = 1	43
Figure 3.13	Densité de charge électronique au point de la somme des quatre bandes de valence selon la direction [111] de l'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} pour x= 1	44
Figure 3.14	Densité de charge électronique au point de la bande de conduction selon la direction [111] de l'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} avec et sans désordre pour x = 0. 3	45
Figure 3.15	Variation de la masse effective de l'électron pour l'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} avec désordre fonction de la composition x.	47
Figure 3.16	Variation de la masse effective des trous pour l'alliage ternaire CdS _x Te _{1-x} avec désordre fonction de la composition x.	48

Liste des tableaux

N°	Titre	Page
Tableau 1.1	Les groupes des composés semiconducteurs	5
Tableau 1.2	Systèmes des matériaux avec leurs applications optoélectroniques importantes	11
Tableau 2.1	Masses effectives des électrons et des trous aux extrémités des bandes	24
Tableau 3.1	Les facteurs de formes symétriques (VS) et antisymétriques (VA) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs CdS et CdTe dans la phase zinc-blende ainsi que les constantes du réseau a en (u.a)	31
Tableau 3.2	Gaps énergétiques des composés zinc-blende CdS et CdTe	32
Tableau 3.3	Les variations des gaps énergétique de l'alliage CdS_xTe_{1-x} fonction de quelques concentrations x avec et sans tenir compte du désordre compositionnel	35
Tableau 3.4	Calculs de la masse effective des trous et des électrons pour quelques concentrations de l'alliage CdS_xTe_{1-x}	46

ملخص

قمنا باستخدام نهج الإمكانيات الزائفة التجريبية مع التقريب البلوري الافتراضي (VCA) لدراسة الخصائص الإلكترونية (هيكل الشريطة وفجوة الطاقة)، الكتلة الفعالة وكثافة الشحنة الإلكترونية لسبائك نصف موصلية CdS_xTe_{1-x} في تركيب Zinc-blende لتتركيز يتراوح بين 0 و 1، بمراعاة أو عدم مراعاة تأثيرات اضطراب التركيب. تحمل هذه السبائك تداعيات هامة على تصميم الأجهزة الضوئية. تشير نتائجنا إلى أن جميع الخصائص المهمة تتغير بناءً على تركيز التركيبي له تأثير هام. سيسمح لنا ذلك باستخدام مواد جديدة مرغوب فيها x وأن الاضطراب

Résumé

La méthode empirique de pseudopotentiel avec l'approximation de cristal virtuel (VCA) ont été utilisés pour étudier les propriétés électroniques (structure de bande et gap d'énergie), masse effective et la densité de charge électronique de l'alliage Semiconducteur CdS_xTe_{1-x} dans la structure et Zinc-blende pour une Concentration allant de 0 à 1, avec et sans tenir compte des effets des perturbations de composition. Ces alliages ont des implications importantes pour la conception des appareils photo-électrique. Nos résultats montrent que toutes les propriétés d'intérêt varient en fonction de la concentration x et que le désordre compositionnel a un effet important Cela nous permettra d'utiliser de nouveaux matériaux souhaités.

Abstract

The empirical pseudopotential method with the virtual crystal approximation (VCA) was used to investigate the electronic properties (band structure and energy gap), effective mass, and electronic charge density of the semiconductor alloy CdS_xTe_{1-x} in the Zinc-blende structure for concentrations ranging from 0 to 1, with and without considering the effects of compositional disturbances. These alloys have significant implications for the design of photoelectronic devices. Our results show that all the properties of interest vary with the concentration x and that compositional disorder has a significant effect. This will enable us to utilize desired new materials.