



N° d'ordre :

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Boudiaf - M'sila

Faculté des Sciences

Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique Appliquée: Physique des matériaux intelligents**

Par

AMROUNE Latifa

THEME

**Effet de la pression sur les propriétés électroniques
et optiques du composé semiconducteur InAs**

Soutenue le : 04/06/2016

Devant le jury composé de :

N.BOUARISSA

Prof Univ. de M'sila

Président

F. MEZRAG

MCB Univ. de M'sila

Rapporteur

S.SAIB

Prof Univ. de M'sila

Examineur

Promotion Juin 2016

REMERCIEMENTS

Nous tenons à remercier tout premièrement ALLAH le tout puissant pour la volonté, la santé et la patience , qu'il nous a donné durant toutes ces longues années .

Ainsi, nous tenons également à exprimer nos vifs remerciements à notre encadreur Mme Mezrag Fadila pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet et pour les précieux conseils qu'elle m'a donné, et pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs .

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

Nos remerciements vont aussi à tous les enseignants et le chef de département de physique aussi tout la famille du département.

Également, un remerciement à tout nos collègues de promotion 2016 pour les bons moments qui nous avons passé ensemble.

Dédicace

Je dédie ce travail à mes chers parents, qu'ils trouvent ici le témoignage de ma profonde gratitude pour leur amour, leur encourage et leur soutien tout au long de mes études, que ALLAH les bénisse.

*A mes chers soeurs (HAFIDA, WAHIBA, ASMA)
et mes chers frères NABIL*

*et surtout à mon frère Abd EL MALEK;
présent dans tous mes moments d'examens par son soutien moral et ses belles surprises sucrées je te souhaite un avenir plein de joie, de réussite et de bonheur.*

*A tous mes sympathiques amies
(HANAN, HADA, ASSIA, KARIMA, MORDJANA)
et mille pardon pour ceux que j'ai oubliés.*

A tous mes chères amies.

A tous mes collègues de promotion 2016.

A tous ceux que j'aime.

A tous ceux qui m'aiment.

Tables des matières

Remerciement.....	I
Dédicace.....	II
Tables des matières.....	III
Introduction Général.....	1
Chapitre I : méthodes de calcul de la structure de bandes électronique des semi conducteur	
I-1) Introduction.....	3
I-2) L'équation de Schrödinger.....	3
I-3) L'hamiltonien total du cristal.....	4
I-4) L'approximation adiabatique.....	4
I-5) L'approximation de Hartree-fock.....	5
I-6) Les méthodes de calcul de la structure de bande électronique.....	6
I-6-1) La méthode de liaison fortes.....	6
I-6-2) La méthode cellulaire.....	6
I-6-3) La méthode de ondes plans.....	7
I-6-4) La méthode des ondes planes augmentée(A.P.W).....	8
I-6-5) La méthode des ondes planes orthogonaliteés(O.P.W).....	8
I-6-6) La méthode de pseudopotentiel (P.M)	9
I-6-6-1) L'hypothèse de base.....	10
I-6-6-2) Le formalisme mathématique du pseudopotentiel.....	10
I-6-6-3) Les modèles des pseudopotentiels	12

I-6-6-3-1) Le modèle local.....	12
I-6-6-3-1-1) Le modèle de Heine-abarenkov.....	12
I-6-6-3-1-2) Le modèle d'Ashcroft.....	12
I-6-6-3-2) Le modèle non local.....	13
I-6-6-3-2-1) La fonction de Heine Abterenkov.....	13
I-6-6-3-2-2) Le modèle de Gauss.....	14
I-7) La méthode empirique des pseudopotentiels (EPM).....	15
I-7-1) L'approximation empirique local.....	15
I-8) Conclusion.....	17

Chapitre II :effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques du composé semiconducteur InAs

II-1) Introduction.....	18
II-2) Définition d'un matériau semiconducteur.....	18
II-2-1) Notion de bandes d'énergie.....	19
II-2-2) Bande interdite (gap énergétique).....	19
II-2-3) La conduction électrique des électrons et des trous.....	21
II-2-4) Semiconducteur intrinsèque.....	22
II-2-5) Les semiconducteurs extrinsèques.....	23
II-2-5-1) Les semiconducteurs extrinsèques dopés N.....	23
II-2-5-2) Les semiconducteurs extrinsèques dopés P.....	23
II-3) Définition des semiconducteurs binaires.....	25
II-4) Propriétés structurales.....	25
II-4-1) Structure Zinc Blende.....	26
II-4-2) La constante de maille.....	27

II-5) Propriétés électroniques.....	28
II-5-1) Structure de bande d'énergie électronique.....	28
II-6) Les propriétés optiques.....	29
II-6-1) L'interaction rayonnement matière.....	30
II-6-2) La réflexion des ondes plane.....	30
II-6-3) L'indice de réfraction.....	31
II-6-4) La constant diélectrique.....	31
II-6-5) La relation entre l'indice de réfraction avec le constante diélectrique.....	33
II-7) Effet de la pression semi-conducteur.....	33
II-7-1) Définition la pression	33
II-7-2) L'effet de la pression sur la géométrie de la structure.....	34
II-7-3) L'effet de la pression sur les niveaux électroniques.....	34
II-7-4) Effet de la pression semiconducteur.....	35
II-7-5) La technologie de haut pression.....	35
II-8) Conclusion.....	36

Chapitre III :Résultats et discussions

III-1) Introduction.....	37
III-2) Étude des propriétés électronique.....	37
III-2-1) Structure de bandes électroniques.....	37
III-2-2) Le gap d'énergie.....	39
III-3) Étude des propriétés optiques.....	42
III-3-1) L'indice de réfraction du composé binaire InA.....	42
III-3-1-1) Modèle de Moss.....	44

III-3-1-2) Modèle de Ravindra.....	45
III-3-1-3) Modèle de Ravidra et Gupta.....	46
III-3-1-4) Modèle de Hervé et Vandamme	46
III-3-1-5) Modèle de Reddy et Anjaneyulu.....	47
III-4) Étude des propriétés diélectriques.....	48
III-4-1) La constante diélectrique de haute fréquence ε_{∞}	48
III-4-2) La constante diélectrique statique ε_0	50
III-4) Conclusion.....	53
IV) Conclusion Générale.....	54
Références bibliographiques.....	57

Listes des figures et Listes des tableaux

Résumé

Introduction générale

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont source d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs.

Principalement remarquables par leurs propriétés électronique, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques . [1]

Parmi les semi-conducteurs eux-mêmes, les composés formés des éléments III-V de la classification de Mendeleïev qui ont des propriétés physiques remarquables entrant dans la plupart des composants de télécommunication. Par ailleurs les semi-conducteur III-VI ont longtemps constitué le prototype de matériaux radiatifs, grâce à leur grande énergie du gap, conduisant à l'émission de photons situés dans le spectre visible. [2]

Du coté théorique, les méthodes de calcul de la structure électronique peuvent fournir des données complémentaires importantes au travail expérimental. Les calculs du premier principe, basé sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT), ont fait preuve dans plusieurs cas de leur utilité, pour comprendre la stabilité et transition de phase structurale des composés semiconducteur en calculant l'énergie totale.[3,4]

Les calculs des propriétés électroniques sont principalement basés sur la méthode empirique pseudopotentiel (EPM), alors que les propriétés optiques et diélectrique sont basées sur l'utilisation des formules empiriques, en combinant la méthode du pseudopotentiel au modèle de Harrison. [2]

Le travail présenté porte sur l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé semi-conducteur InAs. Notre étude utilise la méthode du pseudopotentiel empirique local.

Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électronique, diélectrique et optique des solides.

Pour pouvoir expliquer les propriétés du composé InAs nous avons, après avoir résolu l'équation de Schrödinger, déterminé les énergies et les fonctions d'onde.[5]

Les valeurs des énergies ont été utilisées pour la détermination de la structure de bandes des composés semi-conducteurs ainsi que les propriétés diélectriques, optiques et électroniques.

Ce mémoire comprend trois chapitres, après une introduction générale, Le premier chapitre sera consacré aux méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques, où une attention particulière sera accordée à la méthode du pseudopotentiel empirique utilisée dans nos calculs, le deuxième chapitre englobe un rappel sur l'effet de la pression sur les propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé semi-conducteur InAs.

Nous présentons dans le troisième et dernier chapitre les résultats obtenus dans notre étude.

Enfin, notre travail est achevé par une conclusion générale.

Chapitre I : Méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques des semiconducteurs

I-1) Introduction

La description d'un matériau sous entend connaître ses propriétés électroniques, structurales, optiques....etc. qui reflètent les interactions entre les particules qui le constituent (électrons et noyaux). La mécanique classique a échoué pour répondre alors la mécanique quantique prend la relève. Celle ci est basée essentiellement sur la résolution de l'équation de Schrödinger qui décrit fidèlement l'état stationnaire des électrons et des noyaux atomiques du matériau. La résolution de cet équation s'avère difficile par manque d'une expression analytique du potentiel du cristal, ceci complique énormément le calcul de la structure de bandes. On se trouve forcé de faire des approximations pour la recherche des solutions en utilisant bien sur ces dernières années, la puissance remarquable de l'outil informatique.[6]

I-2) L'équation de Schrödinger

Les formulations abstraites de Dirac ont donné un cadre précis à la mécanique ondulatoire de Schrödinger. Le problème se résume dans la description du mouvement de particule dans l'espace dont la base est l'ensemble des états de position qui dépend d'une fonction scalaire que Schrödinger appelé fonction d'onde. Schrödinger s'est aperçu qu'il était possible de passer du formalisme particulaire au formalisme ondulatoire en remplaçant les coordonnées Hamiltoniennes du premier formalisme par des opérateurs différentiels. ce qui aboutit à sa célèbre équation.

$$H\psi(R, r) = E\psi(R, r) \quad (I-2)$$

Où : R les coordonnées des noyaux, r celles électrons, E l'énergie totale du système et $\Psi(R, r)$ la fonction d'onde du système. [7]

En s'inspirant des travaux de Planck et de Broglie, Schrödinger parvient alors à exprimer : l'Hamiltonien H du système considéré.[8]

I-3) L'Hamiltonien du cristal

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

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (\text{I-2})$$

T_e l'énergie cinétique des électrons ,

T_n l'énergie cinétique des noyaux ,

V_{ee} l'énergie de répulsion électron-électron ,

V_{en} l'énergie d'attraction électrons-noyau ,

V_{nn} l'énergie de répulsion noyau – électrons.

La résolution de l'équation (I-1) avec cet Hamiltonien total du cristal ne se fait qu'avec certaines approximations.[8]

I-4) L'approximation adiabatique

L'approximation de Born-Oppenheimer dite adiabatique est la première des approximations utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger pour les systèmes complexes contenant plus d'un ou deux électrons, elle sépare le mouvement des électrons et des noyaux en se basant sur la différence de masse entre les noyaux atomiques et les électrons $M_n \gg m_e$, elle conduit donc à la séparation du l'Hamiltonien total en une partie électronique et une partie nucléaire reliée aux noyaux, ces derniers sont considérés fixes., les états propres du système sont alors caractérisés par des fonctions d'onde produites d'une fonction d'onde électronique par un fonction d'onde nucléaire

$$\Psi(R, r) = \Psi_n(R) \Psi_e(R, r) \quad (\text{I-3})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$[T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn}] \Psi_n(R) \Psi_e(R, r) = E \Psi_n(R) \Psi_e(R, r) \quad (\text{I-4})$$

et ce ramène aux deux équations interdépendantes

$$[T_e + V_{ee} + V_{en} + \psi(R, r) = E_e(R)\psi_e(R, r) \quad (I-5)$$

$$[T_n + V_{nn} + V_{en} + E_e(R) = E_e(R)\psi_n(R) \quad (I-6)$$

Pour les états d'énergie électroniques du cristal on n'utilise que l'équation (I-5) les noyaux étant supposés fixes à leur position d'équilibre.

Mais cette équation traduit l'évolution d'un système à n corps et demeure un problème très difficile encore à résoudre. Pour simplifier ce problème on se place dans l'approximation à un électron dite l'approximation de Hartree-Fock. [6]

I-5) L'approximation de Hartree-fock :

Cette approximation proposée par Hartree-Fock consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment dans un champ noyau créé par les autres électrons et noyaux.

L'Hamiltonien peut être écrit comme une somme des Hamiltoniens décrivant un seul électron.

$$H = \sum_i H_i \quad (I-7)$$

Avec

$$H_i = \frac{p^2}{2m} + V(R) \quad (I-8)$$

Où $V(R)$ possède la périodicité du réseau.

L'équation générale du solide s'écrit alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E(k) \psi(r) \quad (I-9)$$

$\psi(r)$: représente la fonction d'onde propre du système.

$E(k)$: Energie propre du système.

Un des problèmes majeurs dans le calcul de la structure de bande est la détermination du potentiel du cristal $V(r)$, pour résoudre le problème de mouvement de l'électron dans un champ périodique, on peut faire appel à la théorie des électrons presque libres (N.F.E.M) et celle des électrons fortement liés.[6]

I-6) Les méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques

I-6-1) La méthode des liaisons fortes

Dans cette méthode, les niveaux d'énergie, les fonctions d'ondes associées ainsi que le potentiel du cristal est de nature atomique. [9] On considère le nuage électronique d'un nœud quelconque du réseau, L'Hamiltonien du système est périodique et égal à L'Hamiltonien de l'atome comme suit :

$$H = H_a = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_a(r) \quad (\text{I-10})$$

Où $V_a(r)$: est l'énergie potentielle de l'électron lié à l'atome considéré. Ainsi l'équation de Schrödinger peut être résout en remplaçant H par H_a comme suit :

$$H_a \psi_a(r) = E_a \psi_a(r) \quad (\text{I-11})$$

La méthode des liaisons fortes à l'avantage que la structure de bande peut être définie en terme d'un petit nombre de paramètres d'interaction, ces derniers ayant une simple interprétation physique en tant qu'interaction entre les électrons d'atomes voisins.[8]

I-6-2) La méthode cellulaire

C'est la première tentative de calcul de la structure de bande, introduite par Wigner et Seitz, qui déduit que la relation de Bloch.

$$\psi(r + R) = \exp(ik \cdot R) \psi(r) \quad (\text{I-12})$$

est une bonne solution de l'équation de Schrödinger à l'intérieur d'une cellule unitaire et qu'elle peut être déterminée dans n'importe quelle autre cellule primitive, en respectant les conditions de Bloch suivantes :

$$\psi(r) = \exp(-ik \cdot R) \psi(r + R) \quad (\text{I-13})$$

$$n(r) \psi(r) = -\exp(-ik \cdot R) n(r + R) \nabla \psi(r + R) \quad (\text{I-14})$$

Avec r et $r + R$ appartient à la surface de la même cellule.

La première approximation dans cette méthode est de remplacer le potentiel $V(r)$ de la cellule unitaire par un potentiel sphérique $U(r)$ et de le choisir comme potentiel d'un seul ion, à l'origine en ignorant la contribution des ions voisins.

La solution complète de l'équation de Schrödinger peut avoir la forme suivante:

$$\psi_{lm}(r) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (I-15)$$

Où $Y_{lm}(\theta, \varphi)$: Sont les harmoniques sphériques et $\chi_l(r)$ les fonctions radiales qui satisfont l'équation de Schrödinger :

$$\chi_l''(r) + \frac{2}{r} \chi_l'(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l(r) = 0 \quad (I-16)$$

Donc n'importe quelle combinaison linéaire de $\psi_{lm}(r)$ est aussi solution de l'équation de Schrödinger.

$$\psi(r) = \sum_{lm} A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (I-17)$$

Les conditions aux limites donnent un système d'équation en A_{lm} qui sert à calculer l'énergie E en annulant le déterminant du système. De cette façon on détermine le spectre $E(k)$ pour k fixé.[10]

I-6-3) La méthode de ondes planes

Dans cette approche, le potentiel du cristal $V(r)$ est considéré comme un potentiel périodique qu' on peut écrire sous la forme de série de Fourier.

$$V(r) = \sum_G V(G) \exp(iGr) \quad (I-18)$$

Dans Ce cas la fonction d'onde est aussi périodique qui doit satisfaire la condition de Bloch:

$$\psi(r) = \sum_k V(k) \exp(ikr) \quad (I-19)$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r)\psi(r) = E(k)\psi(r) \quad (I-20)$$

En reportant les développements des équations (I-18) et (I-19) dans (I-20) , avec une multiplication par le terme $\exp(iKr)$ Intégrant par la suite sur dr^3 , on déduit finalement le système d'équation pour les coefficients $C(k')$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} C(k') k'^2 + \sum_G C(k' - G) V(G) = E(k) C(k) \quad (I-21)$$

Une fois les coefficients $V(G)$ et $V(r)$ sont connus, les énergies $E(k)$ seront calculées à partir du système d'équations en $C(k')$. [11]

I-6-4) La méthode des ondes planes augmentées (A.P.W)

Cette méthode a été imaginée pour pallier au problème condition aux limites inhérentes à la méthode cellulaire. Le potentiel cristallin est supposé sphérique à l'intérieur d'une sphère de rayon r_s entourant les atomes et constant à l'intérieur de ces sphères.

$$V(r) = \begin{cases} V(r-R) & |r-R| < r_0 \quad \text{Région du cœur} \\ 0 & |r-R| > r_0 \quad \text{Région interstitielle} \end{cases} \quad (I-22)$$

Les fonctions d'onde sont développées en ondes sphériques dans les régions où le potentiel est de type atomique et en ondes planes dans les régions où le potentiel est constant. Les fonctions d'onde sont appelées ondes planes augmentées elles sont continues en $r = r_s$ et ne présentent de se fait aucun problème de condition aux limites. [5]

I-6-5) La méthode des ondes planes orthogonalisés (O.P.W)

Cette méthode a été proposée par Herring en supposant que , dans un solide la fonction d'onde d'un électron de conduction était presque plane dans la région interatomique mais vu les oscillations rapides de la région du cœur, il est donc souhaitable qu' au voisinage du noyau d'utiliser des fonction d'ondes atomique $\psi_r^c(r)$ d'ou' le nom d'ondes planes orthogonalisés satisfaisant aux conditions de Block et sont définies ainsi par :

$$\psi_k(r) = \exp(iK.r) + \sum_c b_c \Phi_k^c(r) \quad (I-23)$$

C : définie le cœur , la sommation étant sur tous les niveaux du cœur.

$\Phi_k^c(r)$: est une fonction atomique.

b_c : une constante calculée par l'orthogonalité $\psi_k(r)$ avec chaque niveau du cœur.

$$\int dr \Phi_k^c(r) \psi_k(r) = 0 \quad (\text{I-24})$$

Il l'en résulte qu'on peut écrire :

$$b_c = - \int dr \Phi_k^c(r) \exp(iK \cdot r) \quad (\text{I-25})$$

En s'attend nécessairement à ce que l'on ait toujours pour la résolution l'équation de Schrödinger, une solution qui est une combinaison linéaire d'ondes planes orthogonalisées de la forme :

$$\psi(r) = \sum C_k \psi_k(r) \quad (\text{I-26})$$

Les coefficients C_k sont calculés à partir des conditions de Bloch alors que les énergies E_k sont obtenues en utilisant la méthode variationnelle.[12]

En résumé. La technique a été adoptée avec succès dans l'étude des semi conducteurs du type (IV-IV) et (III-V), par ailleurs, l'inconvénient de cette méthode réside dans le fait qu'il est vraiment nécessaire, pour résoudre un tel système, de séparer les états du cœur des états de valence et de conduction.[2]

I-6-6) La méthode de pseudopotentiel (P.M)

La méthode du pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies $E_n(k)$ et d'autres propriétés des semi conducteurs, la vertu majeure de cette approche est seulement les électrons de valence qui sont considérés.

Autrement dit, les électrons du cœur sont supposés gelés dans la configuration atomique et les électrons de valence se meuvent dans un potentiel périodique d'un seul électron.

Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode N.F.E.M pour résoudre l'équation de Schrödinger.[13] L'explication se repose également, sur une hypothèse importante qui utilise les propriétés d'orthogonalités des états de valence et de conduction avec les états du cœur, il faut dire que, dans ce contexte cette approche est similaire à la méthode des ondes planes orthogonalisées(O.P.W).

Toutefois, L'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel. Néanmoins, l'effet d'orthogonalité aux états du

cœur revient à extraire du potentiel cristallin, la contribution rapidement variable de la région du cœur, le pseudopotentiel V_p est alors lentement variable, se qui autorise à envisager un traitement du problème en terme de perturbation.[14]

I-6-6-1) L'hypothèse de base

Une distinction entre le états des couches profondes associées aux électrons liés et ceux de la bande de conduction (électrons libres) doit se faire et dans ce cas, on distingue essentiellement deux types de particules, les ions et les électrons, possédant tous les deux les mêmes énergies. Pour la résolution de l'équation de Schrödinger, la théorie des perturbations est appliquée vu que le pseudopotentiel évoqué est considéré comme faible.[8]

I-6-6-2) Le formalisme mathématique du pseudopotentiel

Dans la méthode OPW, la fonction ψ est donnée par la somme des ondes planes et des états atomiques occupés du cœur et Φ_K^C des états atomiques occupés du cœur, et Φ_K^C s'écrit comme suit:[15]

$$\psi_k = \Phi_K^V + \sum_C b_C \Phi_K^C \quad (I-27)$$

Sachant que ψ_k est orthogonale aux états du cœur Φ_C alors:

$$\langle \Phi_K^C | \psi_k \rangle = 0 \quad (I-28)$$

Donc on peut récrire la formule comme suit:

$$\psi_k = \Phi_K^V - \sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \quad (I-29)$$

En plus ψ_k vérifie l'équation de Schrödinger $H\psi_k - E_k\psi_k$, alors on peut écrire:

$$H\Phi_K^V - H\sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_k\psi_k \quad (I-30)$$

Sachant, en plus, que Φ_K^C vérifie aussi l'équation de Schrödinger.

$H\Phi_K^C = E_K^C\Phi_K^C$ alors l'équation (I-29) devient comme suit:

$$H\Phi_K^V - E_K\sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_k\psi_k \quad (I-31)$$

$$= E_K \left[\Phi_K^V + \sum_C - \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \right] \Phi_K^C \quad (\text{I-32})$$

$$H \Phi_K^V + \sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \Phi_K^V \quad (\text{I-33})$$

D'où l'on peut déduire la formule suivante

Avec:

$$\sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = V_R \Phi_K^V \quad (\text{I-34})$$

Alors l'équation (I-32) s'écrit comme suit:

$$H \Phi_K^V + V_R \Phi_K^V = E_K \Phi_K^V \quad (\text{I-35})$$

$$(H + V_R) \Phi_K^V = E_K \Phi_K^V \quad (\text{I-36})$$

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V_C + V_R \right) \Phi_K^V = E_K \Phi_K^V \quad (\text{I-37})$$

Avec: $V_P = V_C + V_R$ qui est le pseudopotentiel considéré comme faible.

Ou V_C représentant le potentiel attractif du cœur (-) V_R représentant le potentiel répulsif (+)

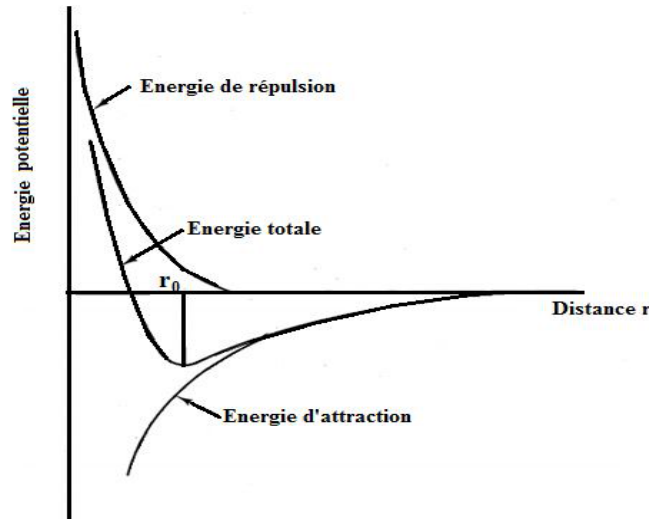


Figure I-1) Le potentiel d'interactions entre deux atomes en fonction de la distance r.

Pour la résolution de l'équation de Schrödinger, on va considérer le pseudopotentiel comme perturbation.[8]

I-6-6-3) Les modèles des pseudopotentiels

I-6-6-3-1) Le modèle local

L'Hamiltonien d'un électron dans un cristal est pris comme la somme de son énergie cinétique et son potentiel dépendant de sa position comme suit :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad (\text{I-38})$$

Dans le cas du modèle local, le potentiel est pris comme suit:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ \frac{-Ze}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-39})$$

Où Z : est la valence atomique .

r_c : étant le rayon du cœur utilisé ajuster les données atomiques.[8]

I-6-6-3-1-1) Le modèle de Heine-abarenkov

Hein Abarenkov ont considéré que le potentiel du cœur vaut A une constante pour avoir plus de flexibilité dans le paramétrage des données et $V(r)$ sera comme suit :[16]

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-40})$$

I-6-6-3-1-2) Le modèle d'Ashcroft

Ashcroft a supposé que le cœur est inoccupé et alors son potentiel sera nul, le potentiel complet de l'électron devient alors comme ce-ci :[17]

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-41})$$

I-6-6-3-2) Le modèle non local

Etant donné que le potentiel du cœur peut être non local, cette non localité est corrigée par la dépendance de ce potentiel en fonction de l'énergie sous forme de constantes différentes pour chaque état quantique et peut s'écrire comme suit :

$$V_P = V_{NL}(r, E) = \sum_l A_l(r, E) f_l(r) P_l \tag{I-42}$$

Où $A_l(r, E)$ est appelée énergie des états profonds, c'est la constante de la dépendance du potentiel en énergie des états du cœur.

et P_l : l'opérateur de projection de la l^{iem} composante des moments angulaires.

$f_r(r)$: est la fonction représentant l'effet de l'état du cœur possédant plusieurs formes telle que la forme Gaussienne, carré, et la forme de Ashcroft.[8]

I-6-6-3-2-1) La fonction de Heine Abterenkov

La fonction est une fenêtre d'amplitude unitaire et de durée r_c et peut être modélisée comme suit :

$$f_1(r) = \begin{cases} 1 & r < R_c \\ 0 & r \geq R_c \end{cases} \tag{I-43}$$

Avec R_c le rayon du cœur ionique.

Cette fonction toute simple exprime l'effet du cœur avec une certaine pondération unitaire.[16]

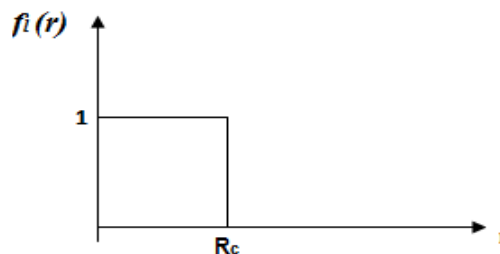


Figure I-2) La fonction de Heine-Aberenkov.

I-6-6-3-2-2) Le modèle de Gauss

Dans ce cas, l'effet du cœur est pris en compte sous forme gaussienne, comme suit

$$f_1 = \exp\left(-\frac{r^2}{R_c^2}\right) \quad (\text{I-44})$$

Et dont la représentation serait comme suit:[17]

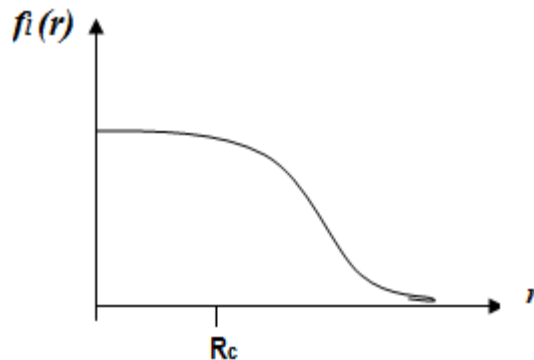


Figure I-3) La fonction de Gauss.

I-7) La méthode empirique des pseudopotentiels (l'EPM)

C'est une autre variante de la méthode des pseudopotentiels permettant de déterminer les paramètres entrant dans le calcul de la structure de bande électronique, en utilisant des données expérimentales [1]. On peut dire que cette technique a été appliquée avec succès aux semi-conducteurs de structure spécifique, diamant et zinc blende.

L'EPM a deux approximations importantes :

- L'approximation empirique locale.
- L'approximation empirique non locale.[2]

I-7-1) L'approximation empirique local

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 pseudopotentiel $V(G)$ que l'on imagine être une superposition linéaire des pseudopotentiels atomiques et peut être écrit comme suit:[18]

$$V_p(r) = \sum_{R, \tau} V_q(r - R - \tau) \quad (\text{I-45})$$

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 suivant :

$$V_p(r) = \sum_G S(G) V_q(G) \exp(iG \cdot r) \quad (\text{I-46})$$

$V_p(G)$: est le facteur de forme

$S(G)$: est le facteur de structure donné par [11] :

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iGr) \quad (\text{I-47})$$

N_a : étant le nombre d'atomes de base.

La pseudo fonction d'onde $\Psi_{n,k}(r)$ et les énergies $E_n(k)$ seront les solutions de l'équation :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_p(r) \right] \Psi_{n,k}(r) = E_n(k) \Psi_{n,k}(r) \quad (\text{I-48})$$

Où n représente l'indice de la bande.

$\Psi_{n,k}(r)$ sont des fonctions de Bloch.

Elles peuvent être développées en une série d'ondes planes. Cette technique du pseudopotentiel est pratiquement utilisée, car elle nécessite seulement un nombre réduit de facteurs de forme pour le calcul de la structure de bandes électroniques.

La procédure de calcul de l'E.P.M suit le diagramme ci-dessous. [2]

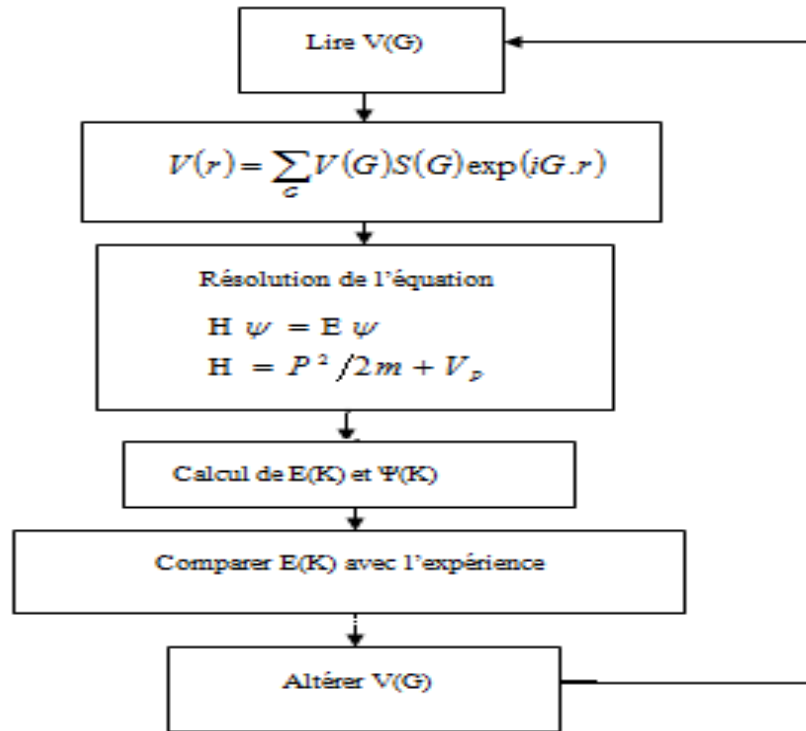


Figure I-4) L'Algorithme du calcul de l'EPM.

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 $\psi_{n,k}(r)$ 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 pseudopotential ont été développées pour le calcul de structures de bandes, notamment la méthode self-consistant qui utilise la fonction d'onde obtenue par L'EPM adoptée surtout pour le calcul des fonctions diélectriques et la méthode Ab-initio appelée aussi pseudopotential du premier principe, utilisée dans le calcul de l'énergie totale et les propriétés structurales des solides.[2]

I-8) Conclusion

Le choix de la méthode des pseudopotentiels empiriques (EPM) est basé essentiellement sur le fait d'obtenir les états de valence sans calculer pour autant les états du cœur qui ne sont pas nécessaires pour la description de propriétés physiques d'un système. Les états réels sont décrits par des pseudofonctions d'ondes planes minimisant ainsi les calculs numériques.[8]

Chapitre II : Effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques du composé semiconducteur InAs

II-1) Introduction

Malgré l'intense scientifique et les besoins de la technologie dans la nature des matériaux, leur comportement sous des conditions extrêmes a longtemps été un sujet d'intérêt capital. Durant les dernières années, l'étude des matériaux sous haute pression est devenue un sujet extrêmement important jouant un accroissement explosif, ceci est premièrement dû aux deux développements, théorique et expérimental qui ont facilité un tel travail. Expérimentalement, les études de la haute pression sont souvent confrontées à des difficultés pratiques qui substantiellement compliquent les mesures.[19] Ceci est dû au fait que la haute pression peut souvent être générée seulement dans des échantillons de volumes très petits avec un récipient qui peut affecter le signal. Le développement majeur envers ces difficultés est la DAC (Diamond Anvil Cell) dans laquelle la dureté du diamant est utilisée pour appliquer la pression et sa transparence pour faciliter le signal ; avec la DAC, il est possible d'accomplir un large rangé de mesures expérimentales à haute pression.[19]

II-2) Définition d'un matériau semiconducteur

Les semiconducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique, est intermédiaire entre celle des conducteurs ($10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et celle des isolants (10^{-22} à $10^{-14} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$), elle varie dans une grande proportion sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau). [20] Les caractéristiques physiques fondamentales des semiconducteurs se manifestent lorsque le matériau se trouve à l'état solide. Généralement les matériaux semiconducteurs sont des matériaux cristallins comme par exemple les éléments de la colonne IV du tableau de classification des éléments de Mendeleïev (Si, Ge) et les composés d'éléments des colonnes III-V et II-V et leurs alliages mais il ya des matériaux non cristallins qui ont des propriétés semiconductrices, ces matériaux sont promis à un avenir industriel tels que :

- Silicium amorphe,
- Polymères semiconducteurs,
- Verres semiconducteurs,
- Semiconducteurs organiques.[21]

II-2-1) Notion de bandes d'énergie

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

Dans ce modèle les énergies possibles pour un électron dans un solide forment ce qu'on appelle des bandes permises, séparées par d'autres bandes appelées bandes interdites ou gap Figure (II-1). Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

A des températures très basses ($T=0K^0$), les bandes de faible énergie sont complètement occupées ; ce sont des bandes dites de valence, par contre les bandes de haute énergie sont vides elles sont appelées bandes de conduction. [22]

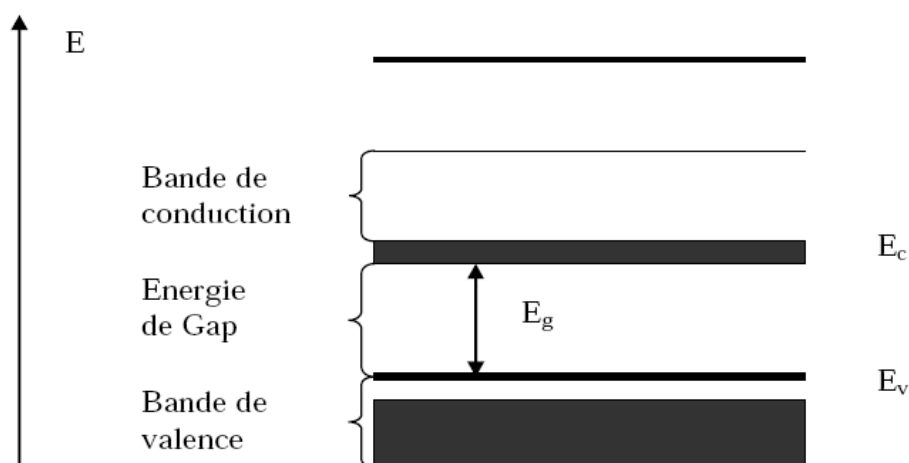


Figure II-1) Diagramme des bandes d'énergie des semiconducteurs. [23]

II-2-2) Bande interdite (gap énergétique)

Dans un semiconducteur comme dans un isolant, l'écart énergétique entre la bande de conduction et la bande de valence est appelé largeur de bande interdite (Energy band gap), ou tout simplement gap noté E_g , dans le quel, un porteur de charge ne peut se retrouver.

C'est un paramètre fondamental, déterminant les propriétés électroniques et optiques des semiconducteurs et évaluant ainsi, leur domaine d'application.

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction. Alors que pour les semiconducteurs, cette bande est suffisamment petite pour qu'une excitation adéquate, permette aux électrons de la bande de valence de rejoindre la bande de conduction, ainsi le

semiconducteur peut transporter de l'électricité et donc devenir conducteur. Par contre dans les métaux, on rencontre un chevauchement des bandes, les électrons peuvent passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circulent dans tout le solide. [24]

Une structure de bandes comparative des trois types de matériaux métal, semiconducteur et isolant est représentée sur la figure (II-2).

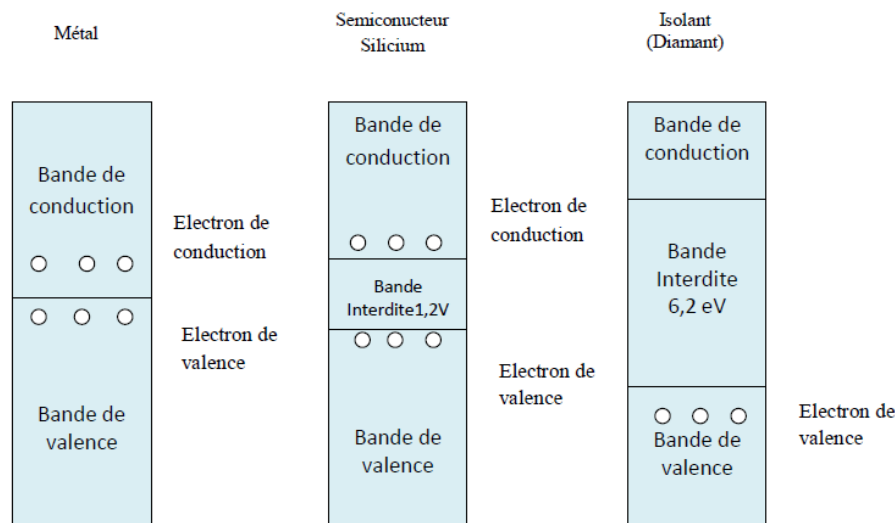


Figure II-2) Les structures des bandes énergétiques: Métal, semiconducteur, isolant.

II-2-2-1) Gap direct-Gap indirect

La structure de bande est la relation entre l'énergie de la particule et son vecteur K : $E(K)$. On représente l'évolution de l'énergie de l'électron par la courbe $E(k)$ en forçant le vecteur d'onde K à demeurer dans une direction remarquable de l'espace des K

Ce digramme permet de définir les extremas des bandes de conduction et de valence. Les structures de bandes représentées sur la figure (II-3) font apparaître deux type fondamentaux des semi-conducteurs.[20]

Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des K et les semi-conducteurs à gap direct pour lesquels les extremas sont situés au même point de l'espace des K , Cette distinction entre matériaux semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante, particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons.

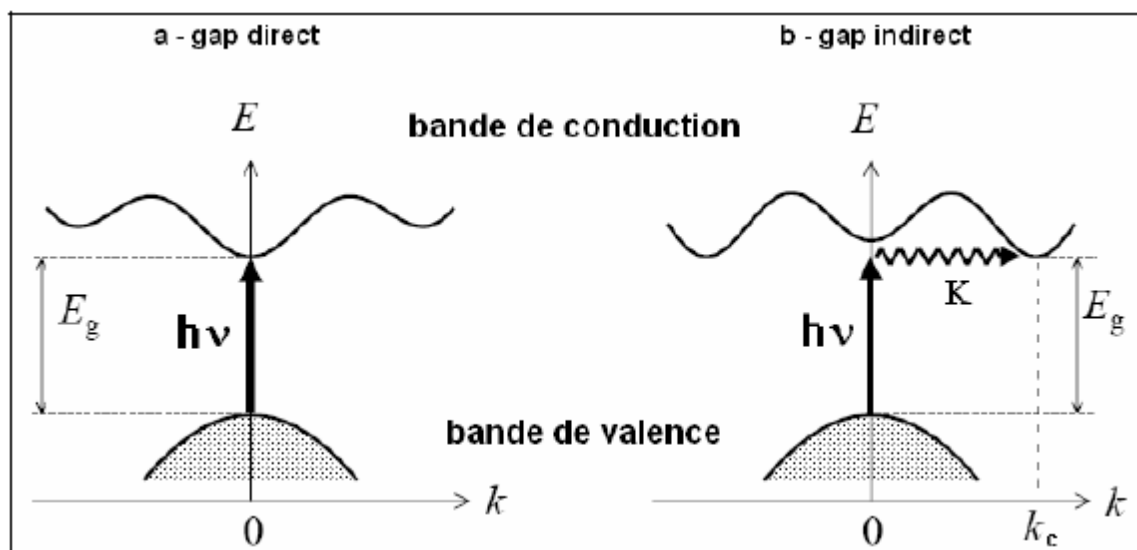


Figure II-3) Les transitions optiques directes et indirectes. [25]

II-2-3) La conduction électrique des électrons et des trous

On peut briser une liaison de valence si on fournit aux électrons de valence d'un semiconducteur une énergie suffisante, et créer ainsi des électrons mobiles, ces derniers peuvent passer de la bande de valence vers la bande de conduction, les états vacantes ainsi créés dans cette bande de valence, sont appelés trous, ils sont considérés comme des particules imaginaires.

Les physiciens supposent donc, que cette particule imaginaire (quasi particule) doit avoir une charge positive, le rôle important joué par ces particules et dû au fait, qu'elles réagissent comme des porteurs de charge mobiles.

Sous l'action d'un champ électrique ou magnétique, les électrons et les trous meuvent dans deux directions opposées .la neutralité du matériau impose que les trous et les électrons soient identiques.[2]

On peut dire que la conduction électrique dans un semiconducteur a pour origine :

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

La répartition de ces porteurs est donnée sur le schéma si dessous :

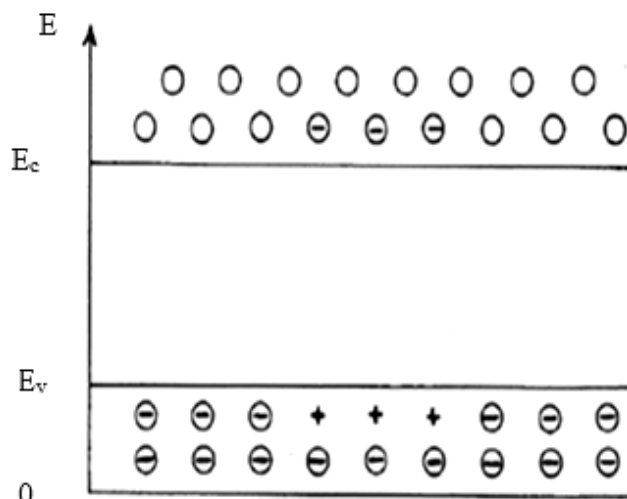


Figure II-4) Répartition des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de Valence à température

II-2-4) Semiconducteur intrinsèque

Un semiconducteur dit intrinsèque est un matériau idéal ne possédant ni défaut physique ni défaut chimique. Toutefois, un semiconducteur réel n'est jamais parfaitement intrinsèque, ces semiconducteurs ne conduisent pas ou très peu le courant sauf s'ils sont portés à haute température.[2]

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 Figure (II-5)

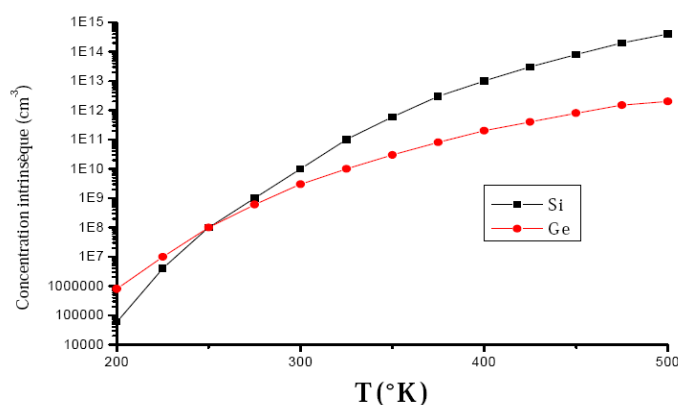


Figure II-5) Concentration intrinsèque du silicium et du germanium en fonction de la température.[21]

II-2-5) Les semiconducteurs extrinsèques

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage, lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques (diodes, transistors, etc...) et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, etc...).[8]

II-2-5-1) Les semiconducteurs extrinsèques dopés N

En introduisant des atomes pentavalents tels que le phosphore P, l'arsenic As (dopage N) dans un cristal, certaines liaisons se casent laissant place à ces extra atomes qui ont cinq électrons de valence, ce qui comble les liaisons en laissant un électron libre dans le cristal peu lié au noyau ($E \approx 0.01\text{eV}$) et passe aisément dans la bande de conduction. Les atomes pentavalents ou donneurs deviennent des ions positifs après le passage des électrons excédentaires dans la bande de conduction. [26] Ceci qui augmente considérablement la conductivité du matériau dopé. Les charges négatives (électrons) sont dits majoritaires, comme on peut le voir dans la figure suivante.

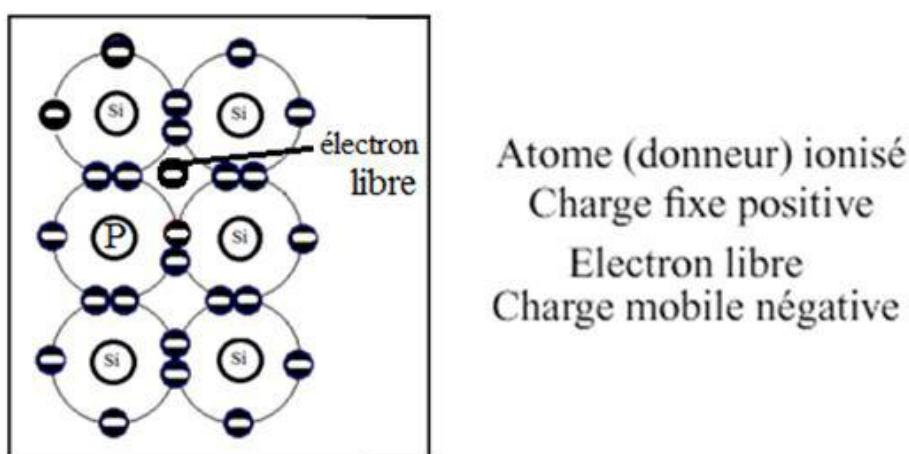


Figure II-6) Les semiconducteurs extrinsèques type N

II-2-5-1) Les semiconducteurs extrinsèques dopés P

Dans ce cas on introduit des atomes trivalents tels que gallium Ga, l'indium In, le bore B, l'aluminium Al. Il manque, alors, à l'impureté un électron de valence pour assurer les 4 liaisons avec les atomes de silicium voisins. Un faible apport d'énergie (0.05eV) suffit pour qu'un électron d'un silicium voisin soit capté par l'impureté : il y a formation d'un trou peu lié et donc mobile. Les atomes trivalents (accepteurs) deviennent des ions négatifs par capture d'un électron. Compte tenu des taux de dopage, ces trous sont beaucoup plus nombreux que les porteurs intrinsèques du cristal pur.

La conduction extrinsèque de type P (positive) augmente et est assurée par des trous, les trous deviennent majoritaires. la figure ci-dessous explique clairement le phénomène.[8]

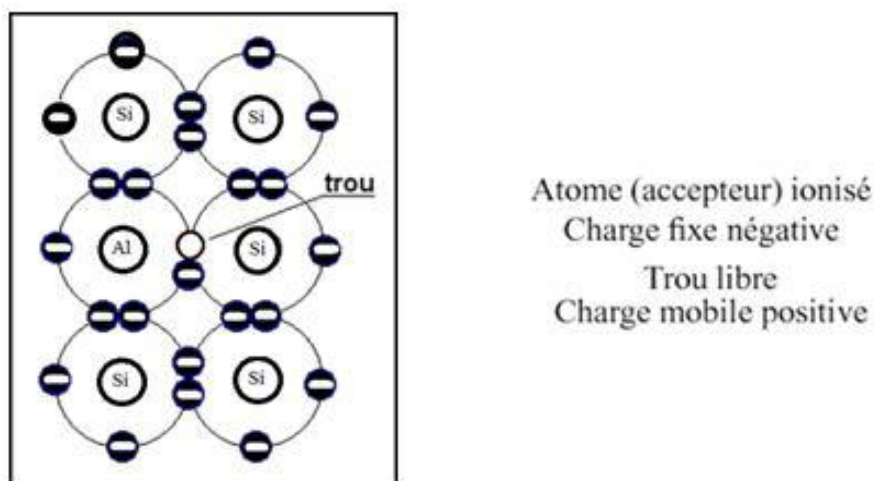


Figure II-7) Les semiconducteurs extrinsèques type P

La Figure (II-8) ci-dessus représente la position de niveau donneur et accepteur dans les semiconducteur de type N et de type P.

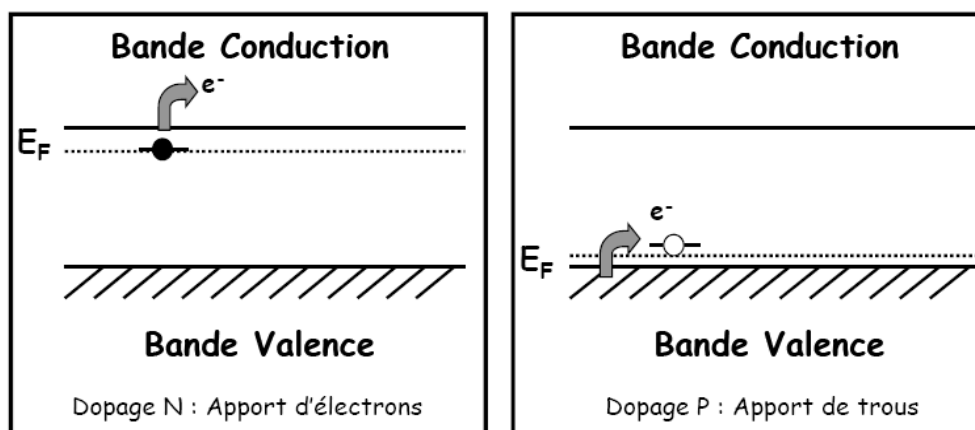


Figure II-8) Bandes d'énergie des semiconducteurs dopés (la position de niveau donneurs et accepteur dans les semiconducteurs de type N et de type P).[27]

II-3) Définition des semiconducteurs binaires

Les semiconducteurs binaires sont composés de deux atomes dont la somme des électrons de valence des deux atomes égale à huit.

Les semiconducteurs de composés binaires sont constitués de deux éléments inorganiques distincts et représentent une famille de matériaux très étendue. Ils peuvent être constitués de deux éléments de la même colonne IV (SiC et SiGe), d'éléments des colonnes III et V, (notés composés III-V tels que (GaAs, GaN, GaP) ou d'éléments des colonnes II et VI (composés II-VI, tels que (CaS, CaSe et SrS) ou encore des composés de type IV-VI comme (PbS et PbSe) et I-VII comme (CuCl). La liste complète des semiconducteurs II-VI et III-V et IV-IV peut être obtenue à partir de l'extrait du tableau de Mendeleïev suivant. [14]

Tableau II-1) Morceaux choisis du tableau périodique (en gras : éléments III, V, II et VI)

IA-B	IIA-B	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB
Li ³	Be ⁴	B ⁵	C ⁶	N ⁷	O ⁸	F ⁹
Na ¹¹	Mg ¹²	Al ¹³	Si ¹⁴	P ¹⁵	S ¹⁶	Cl ¹⁷
Cu ²⁹	Zn ³⁰	Ga ³¹	Ge ³²	As ³³	Se ³⁴	Br ³⁵
Ag ⁴⁷	Cd ⁴⁸	In ⁴⁹	Sn ⁵⁰	Sb ⁵¹	Te ⁵²	I ⁵³
Au ⁷⁹	Hg ⁸⁰	Tl ⁸¹	Pb ⁸²	Bi ⁸³	Po ⁸⁴	At ⁸⁵

Les atomes du groupe III-V ne possèdent que 3 électrons de valence sur leurs dernières orbitales *s* et *p* contre 5 sur les orbitales *s* et *p*. La liaison III-V résulte donc de l'hybridation sp^3 des orbitales atomiques (liaison covalente) avec, en plus, pour les atomes II-VI une partie ionique non négligeable qui provient de la différence de nature entre l'élément VI, très électronégatif (anion), et l'élément II (cation) [21]. La liaison II-VI est donc ion-covalente au contraire de la IV-IV (Si, Ge) qui, elle, est purement covalente.

II-4) Propriétés structurales

Les semiconducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines.

II-4-1) Structure Zinc Blende

La plupart des matériaux semiconducteurs binaire III-V, IV-IV et quelques matériaux II-VI ont une structure Zinc-Blende (ZB) (figure II-9). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées.

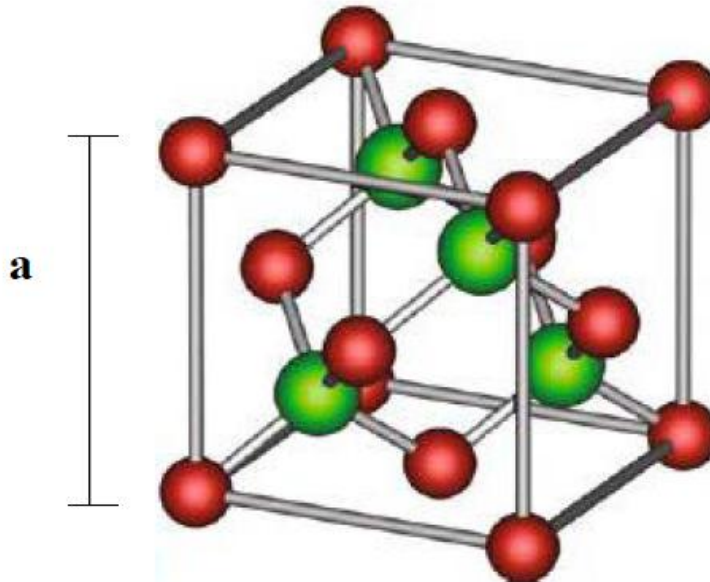
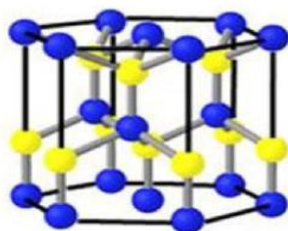


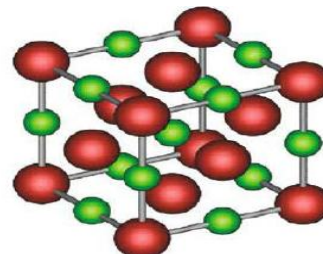
Figure II- 9) structure zinc blende.[28]

Comme nous pouvons le voir sur la figure (II-9) que la maille blende revient à une cubique à face centrée dans laquelle les sites tétraédriques non contigus sont tous occupés, soit une multiplicité de 8 atomes par maille (dont autant de cations que d'anions). Le rôle des deux ions étant symétrique, la maille blende se décompose donc en deux sous-réseaux cubiques faces centrées imbriqués, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube, l'étant occupé par l'anion (P, As ou Sb), l'autre par le cation (Al, Ga ou In)

Mais Ils existent Quelques semiconducteurs II-VI tels que le AIP qui se cristallise Wurtzite (hexagonale) ou Rocksalt (NaCl)



La structure Wurtzite



La Structure Rocksalt

Figure II-10) La structure Wurtzite est hexagonale[28]

II-4-2) La constante de maille

La maille cristalline est définie par trois paramètres a, b, c et par trois angles qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur figure (II-11) suivant les valeurs relatives de six grandeurs on définit les différentes structures cristallines.

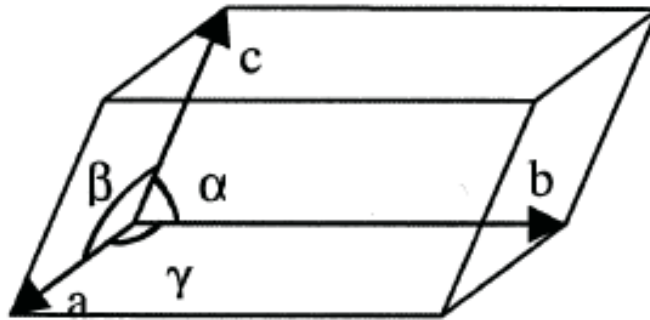


Figure II-11) La maille élémentaire.[29]

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

La constante de maille est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives, notée a sur figure (II-11).[21] (cas d'un cubique). La détermination de la constante de maille est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. La connaissance de cette constante de maille permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique, il peut varier en fonction de la température et de la pression. Les tableaux suivants présentent la structure cristalline et la constante de maille des matériaux semiconducteurs des groupes III-V, IV-IV et II-VI :

Tableau II-2) Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs III-V[28]

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

II-5) Propriétés électroniques

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

Cette bande est pleinement occupée par des électrons à $T=0K$ pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antillanités donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur E_g (band gap en anglais). Pour les semi-conducteur à gap direct le maximum de la bande de valence et le minimum de la bandes de conduction sont au point Γ . [30]

II-5-1) Structure de bande d'énergie électronique

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction Figure (II-12). Ce sont la bande

de valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute et la bande interdite qui les sépare qui déterminent principalement les propriétés de transport du semi conducteur.[31]

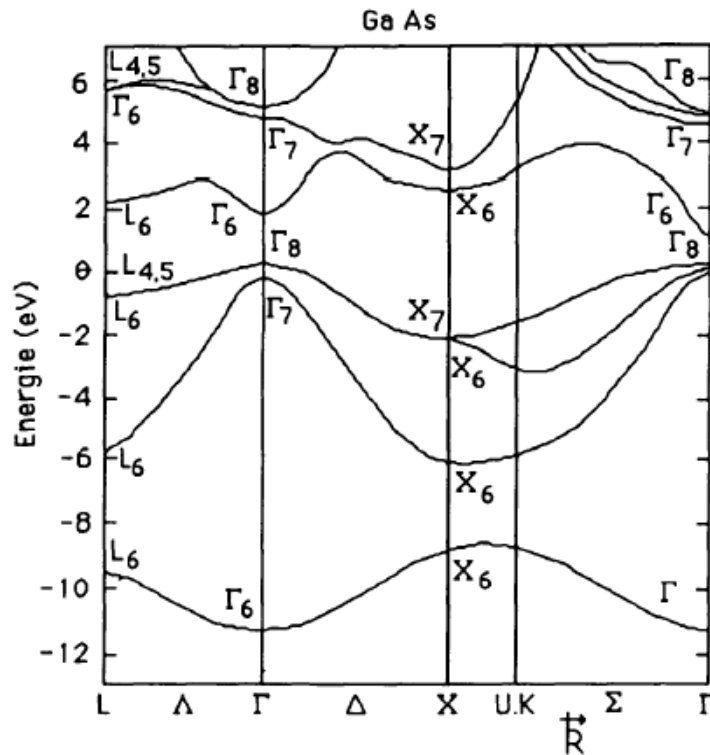


Figure II-12) Structure de bande de GaAs

II-6) Propriétés optiques

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

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux.[29]

II-6-1) Interaction rayonnement-matière :

Dans les interactions rayonnement-matière, et plus particulièrement lorsqu'il y a échange d'énergie, comme c'est le cas dans les composants optoélectroniques, la représentation corpusculaire du rayonnement est mieux adaptée. Einstein a suggéré que l'énergie du rayonnement n'était pas étalée dans tout l'espace mais concentrée dans certaines régions se propageant comme des particules qu'il appelées des photons. L'énergie du photon est donnée par:[3]

$$E = h\nu \quad (\text{II-1})$$

h : la constante de Planck

ν : la fréquence de rayonnement

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

La nature ondulatoire du rayonnement électromagnétique est représentée par la combinaison d'un champ électrique E et d'un champ magnétique H satisfaisant aux équations de Maxwell, les champs électrique et magnétique vibrent perpendiculairement l'un à l'autre et à la direction de propagation. La similarité de leurs comportements permet de ramener la représentation du rayonnement à la seule expression du champ électrique qui s'écrit :

$$E = E_0 e^{j(\omega t - kt)} \quad (\text{II-2})$$

E_0 : représente l'amplitude de la polarisation, $\omega = 2\pi\nu$ la pulsation et K le vecteur d'onde. L'expression représente une onde plane monochromatique de pulsation ω se propageant dans la direction r . [29]

II-6-2) La réflexion des ondes planes

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constants diélectriques différents, elle sera divisée en deux, une onde réfléchi et une onde réfractée.

Pour une incidence normal du rayonnement sur la surface d'un solide le coefficient de réflexion s'écrit:[29]

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{II-3})$$

Pour $k=0$ n est réel le coefficient de réflexion devient:

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (\text{II-4})$$

II-6-3) L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau à posséder pour ralentir et à dévier la lumière. Cet indice de réfraction est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ($c=299\ 792\text{Km/s}$) et la vitesse de la lumière dans le matériau, on peut exprimer l'indice de réfraction sous une forme complexe comme suit:[3]

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (\text{II-5})$$

$n(\omega)$: Etant l'indice de réfraction réelle.

$ik(\omega)$: Est l'indice d'atténuation appelé aussi coefficient d'extinction.

Le tableau II-1 : présente les indices de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs:

Tableau II-3) L'indice de réfraction de quelque matériaux semi-conducteurs à 300 k.[32]

matériau	n
Gap	2.92
InP	3.1
GaAs	3.3
InAs	3.5
InSb	3.95

II-6-5) La constante diélectrique

La constante diélectrique appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle a des conséquences importantes sur les propriétés physiques du solide. La permittivité électrique noté $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ avec ϵ_r la permittivité électrique relative et ϵ_0 permittivité électrique du vide. La constante diélectrique intervient dans de

nombreux domaines, notamment, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétiques, en particulier en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière.

Autrement dit, les excitations propres d'un matériau sont décrites par la fonction diélectrique $\epsilon = \epsilon(\omega, \vec{k})$, cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur d'onde \vec{k} . Pour les petites valeurs de \vec{k} [33] cette fonction sera seulement fonction de la fréquence, on parlera ainsi de la constante diélectrique statique qui correspond à l'équilibre thermodynamique et la constante diélectrique $\epsilon(\infty)$ correspondant à sa limite pour les hautes fréquences ; appelée aussi constante diélectrique optique. La fonction diélectrique peut être exprimé sous la forme complexe :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega) \tag{II-6}$$

La partie imaginaire $\epsilon''(\omega)$ traduit l'absorption du matériau tandis que la partie réelle $\epsilon'(\omega)$ est liée à la polarisation du milieu.

Le tableau II-2, présente des valeurs expérimentales de $\epsilon(\infty)$ pour quelque matériaux semi-conducteurs.

Tableau II-4) : La constante diélectrique optique de quelques matériaux semi-conducteurs à 300K .[32]

matériau	Constante diélectrique optique
Gap	8.5
GaAs	10.9
InP	9.6
InAs	12.3
InSb	15.6

II-6-6) La Relation entre l'indice de réfraction et la constante diélectrique

Dans le cas d'un milieu isotrope ou d'un cristal cubique, ε se réduit à un scalaire, la réponse du système à une onde plane électromagnétique peut alors être décrite à l'aide d'un indice de réfraction scalaire complexe :

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} \quad (\text{II-7})$$

La partie réelle de $N(\omega)$ correspond à l'indice normal du cristal dans une région de transparence, tandis que, la partie imaginaire $ik(\omega)$ correspond à une absorption optique du cristal (k est appelé le coefficient d'absorption ou coefficient d'extinction.)

La constante diélectrique sera déduite de la relation (2-6) et finalement on l'obtient sous sa forme complexe: [3]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \quad (\text{II-8})$$

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 \quad (\text{II-9})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk \quad (\text{II-10})$$

Si en simplifiant par $k=0$ on trouve que:

$$n = \sqrt{\varepsilon_1} \quad (\text{II-11})$$

On peut dire que n et k sont reliés par des relations de dispersion, la connaissance de l'un dans tout le domaine des fréquences permet la détermination de l'autre.

II-7) Effet de la pression sur les semiconducteurs

II-7-1) Définition la pression

La pression est une grandeur définie comme étant le quotient d'une force par la surface sur laquelle elle s'exerce; sa valeur est donnée en pascal (Pa), en bar ($1\text{bar} = 10^5 \text{Pa}$) ou en atmosphère. Lorsque la pression s'exerce sur une substance, elle provoque un rapprochement des particules constitutives (atomes ou molécule) ; il en résulte une diminution du volume ou un accroissement de la densité de la substance.

La compressibilité des substances diminue quand la pression augmente, il en résulte une tendance à l'uniformisation des densités des divers éléments. La diminution de la distance entre particule entraîne des modifications d'ordre structurale et électronique.[34]

II-7-2) L'effet de la pression sur la géométrie de la structure

La compressibilité d'un cristal s'accompagne par des modifications suivantes de la géométrie de la structure.

D'une part on observe pour les substances fortement comprimées un rétrécissement des liaisons atomiques qui correspondent à une diminution de la taille des tétraèdres; ce rétrécissement est toujours responsable d'une partie de la réduction du volume.

D'autre part, pour les cristaux où l'empilement atomique n'est pas compact, la diminution du volume résulte d'une rotation des tétraèdres autour des sommets ou d'arrêté commune. Lors de cette rotation, les distances entre un atome et ses plus proches voisins se rapprochent beaucoup plus.

Ces modifications peuvent entraîner, des arrangements nouvelles des atomes et peuvent provoquer le passage à des arrangements plus compactes, il s'agit donc, des transformations au cours desquelles les niveaux électroniques peuvent être profondément modifiés.[35]

II-7-3) L'effet de la pression sur les niveaux électroniques

L'application de la pression sur les semiconducteurs agit d'une manière isotrope sur la distance interatomique du réseau mais ne provoque pas aucun changement sur la symétrie. Cependant, les modifications apportées sur la distance interatomique entraînent des déplacements des états électroniques qui modifient par la suite la disposition relative des bandes d'énergie, ceci est dû à la redistribution des électrons dans les minimas de ces bandes principalement dans les points de haute symétrie Γ , X et L dans le cristal [35], cette redistribution entraîne un élargissement des bandes et donc une augmentation des bandes interdites.

II-7-4) Effet de la pression sur un semiconducteur

Les effets de la pression sur les paramètres de bande ont été étudiés pour le InAs, GaP par beaucoup d'autres[35]. L'augmentation de la pression hydrostatique augmente habituellement le gap de la bande d'énergie E_g de la façon suivante:

$$E_g(p) = E_g(0) + ap + bp^2 \quad (\text{II-12})$$

Indiquant qu'il existe de nombreux autres exemples de transition de phases entre variétés allotropiques d'un solide, comme le soufre, le carbone qui se présente soit sous forme de graphite soit sous forme de diamant, ou encore la glace lorsqu'elle est soumise à de très forte pression de l'ordre de 2000 bar. Un exemple assez remarquable de polymorphisme correspond au cas de l'étain dont on connaît au moins trois variétés pour la forme solide. Nous parlerons des deux principales: l'étain blanc(ordinaire) et l'étain gris.

La variété stable de l'étain dans les conditions habituelles de température est l'étain blanc $Sn(\beta)$, qui cristallise dans la forme quadratique centrée. C'est un métal blanc, de densité 7.28, peu dur et très malléable. L'étain blanc a été très longtemps utilisé pour la fabrication de la vaisselle, compte tenu de sa propriété de ne pas être facilement oxydé par des solutions faiblement acides. De plus, contrairement à d'autres métaux comme le cuivre ou le plomb, il forme pas de composés nocifs au contact des produits alimentaires. Au-dessous de 12 à 13°C, la forme cristalline de l'étain $\beta - sn sn(\beta)$ devient instable. La forme stable est alors l'étain $sn(\alpha)$ ou étain gris, qui cristallise dans la structure cubique à faces centrées. Cette phase est obtenue pour les composés III-V sous l'action de forte pression extérieurs.[31]

II-7-5) La technologie de haut pression

Deux bases de l'équipement de la haute pression sont en un usage commun. Equipement à volume large qui typiquement compte sur la presse hydraulique pour comprimer l'échantillon en une variété de configurations expérimentales. De grandes avances dans cette technologie ont été récemment produites, tel qu'il est maintenant possible de comprimer des échantillons considérablement large aux plus hautes pressions maximums.

Un type de presse à volume large est la presse à multi enclume octahédrale qui peut être utilisée pour comprimer des échantillons avec des volumes de l'ordre de quelques mm^3 aux pressions dans la rangée de 40 GPa.[35]

II-8) Conclusion

L'effet de la pression hydrostatique sur les propriétés électroniques et optiques des semiconducteur sa été étudié. La diminution de la distance entre particule suite à l'application de pression entraîne des modifications d'ordre structurale et électronique.

Chapitre III :Résultantes et discussions

III-1) Introduction

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

Les propriétés des composés binaires sont les plus connues néanmoins elles sont fixes, tel que le gap énergétique, le paramètre du réseau...etc. Alors que certaines applications exigent des propriétés intermédiaires à celles des composés binaires qu'on peut obtenir soit par croissance de deux composés binaires, soit par l'utilisation des alliages quaternaires ou ternaires, ouvrant la possibilité d'ajuster les propriétés (gap, indice de réfraction ...)

III-2) Étude des propriétés électroniques

III-2-1) Structure de bandes électroniques

Les calculs sont principalement basés sur la méthode empirique pseudopotentiel (EPM) avec l'utilisation du modèle de la structure zinc blende.

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

Dans la méthode du pseudopotentiel local, ces facteurs de forme sont fonction du point pris de la zone de Brillouin.

Pour que les résultats semi empiriques reflètent fidèlement les résultats donnés par l'expérimentation, une interpolation quadratique a donné une grande priorité pour l'obtention d'un accord proche, entre la plus grande bande de valence et la plus basse bande de conduction au point choisi

Les facteurs des forme pseudopotentiel symétriques et antisymétriques ajustés ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires semi-conducteurs InAs dans la phase zinc blende, sont présentés dans le tableau (III-1)

Tableau III-1) Les facteurs de forme pseudopotentiels du composé InAs pour différentes pressions.

InAs	Parameters(A°)	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
P=0 kbar	6.0237	-0.2116	0.00	0.0457	0.0492	0.045	0.01
P=20 kbar	5.9947	-0.2144	0.00	0.0517	0.0427	0.045	0.01
P=40 kbar	5.9385	-0.2172	0.00	0.0575	0.0359	0.045	0.01
P=60 kbar	5.8880	-0.2201	0.00	0.0630	0.0284	0.045	0.01

L'effet de la pression sur la structure de bande électronique du InAs calculée aux points de hautes symétries de la zone de Brillouin en utilisant l' EPM est représenté sur les **figure (III-1,III-2,III,3)** à pression nulle et à pression 20, 40, 60 kbar respectivement.

Vu la similarité de ces structures, seule la structure de bande électronique du composé binaire InAs à la pression 60 kbar présentée sur la **figure (III-3)** montre l'effet important de la pression sur la structure de bande, d'où l'influence sur la valeur du gap énergétique qui a été calculé en utilisant le pseudopotentiel EPM.

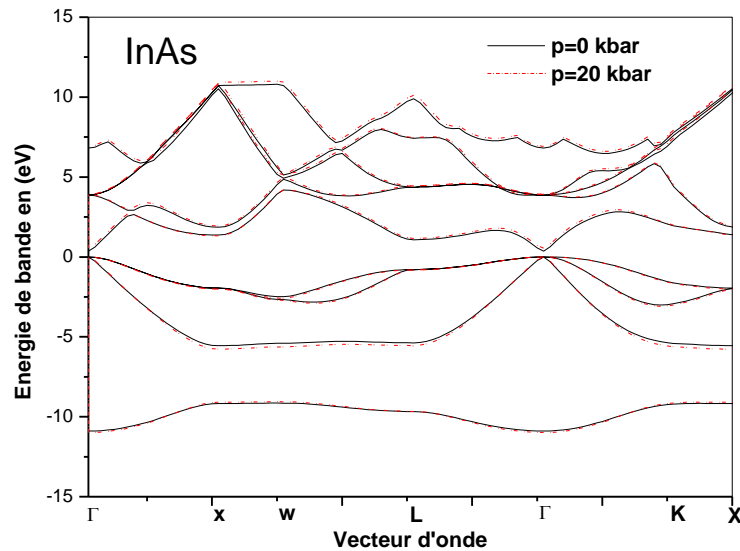


Figure III-1) La structure de bande électronique du composé binaire InAs à pression nulle est à pression 20kbar.

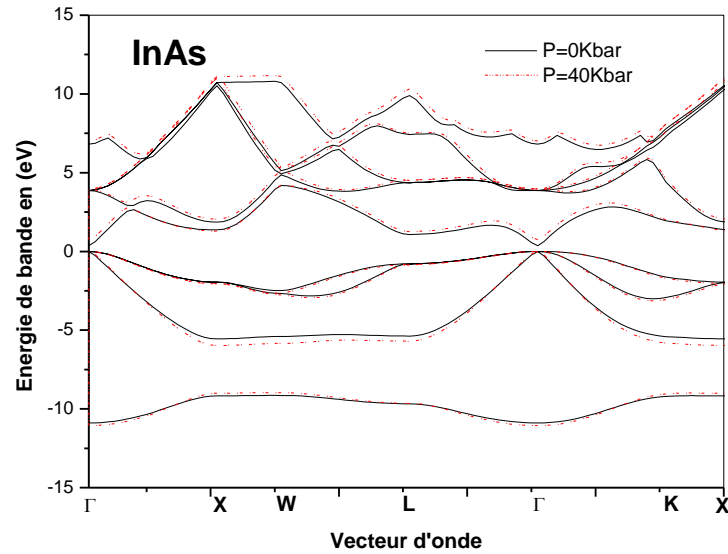


Figure III-2) La structure de bande électronique du composé binaire InAs à pression nulle est à pression 40 kbar

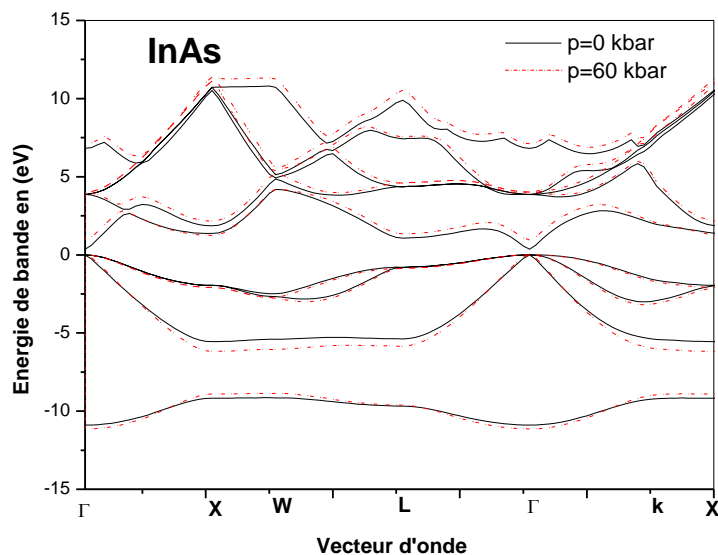


Figure III-3) La structure de bande électronique du composé binaire InAs à pression nulle est à pression 60 kbar.

III-2-2) Le gap d'énergie

Les gaps d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} et indirect E_{Γ}^X et E_{Γ}^L du composé binaire InAs ont été calculés pour différentes pressions. Nos résultats sont présentés dans le tableau (III-2).

Ces gaps d'énergies obtenues par interpolation quadratique aux points de haute symétrie Γ , X et L sont présentés dans les Figure (III-4,III-5,III-7).

Tableau III-2) Gap d'énergie pour les composé binaires InAs comparés aux données théoriques.

InAs	$E_{\Gamma}^{\Gamma}(eV)$	$E_{\Gamma}^X(eV)$	$E_{\Gamma}^L(eV)$	Valeur théorique $E_{\Gamma}^{\Gamma}(eV)$
P=0 kbar	0.36	3.32	6.68	0.36 ^b
P=20 kbar	0.55	3.33	6.78	
P=40 kbar	0.76	3.34	6.86	
P=60 kbar	0.96	3.33	6.93	

^{b)}Données théoriques indiquées dans Ref [24]

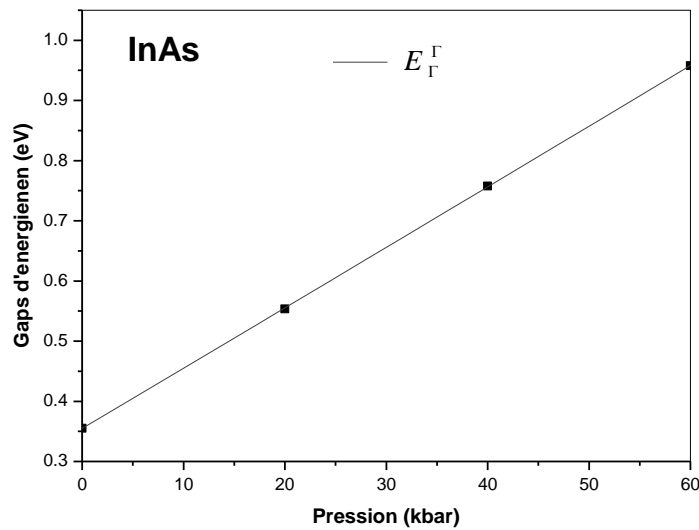


Figure III-4) La variation du gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur InAs

Nous observons que le gap direct E_{Γ}^{Γ} suit une interpolation quadratique de le forme:

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 0.355 + 0.010P + 8.125 \times 10^{-7} P^2 \quad (\text{III-1})$$

Nous remarquons que, le paramètre de courbure de cette équation tend vers zero ce qui confirme la variation linéaire et monotone du gap E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression et que le gap augmente chaque fois que la pression augmente de 0 à 60 kbar, cette dernière représente la pression de transition de phase du composé, chose qui peut être expliqué physiquement par: lors de l'application d'une pression sur un matériau le paramètre de maille diminue, ce qui provoque l'augmentation des interactions et par le suite l'augmentation du gap énergétique.

Les gaps indirect E_{Γ}^X et E_{Γ}^L **Figure (III-5,III-6)** par contre, suivent une interpolation quadratique de la forme:

$$E_{\Gamma}^X = 3.318 + 7.025P - 8.125P^2 \quad (\text{III-2})$$

$$E_{\Gamma}^L = 6.853 - 0.004P - 9.687P^2 \quad (\text{III-3})$$

Leur variation en fonction de la pression est non linéaire et non monotone .

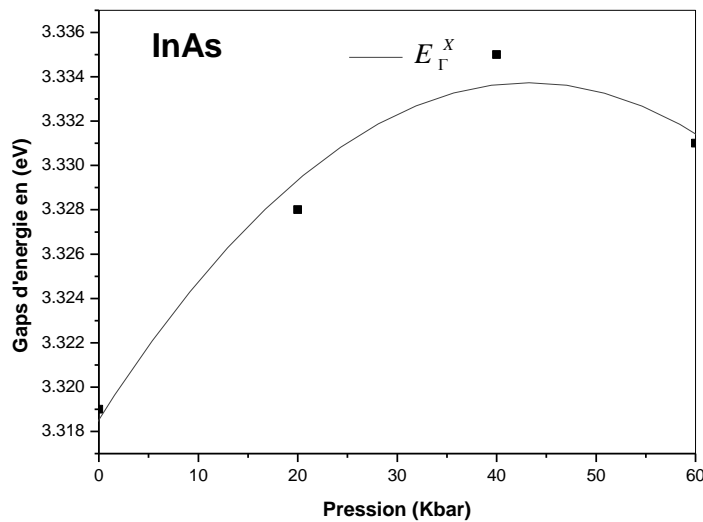


Figure III-5) La variation du gap d'énergie E_{Γ}^X en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur InAs.

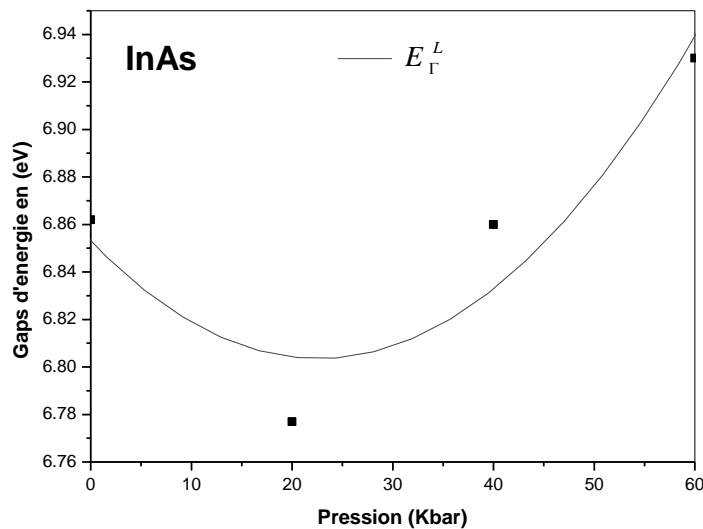


Figure III-6) La variation du gap d'énergie E_{Γ}^L en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur InAs.

Pour voir une éventuelle transition des gaps direct et indirect, la figure (III-7) a été tracée, on remarque l'absence de transition de gap et que le gap direct est le gap fondamental ce qui permet de conclure que le InAs est un semi conducteur à gap direct pour toute les pressions inférieures à la pression de transition de phase.

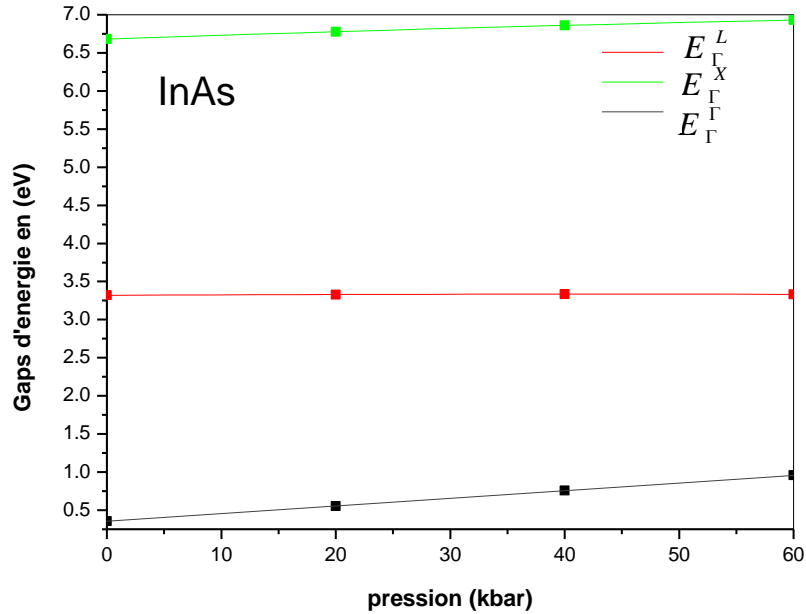


Figure III-7) Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la pression p du composé binaire semiconducteur InAs.

III-3) Les propriétés optiques

III-3-1) L'indice de réfraction du composé binaire InAs

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

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

1. La relation Moss basée sur le modèle atomique. [37]

$$E_g n^2 = K \quad (\text{III-4})$$

Où K est une constante de valeur de 108eV.

2. La relation de Ravindra et ses collaborateurs. [38]

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{III-5})$$

Avec

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

3. L'expression empirique de Herve et Vandamme. [39]

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{III-6})$$

Avec A et B constantes numériques de valeur 13.6 et 3.4eV, respectivement.

4. La relation de Reddy et Aujaneyulu. [40]

$$E_g e^n = 36.3 \quad (\text{III-7})$$

5. La relation de Ravindra. [41]

$$n = 4.16 - 0.85 E_g \quad (\text{III-8})$$

Nos résultats de calcul de l'indice pour chaque modèle sont présentés le tableau (III-3)

Tableau III- 3) Calcul des indices de réfraction du InAs en fonction de la pression p.

InAs	n calculé à partir de:				
	La relation Moss	La relation Ravindra	La relation Gupta Ravindra	La relation Hervé vandamme	La relation Reddy et Anjaneyulu
P=0 kbar	4.18	3.86	3.86	3.76	4.63
P=20 kbar	3.74	3.69	3.74	3.58	4.18
P=40 kbar	3.45	3.52	3.61	3.42	3.87
P=60 kbar	3.26	3.35	3.49	3.28	3.64

III-3-1-1) Modèle de Moss

La **figure (III-8)** donne la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composé InAs, la relation qui relie les deux grandeur (p et n) est présentée par le fit polynomial d'ordre deux donné par l'équation suivante:

$$n = 4.172 - 0.024P + 1.513P^2 \quad (\text{III-9})$$

On peut conclure que qualitativement pour ce modèle le variation est non linéaire et monotone et que l'indice diminue chaque fois que la pression augmente.

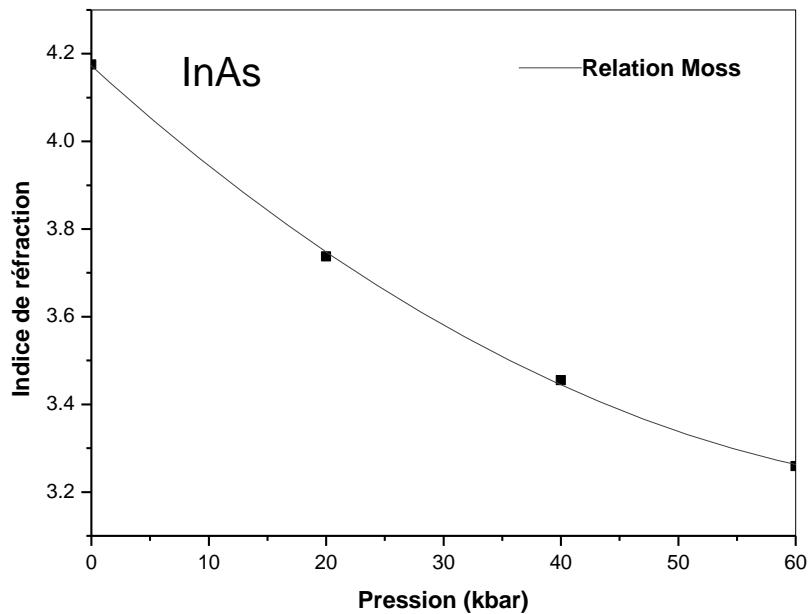


Figure III-8) La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le Modèle de Moss.

III-3-1-2) Modèle de Ravindra

Pour le modèle de Ravindra **Figure (III-9)** l'indice de refraction suit une interpolation de la forme:

$$n = 4.073 - 0.017P + 1.371P^2 \quad (\text{III-10})$$

Le comportement est presque identique que le modèle de Moss, la variation est non linéaire et non monotone. Le même comportement est remarqué pour les autres modèles **Figure (III-10, III-11, III-12)**

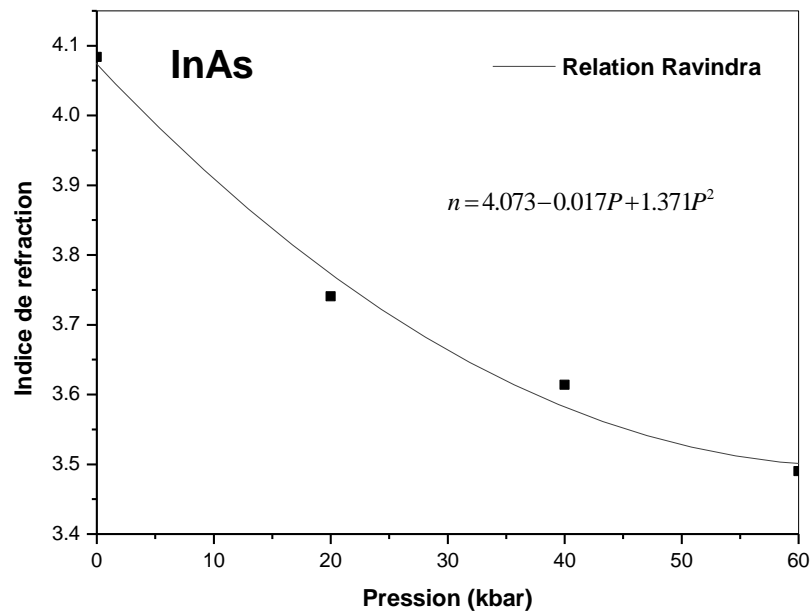


Figure III-9) La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le Modèle de Ravindra.

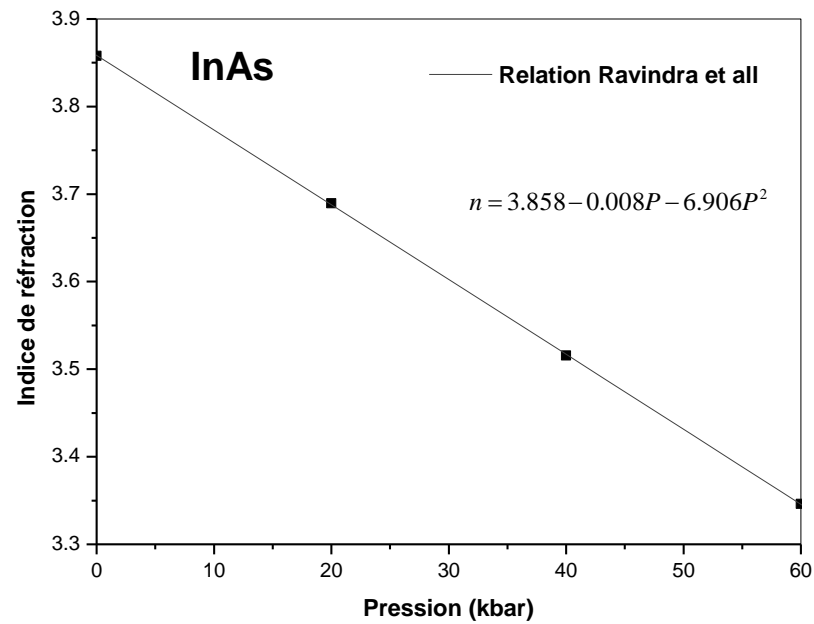
III-3-1-3) Modèle de Ravidra et Gupta

Figure III-10) La variation de l' indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Ravindra et Gupta.

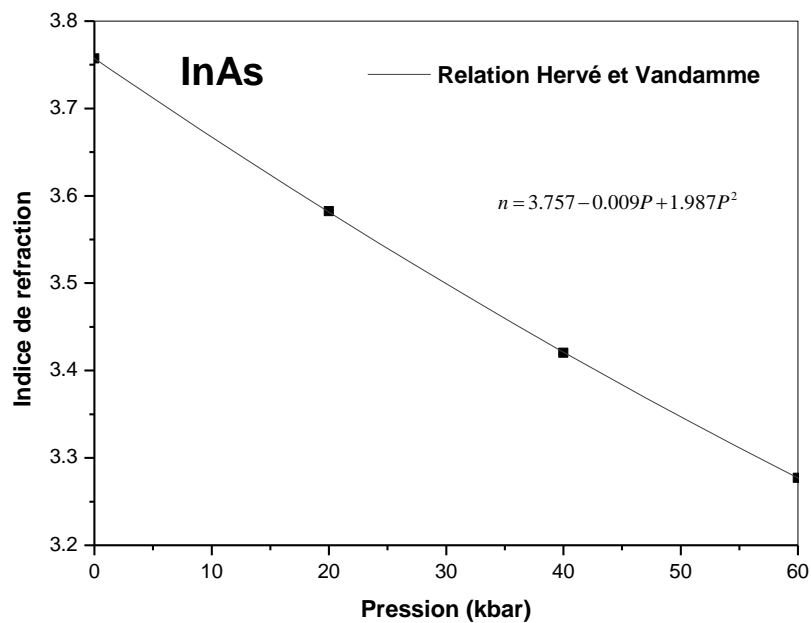
III-3-1-4) Modèle de Hervé et Vandamme

Figure III-11) La variation de l' indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Hervé et Vandamme.

III-3-1-5) Modèle de Reddy et Anjaneyulu

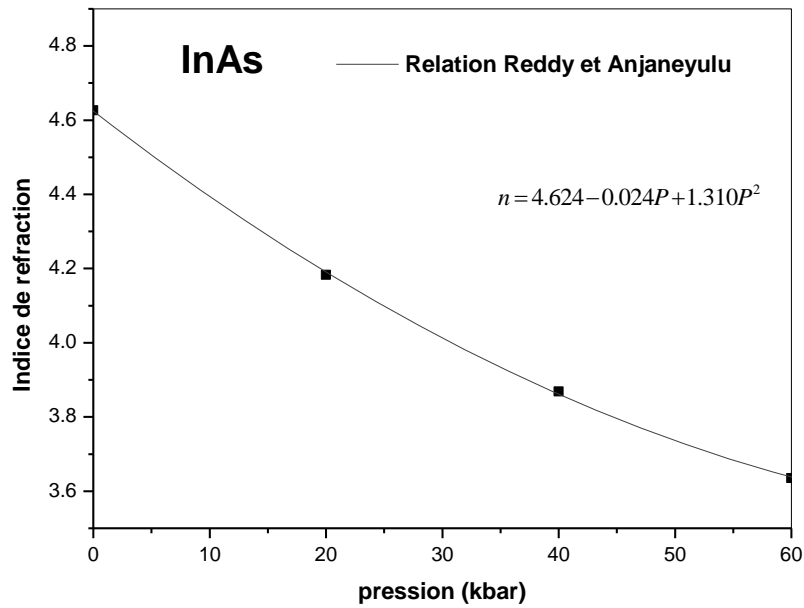


Figure III-12) La variation de l' indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Reddy et Anjaneyulu .

Pour l'étude quantitative de la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression nous avons vu nécessaire de présenter les cinq modèles d'indice sur la même courbe **Figure (III-13)**, le comportement est non linéaire et non monotone.

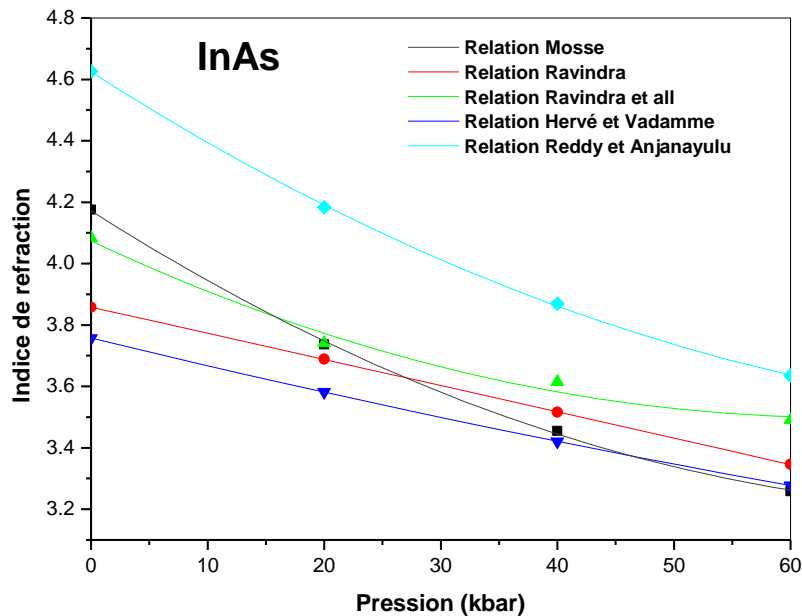


Figure III-13) La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la pression p du InAs les cinq modèles.

Les valeurs d'indice de réfraction du InAs pour tout les modèles à pression nulle sont présentées dans le tableau (III-4) comparés aux valeurs théoriques, nous pouvons conclure que le modèle de Hervé et Vandamme donne des valeurs qui sont proches des valeurs théoriques.

Tableau III- 4) Calcul des indices de réfraction du InAs à pression nulle pour les cinq modèles comparés aux données théoriques.

InAs	n calculé à partir de :					
	La relation Moss	La relation Ravindra	La relation Gupta Ravindra	La relation Hervé vandamme	La relation Reddy et Anjaneyulu	Valeur théorique
P=0 kbar	4.18	3.86	3.86	3.76	4.63	3.51 ^a 3.50 ^c

^{a)} Données théoriques indiquées dans Ref [36]

^{c)} Données théoriques indiquées dans Ref [14]

III-3) Étude des propriétés diélectriques

III -3-1) Constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} :

Basé sur les valeurs calculées de l'indice de réfraction n obtenu à partir des différents Modèles utilisés, la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} a été estimée en utilisant l'expression suivante:[8]

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \quad (\text{III-11})$$

Nos résultats le calcul de cette constante pour différents modèles sont présentés dans le tableau (III-5).

La variation de la constante ϵ_{∞} pour l' InAs en fonction de la pression p, calculée à partir des différents modèles , est présentée dans la **figure (III-14)**:

Nous observons que ϵ_{∞} varie de façon monotone et non linéaire, elle diminue en allant de la pression 0 à 60 kbar. Ce comportement est qualitativement semblable a celui de l' indice de réfraction en fonction de la pression p. Cela n' est pas surprenant , étant donne que ϵ_{∞} est obtenu à partir de la relation (III- 11) La diminution de la constante diélectrique de haute fréquence lorsque on augmente la pression indique que le InAs est un bon isolant pour les

hautes pressions, autrement dit, la capacité du stockage de l'énergie électrique potentiel sous l'influence d'un champ électrique diminue.

Tableau III-5) Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence pour InAs en fonction de la pression p comparées aux données théoriques.

InAs	ϵ_{∞} calculer à partir de :					Valeur théorique
	Relation de Moss	Relation de Ravindra	Relation de Gupta et Ravindr	Relation de Hervé et vandame	Relation Reddy et Anjaneyulu	
P=0 kbar	17.43	14.88	16.67	14.11	21.40	12.3 ^a 11.6 ^f 14.08 ^e
P=20 kbar	13.96	13.61	13.99	12.83	17.49	
P=40 kbar	11.93	12.36	13.06	11.69	14.96	
P=60 kbar	10.61	11.19	12.18	10.74	13.21	

^f) Données théoriques indiquées dans Ref [3]

^e) Données théoriques indiquées dans Ref [42]

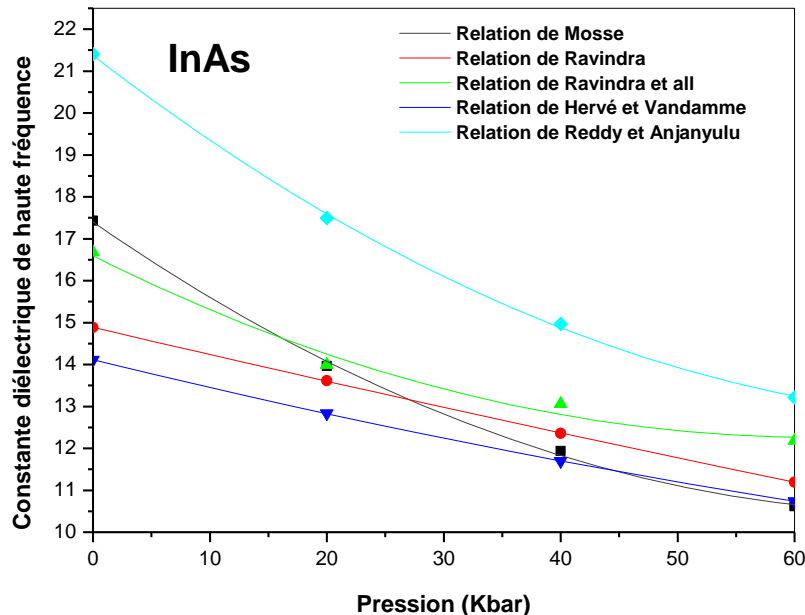


Figure III-14) La variation de la constante diélectrique de haute fréquence fonction de la pression p du InAs pour les cinq modèles.

Les équations quadratiques suivantes montrent la variation de la constante diélectrique haute fréquence en fonction de la pression pour les différents modèles utilisés.

$$\varepsilon_{\infty} = 17.397 - 0.193P + 0.001P^2 \quad (\text{La relation de Moss}) \quad (\text{III-12})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 14.887 - 0.065P - 6.750P^2 \quad (\text{La relation Ravindra}) \quad (\text{III-13})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 16.593 - 0.139P + 0.001P^2 \quad (\text{La relation Ravindra et all}) \quad (\text{III-14})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 14.116 - 0.068P + 2.032P^2 \quad (\text{La relation Hervé Vandamme}) \quad (\text{III-15})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 21.374 - 0.216P + 0.001P^2 \quad (\text{La relation Reddy et Anjanyulu}) \quad (\text{III-16})$$

III -3-2) Constante diélectrique statique ε_0

Nous avons également calculé la constante diélectrique statique ε_0 en utilisant le modèle de Harisson relation suivant: [43]

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_{\infty} - 1} = 1 + g \quad (\text{III-17})$$

Ou g est donnée par la formule:

$$g = \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{III-18})$$

Avec α_p est la polarité qui a été estimée à partir de la définition de Vogl comme suit: [44]

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{III-19})$$

Ou $V_S(3)$ et $V_A(3)$ représentent les facteurs de formes pseudopotential symétriques et antisymétriques respectivement. Ce calcul de la constante statique a été appliqué pour les différents modèles proposés. Nos résultats sont donnés dans le tableau (III-6)

Tableau III-6) Valeurs de la constante diélectrique statique pour InAs en fonction de la pression comparées aux données théoriques.

InAs	ϵ_0 calculer à partir de :					
	Relation de Moss	Relation de Ravindra	Relation de Gupta et Ravindr	Relation de Hervé et vandame	Relation Reddy et Anjaneyulu	Valeur théorique
P=0 kbar	18.58	15.85	17.77	15.03	22.83	14.9 ^g 15.5 ^m 15.42 ^e
P=20 kbar	14.03	13.67	14.06	12.89	17.85	
P=40 kbar	12.35	12.79	13.52	12.10	17.85	
P=60 kbar	10.84	11.43	12.44	10.97	13.50	

^{g)} Données théoriques indiquées dans Ref [45]

^{m)} Données théoriques indiquées dans Ref [46]

La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la pression p utilisant les différents modèles est montré sur la **figure (III-15)**

On note que la valeur de ϵ_0 dépend du modèle utilisé, quoique il existe une différence quantitative entre les différents modèles.

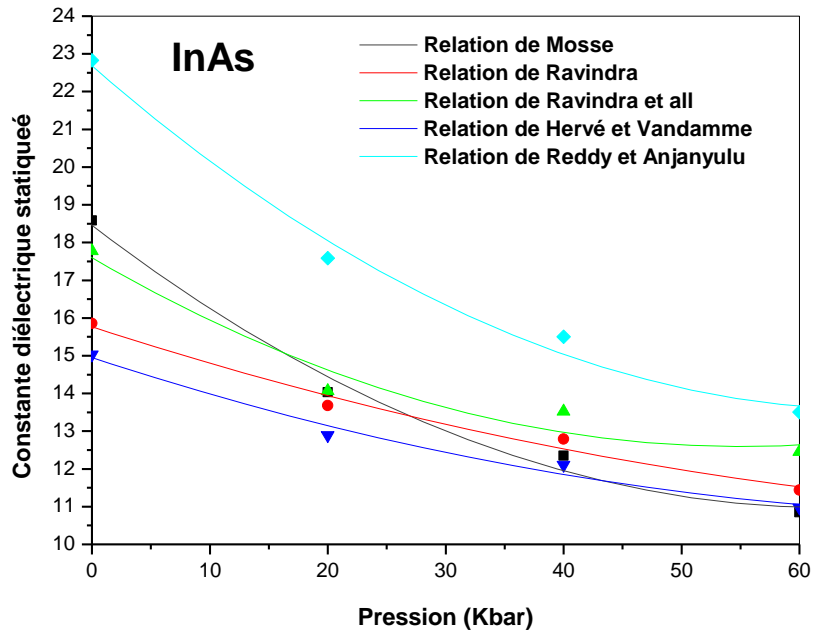


Figure III-15) La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression p du InAs pour les cinq modèles.

Qualitativement le comportement est monotone est non linéaire. Les équations du fit quadratique pour chaque modèle sont données par les expressions suivantes:

$$\varepsilon_0 = 18.447 - 0.238P + 0.002P^2 \quad (\text{La relation de Moss}) \quad (\text{III-20})$$

$$\varepsilon_0 = 15.767 - 0.101P + 5.152P^2 \quad (\text{La relation Ravindra}) \quad (\text{III-21})$$

$$\varepsilon_0 = 17.590 - 0.181P + 0.001P^2 \quad (\text{La relation Ravindra et all}) \quad (\text{III-22})$$

$$\varepsilon_0 = 14.948 - 0.102P + 6.288P^2 \quad (\text{La relation Hervé Vandamme}) \quad (\text{III-23})$$

$$\varepsilon_0 = 22.678 - 0.272P + 0.002P^2 \quad (\text{La relation Reddy et Anjanyulu}) \quad (\text{III-24})$$

III-4) Conclusion

En conclusion , la dépendance de la pression p des propriétés électroniques, optique et diélectriques telles que , le gap énergétique, l'indice réfraction et les constantes diélectriques statique et de haute fréquence, du composé binaire InAs ont été étudiés .

Les calculs sont principalement effectués par l'emploi de la méthode du pseudopotentiel empirique EPM . L'InAs est trouvé qu'il est un semiconducteur à gap direct pour toutes les pressions et que les valeurs des gaps dépendent vraiment de la pression.

L'indice de réfraction n calculé à partir des différentes relations empiriques utilisées varie d'une manière monotone et non linéaire en fonction de la pression, Ce comportement est similaire pour la variation de la constante diélectrique statique et de haute fréquence en fonction de la pression.

Conclusion générale

En conclusion, dans ce présent travail nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques telles que, le gap énergétique, l'indice de réfraction n et la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} , du semi-conducteur InAs dans la phase zinc-blende. Ces propriétés ont été examinées en fonction de la pression p pour ce faire, nous avons utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels.

Nos résultats ont montré que la bande interdite énergétique directe du composé binaire semi-conducteur sous investigation augmente d'une façon linéaire et monotone avec l'augmentation de la pression, par contre les gaps indirects varient d'une façon non linéaire et non monotone avec l'augmentation de la pression. L'indice de réfraction a aussi montré un comportement non linéaire et monotone par rapport à la pression. Contrairement au comportement de la bande interdite énergétique, l'indice de réfraction diminue avec la pression. Cela est vrai pour tous les modèles optiques utilisés. Donc, qualitativement, le même comportement de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composé binaire semi-conducteur. Quantitativement, le modèle de Hervé Vandamme a donné les plus proches valeurs pour l'indice de réfraction comparées aux valeurs théoriques.

La constante diélectrique de haute fréquence du InAs diminue lorsqu'on augmente la pression ce qui indique que le InAs est bon isolant pour les hautes pressions. Le même comportement est remarqué pour la variation de la constante diélectrique.

Finalement, l'effet de la pression p sur le composé binaire InAs influe sur les propriétés électroniques optiques et diélectriques tels que le gap énergétique qui augmente quand la pression augmente ce qui peut être justifié par la diminution du paramètre de maille sous l'effet de la pression qui permet l'augmentation des interactions électroniques, nous pouvons remarquer que le gap énergétique du InAs reste à gap direct pour toutes les pressions inférieures à la pression de transition de phase.

Références bibliographiques

- [1] Benatmane Kaled, Etude de laser à de semiconducteur III-V. Mémoire de magister Université se Batna, (2011).
- [2] F.Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [3] S. Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconducteur », Wiley, Chichester, (2005).
- [4] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 2 (1993) 7.
- [5] D.Zouaoui, Etude des propriétés optiques et diélectriques des composé binaires GaAs, InAs et leurs alliages ternaires $Ga_x In_{1-x} As$. Mémoire de master Université se M'sila, (2014).
- [6] S. Bounab, Thèse de magister, Univ. De Constantine, Algeria, 2002.
- [7] H. Mathieu, " Physique des Semiconducteurs et des Composants électronique ", 4 Ed. Masson (1998) 21, 23, 24, 25, 33, 419, 420.
- K.MOHAMED Wahiba, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012). [8]
- [9] W. A. Harrison, «Electronic Structure and the Properties of Solids ", Freeman, San Francisco, 1980.
- [10] F. Mezrag, Thèse de magister, Univ. De M'sila, Algeria, 2003.
- [11] P. Kiréev, « La Physique des semiconducteurs », Ed. Mir, Moscou (1975).
- [12] E. Elbaz, « Mécanique quantique », Ed. Hermaun (1985).
- [13] M.L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences, Ed. Springer, New York, (1989).
- [14] H. Mathieu, «Physique des Semiconducteurs et des Composants électronique », 4 Ed. Masson (1998).
- [15] J.C. Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. 116, 287 (1959).
- [16] J. V. Abarenkov and V. Heine, Phil. Mag. 9, 451, 1965.

- [17] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B14, 556, (1976).
- [18] M. L. Cohen and T. Bergstresser Phys. Rev. 141, 789 (1966).
- [19] N.Y. Aouina et al. / *Materials Science and Engineering B 123 (2005) 87–93*.
- [20] M. Labidi, Thèse de doctorat, Univ Badj Mokhtar Annaba (2011).
- [21] BECHIRI. Abderrachid..Effet du des ordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semiconducteur III-V. thèse doctorat. université mentouri. UMC (ALGERIE).2006
- [22] C. Ng –Hélène Ng , physique des semi-conducteurs, 3 Ed. Dunod, (2007).
- [23] N.Benahmed Ben abd allahThèse de Magister, Universite Abou bekrBelkaid-Télemcen(2006)
- [24] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod Université (1983).
- [25] Jeans-MarcFrigerio Institut des NanoSciences de Paris. Ecole d'automne "MODELISATION" (2004).
- [26] Michel Sauzade, " Introduction à l'électronique analogique " , Paris sud, 1995
- [27] O. Toulemonde Enseignant-Chercheur ICMCB Propriétés électriques :« De l'atome au semiconducteur » Univs.de Bourdeaux 1.
- [28] BahiWafa .lessemiconducteurs binaires utilisés dans les composants optoélectronique.
- [29] H.Mathieux, «Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques», 6 Ed. DUNOD (2009)
- [30] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [31] N. Baghdadli , Thèse de magister, Univ. ABOU-BAKR BELKAID, TLEMEN, Algeria, 2010
- [32] P.Kiréev, «La Physique des semi-conducteurs», Ed.Dound Université (2001).
- [33] S.M.SZE.KWOK K NG. Physic of semiconductor divise.edition 2.weley.
- [34] B.Vodar,J Bernard and B, Oksengoru, Encyclopedia Universalis (15), Paris (1985).

- [35] A. Tanto, Thèse de magister, Univ. De Ferhat Abbas, Sétif, 2002.
- [36] N. Bouarissa, The size-dependent electronic and optical properties of InAs quantum dots , Phys. Optik 127(2015) 1167-1170 .
- [37] T.S. Moss, Proc. Phys. Soc. B 63 (1950) 167.
- [38] N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, Infrared Phys. 19 (1979) 603.
- [39] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [40] R.R. Reddy, S. Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. (b) 174 (1992) K91.
- [41] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [42] M. Boucenna, Composition and lattice mismatch dependent dielectric constants and optical phonon modes of InAs_{1-x}ySbxPy quaternary alloys. Phys.67 (2014) 318–322.
- [43] S. Yu. Davydov, S. K. Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947.
- [44] P. Vogl, J. Phys. C.: Solid State Phys. 11 (1978) 251.
- [45] C. Kittel, Introduction to Solid-State Physics, fifth ed., Wiley, New York, 1976.
- [46] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.

Liste des Figures et Tableaux

Figures:

Figure I-1: Le potentiel d'interactions entre deux atomes en fonction de la distance r	11
Figure I-2: La fonction de Hernie-Aberenkov.....	14
Figure I-3: La fonction de Gauss.....	14
Figure I-4: L'Algorithme du calcul de l'EPM.....	16
Figure II-1: Diagramme des bandes d'énergie des semiconducteurs.....	19
Figure II-2: Les structures des bandes énergétiques: Métal, semiconducteur, isolant.....	20
Figure II-3: Les transitions optiques directes et indirectes.....	21
Figure II-4: Répartition des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de Valence à température.....	22
Figure II-5: Concentration intrinsèque du silicium et du germanium en fonction de la température.....	22
Figure II-6: Les semiconducteurs extrinsèques type N.....	23
Figure II-7: Les semiconducteurs extrinsèques type P.....	24
Figure II-8: Bandes d'énergie des semiconducteurs dopés (la position de niveau donneurs et accepteur dans les semiconducteurs de type N et de type P).....	24
Figure II- 9: structure zinc blende.....	26
Figure II-10: La structure Wurtzite est hexagonale.....	26
Figure II-11: La maille élémentaire.....	27
Figure II-12: Structure de bande de GaAs.....	29
Figure III-1: La structure de bande électronique du composé binaire InAs à pression nulle est à pression 20kbar.....	38
Figure III-2: La structure de bande électronique du composé binaire InAs à pression nulle est à pression 40 kbar.....	39

Figure III-3: La structure de bande électronique du composé binaire InAs à pression nulle est à pression 60 kbar.....	39
Figure III-4: La variation du gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression du compose binaire semi-conducteur InAs.....	40
Figure III-5: La variation du gap d'énergie E_{Γ}^X en fonction de la pression de compose binaire semi-conducteur InAs.....	41
Figure III-6: La variation du gap d'énergie E_{Γ}^L en fonction de la pression de compose binaire semi-conducteur InAs.....	41
Figure III-7: Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la pression p de compose binaire semi-conducteur InAs.....	42
Figure III-8: La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le Modèle de Moss.....	44
Figure III-9: La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le Modèle de Ravindr.....	45
.	
Figure III-10: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Ravindra et Gupta.....	46
Figure III-11: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Hervé et Vandamme.....	46
Figure III-12: La variation de l' indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Reddy et Anjaneyulu	47
Figure III-13: La variation de l'indice de réfraction n en fonction pression p di InAs les cinq modèles.....	47
Figure III-14: La variation de la constante diélectrique de haute fréquence fonction de la pression p du InAs pour les cinq modèles.....	49

Figure III-15: La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression p du InAs les cinq modèles.....52

Tableaux:

Tableau II-1: Morceaux choisis du tableau périodique (en gras : éléments III, V, II et VI)...25

Tableau II-2: Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs III-V...28

Tableau II-3: L'indice de réfraction de quelque matériaux semi-conducteurs à 300 k.....31

Tableau II-4: La constante diélectrique optique de quelques matériaux semi-conducteurs à 300K.....32

Tableau III-1: Les facteurs de forme pseudopotentiels du composé InAs pour différentes pressions.....38

Tableau III-2: Gap d'énergie pour les composé binaires InAs comparés aux données théoriques.....40

Tableau III- 3: Calcul des indices de réfraction du InAs en fonction de la pression p44

Tableau III-4: Calcul des indices de réfraction du InAs à pression nulle pour les cinq modèles comparés aux données théoriques.....48

Tableau III-5: Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence pour InAs en fonction de la pression p comparées aux données théoriques.....49

Tableau III-6: Valeurs de la constante diélectrique statique pour InAs en fonction de la pression comparées aux données théoriques.....51

Résumé

Les semiconducteurs II-VI, III-V et IV-IV sont caractérisés par des caractéristiques physiques font qu'ils sont utilisés dans de nombreux domaines, notamment dans le domaine photoélectrique.

Dans ce travail, nous étudions l'effet de la pression sur les propriétés optiques, électroniques et diélectriques de composé binaire semi-conducteur InAs dans la structure cristalline zinc blende,, en utilisant la méthode de pseudopotentiel empirique EMP.

Dans cette étude, nous constatons que pour toutes les pressions inférieures à la pression de transition de phase, appliquées sur le composé InAs, la structure de bande électronique est affectée par cette pression ainsi que , le gap d'énergie, indice de réfraction et la constante diélectrique haute fréquence et statique.

Nos valeurs se rapprochent des valeurs théoriques et expérimentales.

Mots clefs : indice de réfraction, pression, composés semiconducteurs .

Abstract

The semiconductors II-VI , III-V and IV-IV are characterized by physical characteristics are that they are used in many fields, specially in the photoelectric field.

In this work, we study the effect of pressure on optical, electronic and dielectric properties of InAs semi-conductor binary compound in zinc blend structure , using a method of empirical pseudopotential EMP.

In this study, we find that for all pressures below the phase transition pressure, applied on InAs compound, the electronic band structure is affected by the pressure and the energy gap, refractive index and high frequency dielectric constant and static.

Our values are close to the theoretical and experimental values.

Key words: refractive index, pressures, compound semiconductors

المخلص

تتميز أنصاف النواقل II-VI, III-V, و IV-IV بخصائص فيزيائية تجعلها تستخدم في كثير من المجالات أهمها المجال الكهروضوئي.

قمنا في هذه الأطروحة بدراسة تأثير الضغط على الخصائص البصرية و الالكترونية و العازلة لمركب ثنائي نصف ناقل InAs و ذلك باستعمال طريقة شبه الكمون (EPM) .

إن للضغط تأثير على الخصائص البصرية و الالكترونية و العازلة لأنصاف النواقل للمركب الثنائي InAs و التي تتميز بتركيبية بلورية zinc-blende, حيث من خلال هذه الدراسات بينا أن جميع الضغوط أقل من الضغط المطبق على المركب في حدود ضغط المرحلة الانتقالية يؤثر على البنية الالكترونية و فجوات الطاقة و مؤشر الانكسار وثابت العازل الكهربائي للترددات العالية و الثابتة.. كما أن قيمنا مقارنة للقيم النظرية و التجريبية.

كلمات المفاتيح: قرينة الانكسار, الضغط, مركبات أنصاف النواقل.