

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° :Ph APP 08/2019



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : Physique Appliquée

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Réalisé par:

DERRI THELDJA

Intitulé

**Propriétés du réseau, paramètres élastiques et
micro-dureté du semi-conducteur binaire InSb
sous pression hydrostatique**

Soutenu le 04 /07 /2019 devant le jury composé de:

F.Mezrag	Université Mohamed Boudiaf- M'sila	Présidente
N.Bouarissa	Université Mohamed Boudiaf- M'sila	Rapporteur
S.Saib	Université Mohamed Boudiaf- M'sila	Examinatrice
N.-E.H.Fares	Univesité . De B.B.A	Inviteé

Année universitaire : 2018/2019

REMERCIEMENTS

Je remercie ALLAH le tout puissant qui m'a offert santé, courage, patience et volonté, me permettant de mener à terme ce présent travail.

Ce travail a été réalisé au département de physique de l'université de M'sila.

Je remercie très sincèrement mon encadreur le Pr. Dr. N. BOUARISSA d'avoir proposé et dirigé ce travail, mais surtout d'avoir ménagé son temps pour mettre à ma disposition tous les moyens nécessaires. Je suis très reconnaissante envers lui pour son aide, ses conseils, sa compétence, mais aussi pour sa bonne humeur et sa haute modeste.

Je remercie les membres de jury : F. MEZRAG, S. SAIB que j'ai le grand honneur de m'accepter l'évaluation de ce travail.

Mes remerciements à ma famille et ma belle famille, mes collègues et amis pour leur soutien, leur présence et leur encouragement.

Enfin, Je tiens à remercier tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.

THELDIA.DERRI

DEDICACES

*A mes parents
A mon cher mari Ahmed Sedira
Ma sœur zoubida
Mes frères Abdallah et Amine
Mes neveux Tamime et Karime
Ma belle famille surtout ma belle mère et beau père
Mes belles sœurs Zoubida et Naima
Mes princesses Salsabil, Khadidja, Chahed
Mon beau frère Yassine
Mes amis Bouchra, Imane, Meriem, wahiba*

DERRI. THELDJA

Tables des matières

REMERCIEMENTS.....	i
DEDICACES.....	ii
TABLES DES MATIERES.....	iii
INTRODUCTION GNERALE.....	1
Références.....	3
Chapitre I : Généralité sur les semi-conducteurs à pression normal et sous pression	
I.1. Introduction	4
I.2. Définition d'un semi-conducteur.....	4
I.3. La Conduction électrique dans les semi-conducteurs.....	5
I.4. Différents types de semi-conducteur	5
I.4.1. Semi conducteur intrinsèque.....	5
I.4.2. Semi-conducteur extrinsèque (dopage).....	6
I.4.2.1. Semi-conducteur extrinsèque de type N.....	6
I.4.2.2. Semi-conducteur extrinsèque de type P.....	7
I.5. La notion de bande d'énergie dans un semi-conducteur.....	8
I.6. Notion de gap direct et de gap indirect.....	9
I.7. Les composés binaires de famille III-V.....	10
I.8. Définition des semi-conducteurs III-V.....	11
I.9. Propriété physique des composé III-V.....	12
I.9.1. Propriété structurale des matériaux III-V.....	12
I.9.1.1. Liaisons atomiques des matériaux III-V	14
I.9.1.2. Réseau réciproque et zone de Brillouin	14
I.9.2. Propriétés électroniques	15
I.9.2.1. Structure des bandes d'énergie.....	15
I.9.3. Propriétés élastiques des matériaux III-V.....	17
I.9.3.1. Energie et tenseur des constantes élastiques.....	18
I.9.3.2. Le tenseur de déformation	18
I.9.3.3. Le tenseur des contraintes	19
I.9.3.4. Relation contrainte-déformation	20

I .9.3.5.Tenseur des constantes élastiques (Cristal à symétrie cubique).....	21
I .9.3.6.Compression uniforme: (module de compressibilité).....	22
I .9.3.7.Cisaillement simple	23
I .9.3.8.Extension uni-axiale : (Module de Young).....	23
I .9.3.9.Contraction latérale et coefficient de poisson	24
I .9.3.10.Formules des modules d'élasticités pour les symétries cubiques.....	25
I .9.3.11. Les conditions de stabilité mécanique.....	25
I .9.3.12. Le factor anisotropie.....	26
I .10.4.Propriétés mécaniques (micro-dureté) des matériaux III-V.....	26
I .11. Les avantages des semi-conducteurs III-V.....	26
I .12.Applications.....	27
I .13. L'effet de la pression hydrostatique sur les semi conducteurs III-V.....	27
I .13.1. La technologie de la haute pression.....	27
I .13.2.L'effet de la pression sur la géométrie de la structure.....	28
I .13.3.L'effet de la pression sur les niveaux électroniques.....	28
Référence.....	30

Chapitre II : la méthode de pseudo-potentiel

II.1. Introduction	32
II.2. Formulation mathématique.....	32
II.3. Les modèles du pseudo-potentiel.....	34
II.3.1. Le modèle local.....	34
II.3.2. Le modèle non local.....	35
II.3.2.1. Modèle de Heine-Abarenkov.....	36
II.3.2.2. Modèle de Gauss.....	36
II.3.2.3 Modèle d'Aschcroft	37
II.4. La méthode empirique de pseudo-potentiel local (EPM).....	38

Référence41

Chapitre III : Résultats et discussions

III.1.Introduction43

III.2. Propriétés structurales.....49

 III.2.1.Paramètre du réseau.....49

 III.2.2. La distance de liaison.....50

III.3.Propriétés électroniques.....52

 III.3.1. Gaps énergétiques52

III.4.Propriétés élastiques.....56

 III.4.1. constants élastique.....56

 III.4.2. paramètres élastiques.....61

 III.4.2.1.Module de compressibilité61

 III.4.2.2.Module de cisaillement.....63

 III.4.2.3.Module de Young.....64

 III.4.2.4.Coefficient de Poisson.....66

 III.4.2.5. Fraction d’anisotropie67

 III.4.2.6.Micro-dureté.....68

Références.....71

CONCLUSION GENERALE.....72

LISTE DES FIGURES

LISTE DES TABLEAUX

Résumé

INTRODUCTION
GENERALE

De notre époque les semi-conducteurs jouent un rôle très important dans la technologie moderne. Les composés semi conducteurs appartenant à la famille des éléments III-V sont profitable dans la réalisation des composants électroniques et optoélectroniques. L'indium antimonide (InSb) est l'un des matériaux III-V qui à une importance technologique, car il a été particulièrement attractif en tant que matériau potentiel pour les détecteurs infrarouges et les appareils à grande vitesse.

InSb avec une petite bande interdite directe (0,17 eV), faible masse effective (0,014 me) et grand mobilité des électrons à température ambiante ($\sim 70000 \text{ cm}^2 / \text{V s}$).

Le meilleur échantillon InSb cultivé directement sur substrat de GaAs à 310°C 1 fournit une mobilité a 300 K de $41100 \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ avec une concentration en porteurs de $2.9 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Moins d'études ont porté sur la hétéro épitaxie de InSb sur Si comparativement au GaAs [1; 2; 3].

L'étude des matériaux sous l'effet de pression éprouve une très grande activité. La pression peut avoir un effet très large sur les propriétés chimiques et physiques de la matière et les matériaux exposent souvent des nouvelles phases cristallines.

Cela a été encouragé par le développement de la cellule à enclume en diamant et à l'extension de la plage de pression statique des mesures optiques et rayon x [4]. D'autre part, plusieurs techniques de calcul pour la structure électronique ont permis de mieux comprendre les propriétés fondamentales des matériaux sous l'effet de la pression [5-8]

Le but de ce travail est de calculer les propriétés structurales, élastiques et micro-dureté sous l'effet de la pression hydrostatique ont utilisons la méthode de pseudo-potentiel empirique (E.P.M).

Le présent travail de ce mémoire est organisé comme suit :

Après une introduction générale, le premier chapitre présente les notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs et l'étude des propriétés de composé binaire antimonure III-V (InSb) a pression normale et sous l'effet de pression, ont citons leurs avantages et applications technologiques.

Le deuxième chapitre est consacré à un rappel de principe de certaines méthodes théoriques utilisées dans le calcul de la structure de bandes électronique et se concentre sur

l'une des méthodes théoriques principales de notre travail appelée méthode empirique du pseudo-potentiel (E.P.M).

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

Références

- [1] J. I. Chyi, D. Biswas, S. V. Iyer, N. S. Kumar, H. Morkoc, R. Bean, K. Zanio, H. Y. Lee, and H. Chen. Molecular beam epitaxial growth and characterization of InSb on Si. *Applied Physics Letters*, 54 (1989) 1016.
- [2] S. V. Ivanov, A. A. Boudza, R. N. Kutt, N. N. Ledentsov, B. Y. Meltser, S. S. Ruvimov, S. V. Shaposhnikov, and P. S. Kopev. Molecular beam epitaxial growth of InSb/GaAs (100) and InSb/Si (100) heteroepitaxial layers (thermodynamic analysis and characterization). *Journal of Crystal Growth*, 205(1995)156.
- [3] H. C. Lu, H. R. Fetterman, C. J. Chen, C. Hsu, and T. M. Chen. Growth and characterization of MBE-grown thin films of InSb on Si. *Solid-State Electronics*, 538 (1993) 36.
- [4] G.J.Ack land,Rep.Phy.64 (2001) 483 and references therein.
- [5]M.C.Payne,M.P.Teter,D.C.Allan,T.A.Anias,J.D.Joannopoulos,Rev.Mod.Phy.64(1992) 1045.
- [6] N.Bouarissa,Mater.Chem.Phys.65 (2000) 107.
- [7] N.Bouarissa,Europ.Phys.J.B 26 (2002) 153.
- [8] N.Bouarissa,Physica. B 406 (2011) 2583.

Chapitre I

*Généralité sur les semi-conducteurs
à pression normal et sous pression*

Généralité sur les semi-conducteurs à pression normal et sous pression

I.1.Introduction

Dans ce chapitre nous allons rappeler quelques propriétés des matériaux semi-conducteurs. Les matériaux semi-conducteurs ont été étudiés depuis les années 1830 et les technologies qui ont connu la plus forte progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement grâce à leurs propriétés physiques qui sont connues depuis longtemps.

I.2.Définition d'un semi-conducteur

La figure I.1 représente différents matériaux dans la nature.

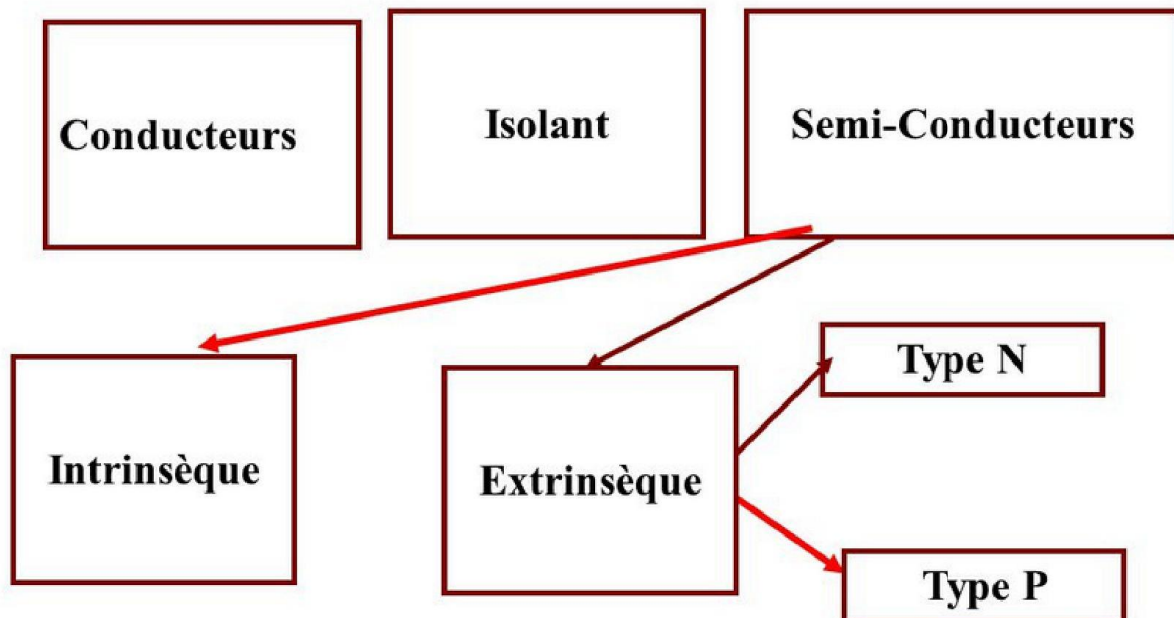


Figure I.1 différents matériaux

Un semi-conducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductivité électrique, se situent entre le conducteur et l'isolant.

Les semi-conducteurs à élément unique se caractérisent par des atomes à quatre électrons de valence [1]. Elles varient sur plusieurs ordres de grandeur, sous l'effet de :

- ✓ La température,
- ✓ L'éclairement

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

I.3. La Conduction électrique dans les semi-conducteurs

Un semi-conducteur à température de 0°K est un isolant et lorsque la température est supérieure a 0°K il est un métal. Lorsque la température est élevée, il devient un conducteur électronique par excitation thermique, comme c'est indiqué sur le schéma ci dessous [3].

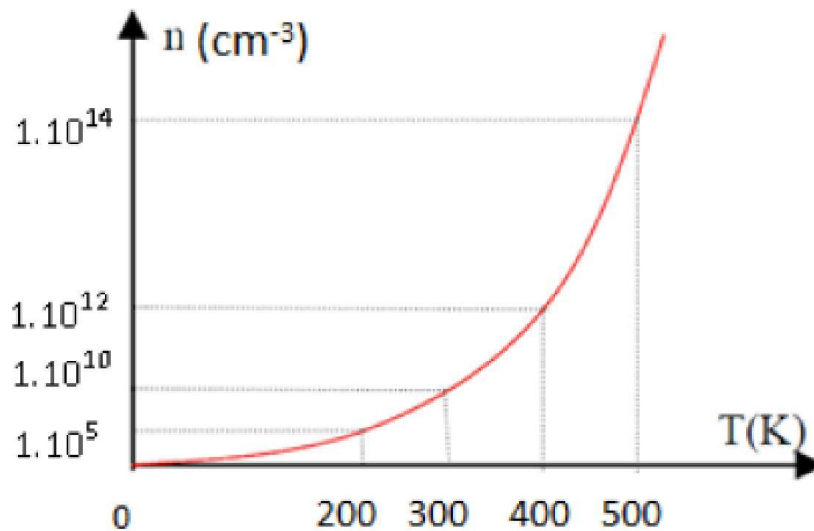


Figure I.2. L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium) [1].

I.4. Différents types de semi-conducteur

Par son habilité à conduire le courant, un semi-conducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant. Un semi-conducteur à l'état pur (intrinsèque) n'est pas un bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le silicium, le germanium et le carbone [4].

Il existe deux types de semi-conducteurs, l'un pur dit intrinsèque et l'autre dopé appelé extrinsèque.

I.4.1. Semi conducteur intrinsèque

Si le cristal est si pur que les impuretés, il donne une contribution négligeable aux densités de porteurs de charge, on parle de semi-conducteur intrinsèque. Dans ce cas, les électrons de la

bande de conduction ne peuvent provenir que des niveaux de la bande de valence autre fois occupés, laissant des trous derrière eux. Le nombre d'électrons de la bande de conduction est donc égal au nombre de trous dans la bande de valence [5].

$$n_c(T) = n_i(T) = pv(T) \quad (I.1)$$

Toutefois, un semi-conducteur réel n'est jamais parfaitement intrinsèque, ces Semi-conducteurs ne conduisent pas, ou très peu, le courant sauf s'ils sont portés à haute température [6].

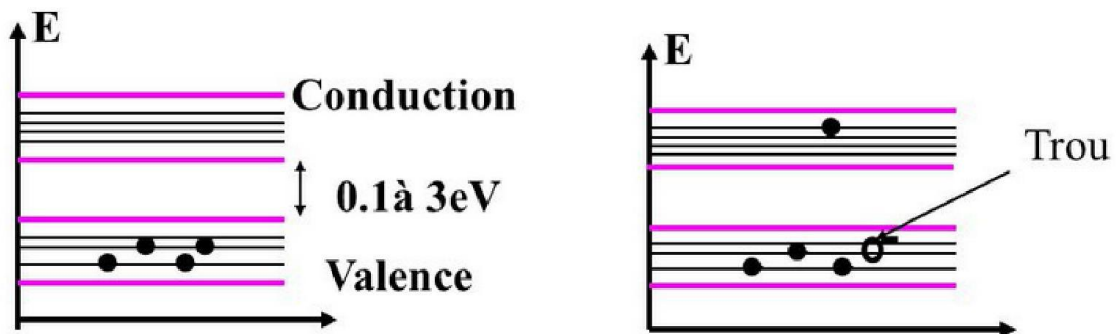


Figure I.3. Semi conducteur intrinsèque

I.4.2. Semi-conducteur extrinsèque (dopage)

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques lui conférant des propriétés électriques adaptées au domaine d'utilisation de ce matériau. L'introduction de ces dopants perturbe les bandes interdites, en créant des états accessibles à l'intérieur de ces bandes et rend le gap plus perméable. La conductivité est due essentiellement à cet élément dopeur. Selon le type de dopage, on distingue deux types de semi-conducteur [7].

I.4.2.1. Semi-conducteur extrinsèque de type N

Ce type consiste à augmenter la densité des électrons dans le matériau semi-conducteur par l'incorporation d'un certain nombre d'atomes riches en électrons [1]. Dans un semi-conducteur de type N les électrons libres sont donc majoritaires alors que les trous sont minoritaires. Les atomes donneurs sont les atomes pentavalents que l'on introduit dans le

semi-conducteur pour le rendre extrinsèque de type N, ces atomes sont susceptibles de donner un électron libre. On parle de dopage de type N dans la figure. I.5

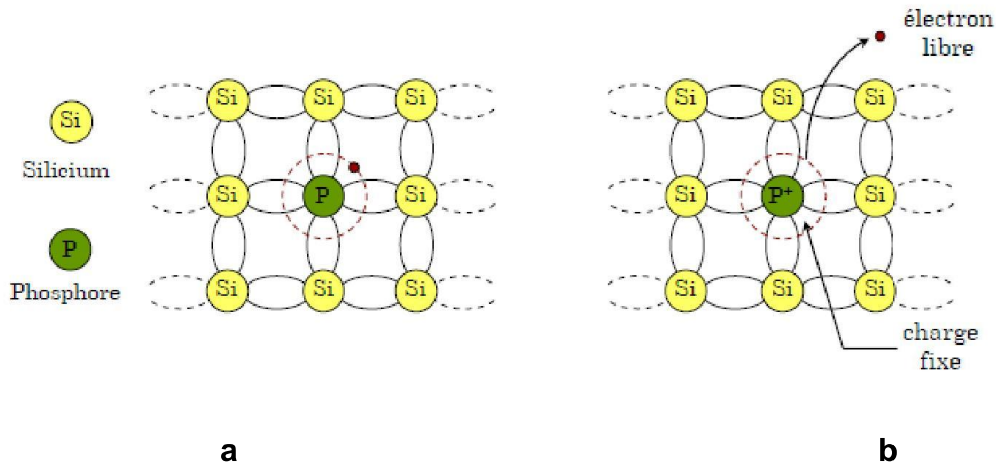


Figure. I.4. Silicium dopé au Phosphore. a) $k=0k$ et b) $k \neq 0k$ [5]

La figure I.6 montre que le niveau donneur est situé au dessous de la bande de conduction.

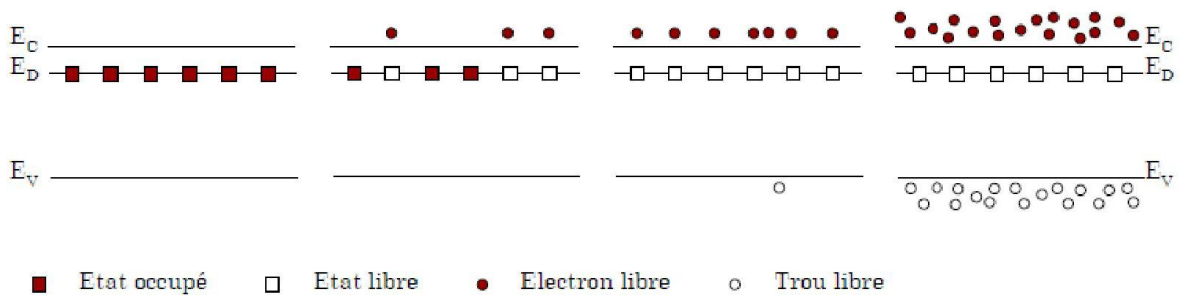


Figure. I.5. Structure de bande énergétique relative [1]

I.4.2.2. Semi-conducteur extrinsèque de type P

Ce type consiste à augmenter la densité des trous, pour ce faire, on introduit un certains nombre d'atomes pauvres en électrons dans le semi-conducteur, afin de créer un excès de trous. Nous appelle atomes accepteurs, les atomes trivalents introduits dans le semi conducteur pour le rendre extrinsèque de type P, sont susceptibles d'accepter un électron de valence. On parle de dopage de type P (Figure. I.7).

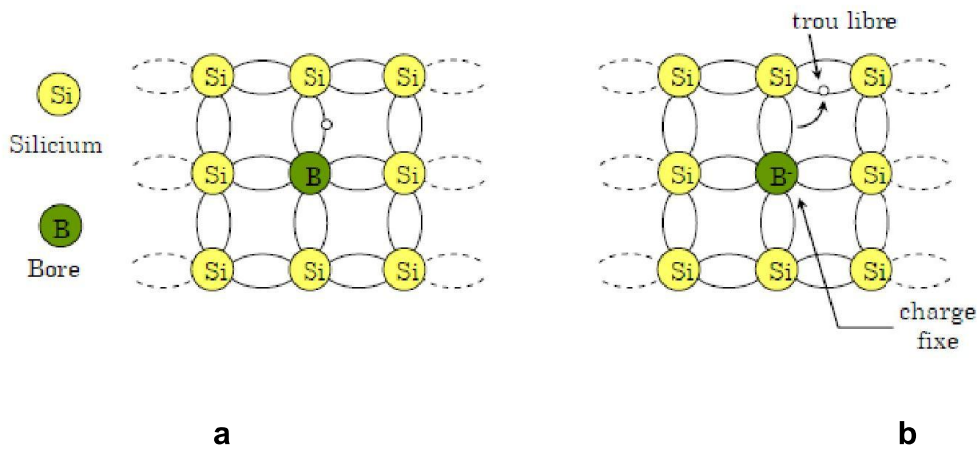


Figure. I.6. Silicium dopé au Bore. a) $k=0k$ et b) $k \neq 0k$

La figure I.8 illustre que le niveau accepteur est située au dessus de la bande de valence.

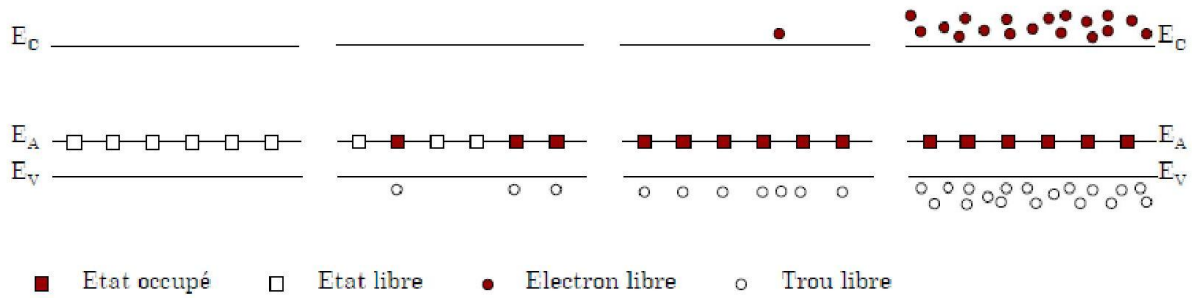


Figure. I.7. Structure de bande énergétique relative [1]

I.5. La notion de bande d'énergie dans un semi-conducteur

Rappelons-nous que la couche de valence d'un atome représente une bande d'un certain niveau énergétique et que les électrons de valence sont confinés à cette bande. Lorsqu'un électron acquiert assez d'énergie additionnelle d'une source externe, il peut quitter la couche de valence, devenir un électron libre et exister dans ce que l'on désigne comme étant la bande de conduction. En terme d'énergie, la différence entre la bande de valence et la bande de conduction est appelée un écart énergétique. Il s'agit en fait de la quantité d'énergie que doit avoir un électron pour sauter de la bande de valence vers la bande de conduction. Une fois dans la bande de conduction, l'électron est libre de se déplacer à travers le matériau et n'est plus lié à aucun atome particulier.

La figure I.8 montre les diagrammes d'énergie pour un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.

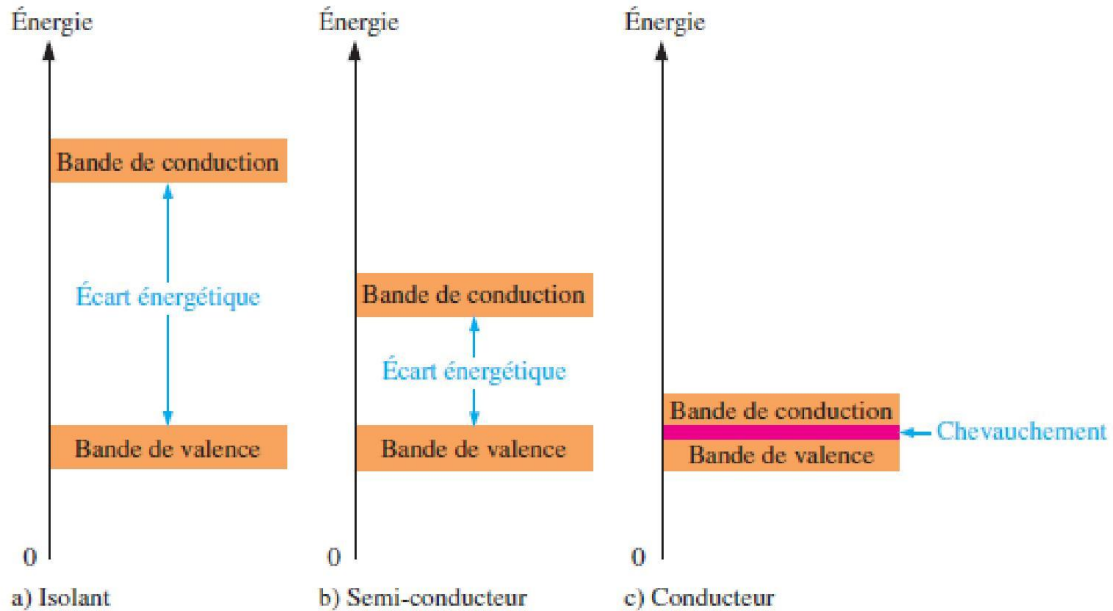
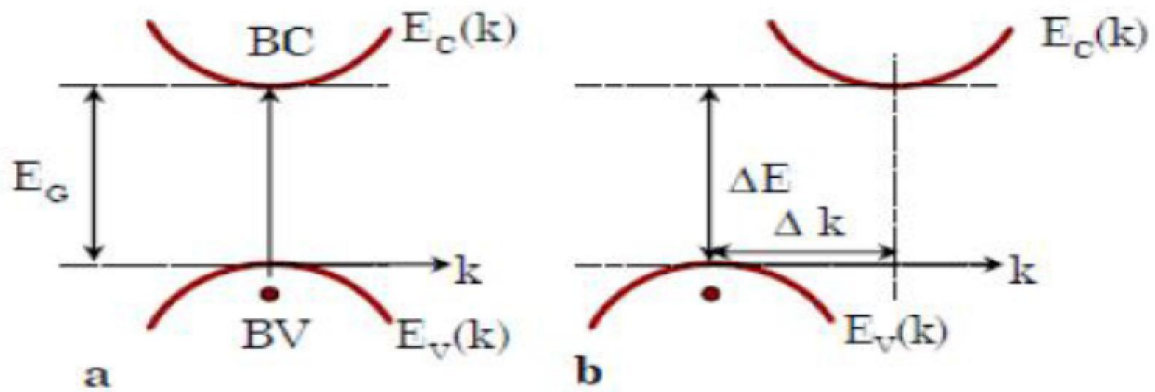


Figure I.8. Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux.

I.6. Notion de gap direct et de gap indirect

$E_{cv}(\mathbf{k})$ relation de dispersion où E_c est le minimum de la bande de conduction, E_v le maximum de la bande de valence et \vec{K} le vecteur d'onde associé à un électron. Le gap direct, c'est lorsqu'au maximum de la bande de valence et au minimum de la bande de conduction il correspond le même vecteur d'onde \vec{K} . Dans le cas où les bandes de conduction et de valence ne correspondent pas au même vecteur d'onde \vec{K} , le semi conducteur est a gap indirect.

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique (en particulier lumineux).



a) Semi-conducteur à gap direct. b) Semi-conducteur à gap indirect.

Figure. I.9. Semi-conducteur a gap direct et indirect

Tableau. I.1. Représente un exemple de largeur de bande interdite .

atome	E_G (eV)	type de matériau	d (Å)
C (Carbone)	5.5	isolant	3.567
Si (Silicium)	1.12	semi-conducteur	5.431
Ge (Germanium)	0.7	semi-conducteur	5.646
Sn(Etain)	0	conducteur	6.489

I.7. Les composés binaires de famille III-V

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

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs III.V interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.

les semi-conducteurs III-V sont utilisés pour fabriquer les hétéro-structures laser qui émettent dans la gamme du proche et moyen-infrarouge donc les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

I.8. Définition des semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la IIIème colonne et d'un élément de la Vème colonne de la classification périodique de Mendeleïev.

On peut obtenir un semi-conducteur si la somme des électrons des deux espèces est égale à 8 électrons. [8]

Tableau. I.2. Regroupe un extrait de classification périodique des éléments. (Les chiffres représentent le nombre atomique de matériau). qui permet tant de connaître les composés et alliages possible. Par exemple :

- In : Le nombre d'électron de valence est 3 électrons.
- Sb : Le nombre d'électron de valence est 5 électrons.

Donc : $\text{In} + \text{Sb} = \text{InSb}$: est un semi-conducteur car la somme des électrons des deux espèces (In et Sb) est égale à 08 électrons. Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés. [9]

III	IV	V
B ₅	C ₆	N ₇
Al ₁₃	Si ₁₄	P ₁₅
Ga ₃₁	Ge ₃₂	As ₃₃
In ₄₉	Sn ₅₀	Sb ₅₁
Tl ₈₁	Pb ₈₂	Bi ₈₃

Le tableau (I.3) présente quelques semi-conducteurs binaires en donnant leur énergie de la bande interdite E_g , la masse effective des électrons du bas de la bande de conduction en

fonction de la masse de l'électron m^*/m_0 , la mobilité électronique à champ faible μ et les paramètres cristallins a et c dans le cas du GaN :

Tableau. I .3. Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300°K. [10]

Composé III-V	E_g (ev)	m^*/m_0	μ (cm ² /Vs)	a (Å°)
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
GaN	3.36	0.19	380	a=3.189 c=5.185
Gap	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Comme on peut le remarquer dans le tableau précédent, plusieurs combinaisons binaires sont possibles, mais chacune a ses propres propriétés. L'étude de la structure de bande a montré que les éléments les plus légers incluant le bore, l'aluminium, l'azote... donnent un composé à large bande interdite avec une structure de bande indirecte et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée, c'est le cas du GaP. De tels matériaux ont peut d'intérêt pour l'électronique rapide [11]. Alors que les éléments les plus lourds incluant l'antimonide, le thallium... donnent un composé à courte bande interdite avec une structure de bande directe, c'est le cas du GaSb et InSb. Ces derniers ont des propriétés très intéressantes surtout dans l'électronique rapide et l'optoélectronique [12].

I.9. Propriété physique des composé III-V

I.9.1. Propriété structurale des matériaux III-V

A l'exception des matériaux III-V nitrurés qui cristallisent suivant la structure hexagonale Wurtzite, la majorité des matériaux III-V cristallisent suivant la structure cubique Zinc Blende qui est constituée de deux sous-réseaux cubique à face centrée CFC, l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre de (1/4, 1/4, 1/4) suivant la direction

[111]. Cette structure est représentée soit en perspective, soit en projection sur un plan formé par une des faces du cube.

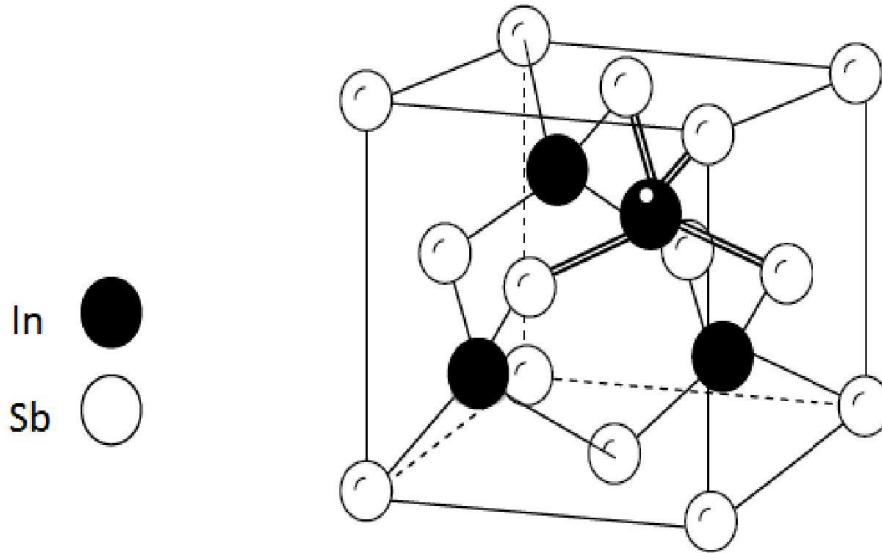


Figure I .10. Mailles cristallographiques de la structure Zinc Blende.

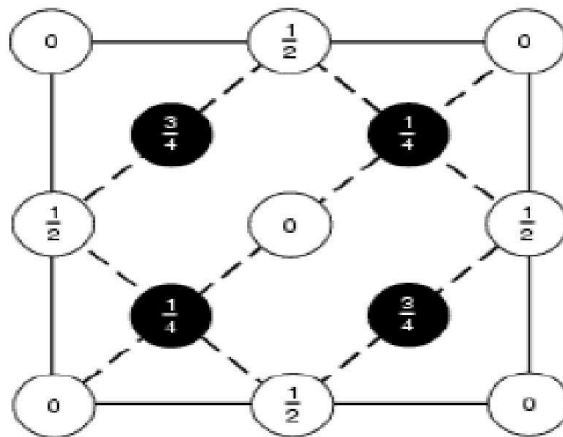


Figure I.11. Structure Zinc Blende en projection sur un plan formé par une des faces du cube.

Dans les matériaux III-V, les atomes des deux mailles CFC interpénétrées sont différents et on a 4 paires d'atomes par cellule conventionnelle. Il est important de remarquer que la structure zinc-blende n'a pas de symétrie d'inversion. On peut s'en rendre compte en considérant l'ordre des atomes le long de la diagonale de la structure cubique: la suite est ABABAB. Si l'on inverse le cristal, on obtient BABABA, qui n'est pas la même structure. Le diamant en revanche, n'a pas le même problème car la structure CCCCCC devient CCCCCC.

L'absence de symétrie d'inversion pour la structure zinc-blende est très importante pour les applications optoélectroniques: en effet, l'effet électro-optique Pockels (variation de l'indice de réfraction sous application d'un champ électrique statique) n'est possible que dans un cristal ne possédant pas de symétrie d'inversion.

I.9.1.1. Liaisons atomiques des matériaux III-V

Dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement covalent des liaisons (semi-conducteur polaires). Cette composante ionique de la liaison est importante, elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde, au même titre qu'il y a interaction entre les cristaux ioniques et la lumière infrarouge [13].

I.9.1.2. Réseau réciproque et zone de Brillouin

Les fonctions d'ondes électroniques et les énergies correspondantes sont dépendantes du vecteur d'onde de l'électron. Ainsi, la structure de bandes d'énergie du semi-conducteur doit être représentée dans l'espace réciproque et dans les différentes directions des vecteurs d'onde k . Le réseau réciproque, associé à la structure de type zinc blende et wurtzite, est représenté sur les Figures (III-3 et III-4). La maille élémentaire de la structure zinc-blende correspondant à la première zone de Brillouin, a une forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube. Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté Γ) et d'autres axes de symétrie :

- Les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4 (Δ).
- Les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6 (Λ).
- Les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2 (Σ).

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante :

- Points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.
- Points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.
- Points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, ne prenant en considération ni la composition chimique ni le nombre d'atomes dans la cellule unitaire. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive de réseau réciproque

d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semi-conducteurs [13].

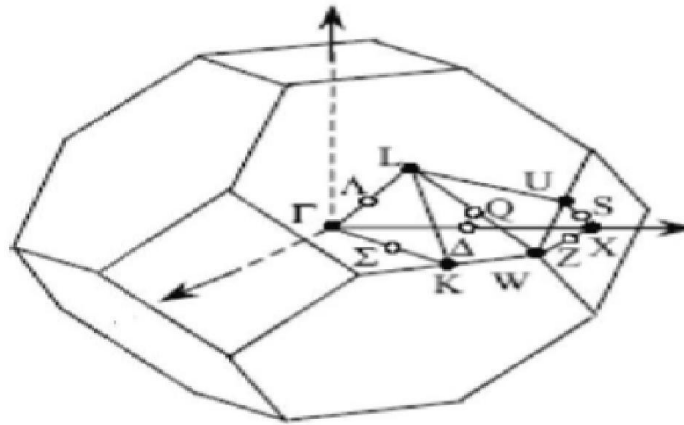


Figure II-12. Première zone de Brillouin d'un cristal "Zinc Blende"[14].

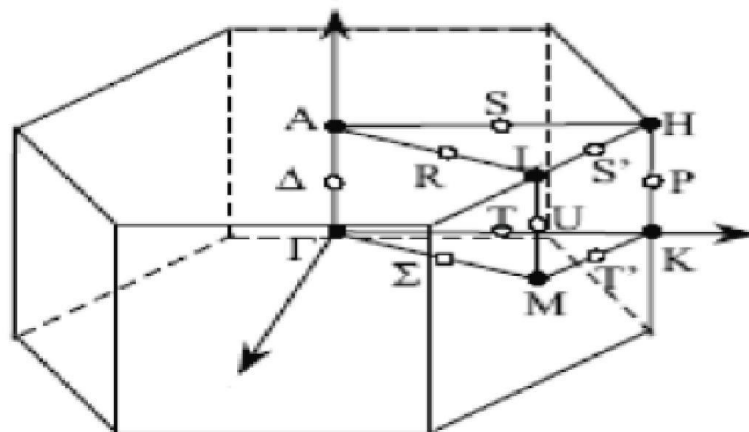


Figure I.13. Première zone de Brillouin d'un cristal " Wurtzite "[14].

I.9.2. Propriétés électroniques

I.9.2.1. Structure des bandes d'énergie

La description de la structure des bandes d'énergie s'effectue dans l'espace des vecteurs d'onde k c'est-à-dire l'espace réciproque. On considère les variations de l'énergie E en fonction de k que selon les directions de plus haute symétrie et en se limitant à la première zone de Brillouin.

La structure des bandes dans les composés III-V est représentée dans la figure I.15 avec un exemple pour l'InSb :

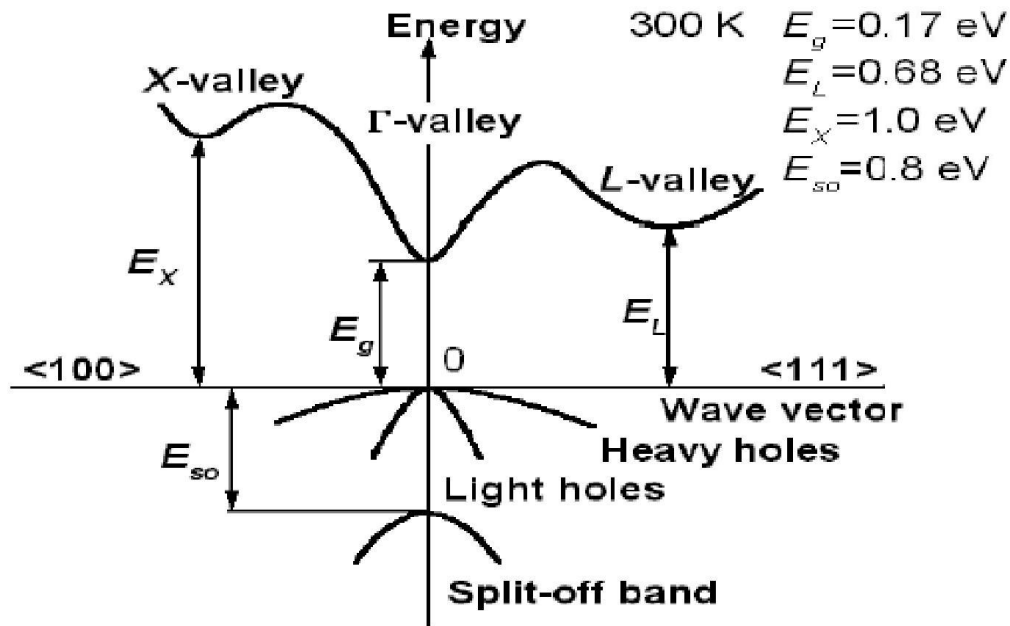


Figure I.14. Structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin. [15]

InSb a un gap direct qui possède la plus faible largeur de bande interdite, il se décompose en bande de conduction et bande de valence et bande interdite qui les sépare, l'énergie de la bande interdite est une mesure de la quantité d'énergie qu'il faut donner à un électron pour transiter du haut de la bande de valence au bas de la bande de conduction sous l'effet d'une excitation quelconque. La largeur de la bande interdite fixe la température critique c'est-à-dire la température maximale pour la quelle le matériau fonctionne normalement et que si on la dépasse, le matériau est détérioré [16].

Les propriétés de transport électronique dépendent principalement de la structure de la bande de conduction la plus basse (BC) et de celle de la bande de valence la plus élevée (BV). Les semi-conducteurs III-V sont à transitions directes c'est-à-dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont localisées au centre de la zone de Brillouin, ce qui les rend performant en optoélectronique. De façon habituelle, à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger, les variables relatives aux vecteurs d'onde s'expriment par [17]:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} K^2 \quad (\text{I.2})$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m} \quad (\text{I.3})$$

Par définition, la dérivée seconde d'une fonction nous donne l'ouverture de sa courbe. En tenant compte que la constante de Planck \hbar est constante, et que $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ change suivant l'ouverture de chaque vallée, ceci nous ramène alors que la masse ou plutôt la masse effective est différente dans chaque vallée et est définit par :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial K^2}} \quad (\text{I.4})$$

La bande de conduction présente dans son minimum une courbure très accentuée, et par définition, la masse effective des électrons est inversement proportionnelle à cette courbure, ce qui implique que la masse effective des électrons dans cet endroit est très faible, et par conséquent, la mobilité électronique élevée. Il existe aussi dans la bande de conduction, la présence de vallées secondaires en bordure de la zone de Brillouin, quatre vallées L équivalentes dans la direction $\langle 111 \rangle$, et trois vallées de type X dans la direction $\langle 100 \rangle$. Ces vallées sont caractérisées par une courbure faible et par conséquent, par des électrons ayant une masse effective élevée et donc une faible mobilité par rapport à la vallée centrale. La bande de valence comporte trois vallées qui se situent à des niveaux énergétiques proches. Deux sous-bandes qui se rejoignent au centre de la zone de Brillouin et qui portent le nom de bande de trous lourds et bande de trous légers ayant des masses effectives différentes, car la courbure des deux sous-bandes n'est pas la même. La troisième bande qui correspond à des états d'énergie plus faible est dite split-off.

I.9.3. Propriétés élastiques des matériaux III-V

L'élasticité des solides c'est la réponse du matériau aux sollicitations appliquées, ces sollicitations peuvent provoquées des déformations réversibles (retour à l'état initial). La loi de Hooke s'applique seulement aux faibles déformations et établit que dans un solide élastique, la déformation est proportionnelle à la contrainte. Lorsque les déformations sont si élevées la loi de Hooke ne sera plus satisfaite. Donc on peut dire que dans le domaine linéaire, l'allongement est proportionnel à la force dans le cas d'un étirement, et l'angle est proportionnel au couple dans le cas d'une torsion [18]. La théorie d'élasticité exige des

connaissances mathématiques afin d'établir un modèle mathématique du problème de déformation, puis comprendre les procédés de formulation et de solution. [19]

I.9.3.1. Energie et tenseur des constantes élastiques

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

I.9.3.2. Le tenseur de déformation

Les corps solides se déforment, sous l'action des forces extérieures [20]. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position au repos de l'objet. Les éléments du tenseur des déformations ε_{ij} sont définis par la relation suivante :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{I.5})$$

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

Le tenseur de déformation symétrique s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{I.6})$$

Les éléments diagonaux de ce tenseur définissent les déformations d'élongation, et expriment un changement de longueur dans les directions x, y ou z alors que les déformations notées $\varepsilon_{xy}, \varepsilon_{yz}, \varepsilon_{zx}$ représentent les variations d'angles entre les axes Ox, Oy et Oz. Les composantes de la déformation sont des rapports de longueurs et par conséquent ils n'ont donc pas de dimension.

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

$$\left(\frac{\delta l}{l} \right)_{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \quad (\text{I.7})$$

I.9.3.3. Le tenseur des contraintes

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

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (I.8)$$

Dans cette notation,

- le premier indice (i) indique la direction de la force .
- le deuxième indice (j) indique la normale à la facette sur laquelle s'applique la force.

(Voir figure I.15, ci -dessous)

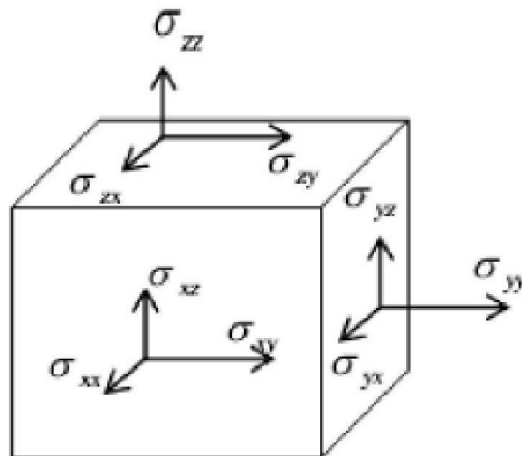


Figure I-15. Les composantes du tenseur des contraintes.

Les composantes σ_{ii} sont appelées contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement à une facette de normale Ox , Oy ou Oz .

Les éléments σ_{ij} avec $j \neq i$ sont les contraintes tangentielles puisque elles agissent dans le plan de la surface. Les composantes de la contrainte ont la dimension d'une force par unité de surface ou d'une énergie par unité de volume [21].

I.9.3.4. Relation contrainte-déformation

Le comportement d'un matériau élastique divise en quatre cas sont présentées à la figure I-16 : (a) élasticité linéaire, (b) élasticité non linéaire avec assouplissement, (c) élasticité non linéaire avec raidissement et (d) élasticité non linéaire avec assouplissement suivi d'un raidissement [22].

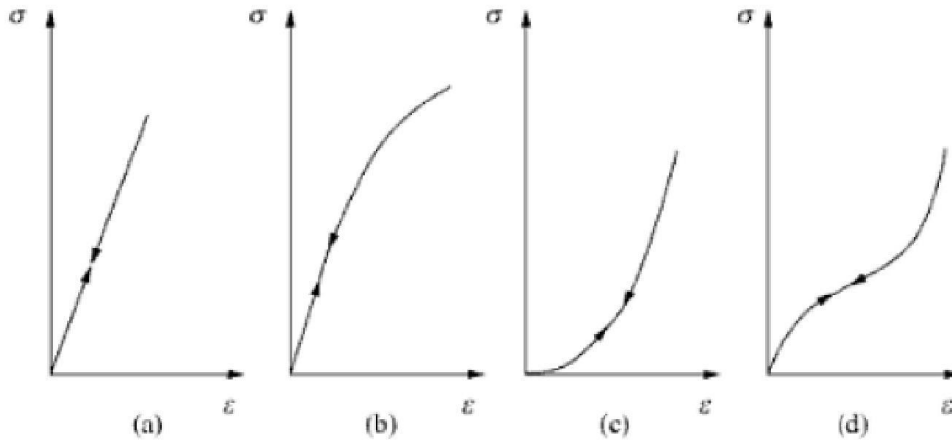


Figure I.16. Présentations des comportements élastiques.

Deux tenseurs d'ordre 2 peuvent être définis : le tenseur des contraintes σ_{ij} et le tenseur des déformations ε_{ij} . Ils sont tous les deux symétriques, c'est à dire que $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ et $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$.

Il existe une relation linéaire entre σ_{ij} et ε_{ij} , donnée par la loi de Hooke généralisée [20]

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{I.9})$$

c_{ijkl} est un tenseur d'ordre 4 appelé tenseur de rigidité élastique et il définit les constantes élastiques du matériau. Le nombre de combinaisons possibles de quatre indices $ijkl$ est de $3^4 = 81$ éléments. Dans le cas le plus général et par raison de symétrie de σ_{ij} et de ε_{kl} et en appliquant la relation de Maxwell $c_{ijkl} = c_{klij}$ [20], les éléments c_{ijkl} se réduisent à 21 éléments indépendants.

Les constantes c_{ijkl} sont donc notées par une nouvelle notation (notation de voigt), à savoir $C_{\alpha\beta}$ [19,23], telles que les indices ij ou kl sont abrégés en remplaçant chaque paire d'indices initialement quadruplés par un seul indice α ou β . Ainsi, les abréviations seront comme suit :

11 → 1 32 ou 23 → 4

22 → 2 31 ou 13 → 5

33 → 3 21 ou 12 → 6

Exemple :

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

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

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{12} \end{pmatrix} \tag{I.10}$$

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

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

I.9.3.5. Tenseur des constantes élastiques (Cristal à symétrie cubique)

Pour les cristaux de symétrie cubique, le tenseur des constantes élastiques se simplifie par symétrie [24] et prend la forme suivante :

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

Cubique (Contient 3 constantes indépendantes)

I.9.3.6. Compression uniforme: (module de compressibilité)

Compression uniforme veut dire que solide est soumis à une pression hydrostatique

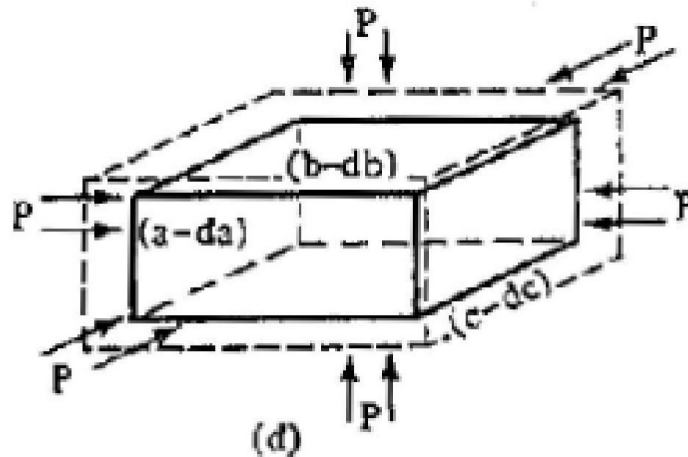


Figure I.17. Compression uniforme.

Le module de compressibilité B_s est la constante de proportionnalité entre la pression hydrostatique p et la variation relative de volume $\Delta = -\frac{\Delta V}{V}$ soit :

$$p = -B_s \Delta = -B_s \frac{\Delta V}{V} \quad (\text{I.13})$$

Le signe (-) indique que la pression et ΔV sont dans deux direction opposé. Le module de compressibilité B_s permet donc de décrire la réponse d'un solide à un changement de volume.

[25]

I.9.3.7. Cisaillement simple

Soit une tige prismatique fixée par une surface s_0 sur un support rigide, on applique sur la face opposée une force transversale F parallèle au plan xy .

La relation liant l'angle de cisaillement $\gamma = \frac{\Delta y}{z_0}$ et la contrainte de cisaillement $\tau = \frac{F}{s_0}$ est :

$$\tau = c' \tan(\gamma) \approx c' \gamma \quad (\text{I.14})$$

c' est le module de cisaillement.

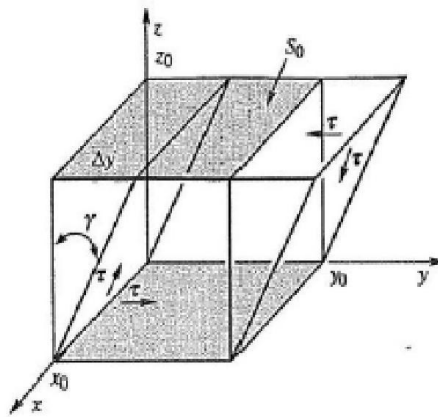


Figure I.18. L'angle de cisaillement et la contrainte de cisaillement.

I.9.3.8. Extension uni-axiale : (Module de Young)

Si on applique une force de traction F sur une éprouvette prismatique figure I.19. On constate :

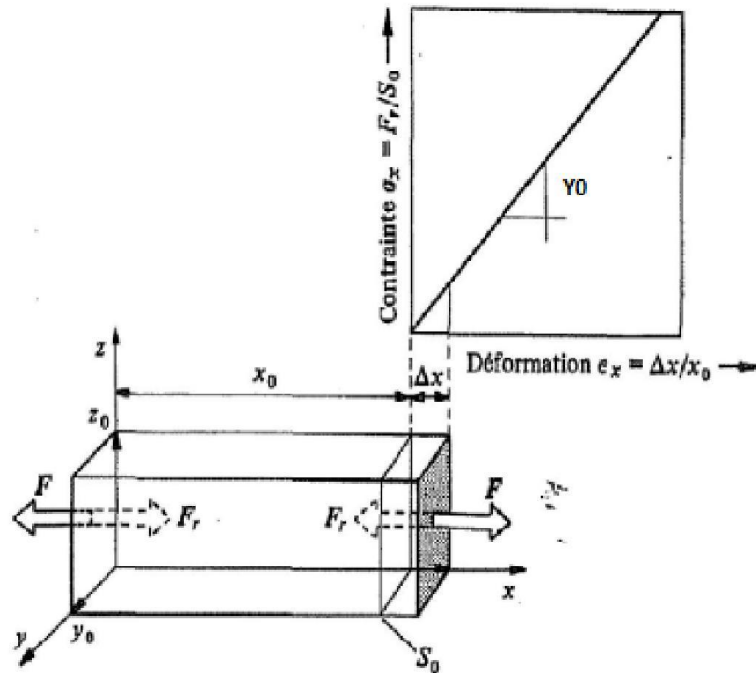


Figure. I.19. Allongement d'éprouvette.

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

$$\varepsilon_x = \frac{\Delta x}{x_0} \quad (\text{I.15})$$

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

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

$$\sigma_x = \frac{F_R}{S_0} = Y_0 \varepsilon_x \quad (\text{I.16})$$

Y_0 est le Module de Young ou d'élasticité caractérise la résistance du solide à la déformation uni axiale. Ce module dépend de : [26]

- L'énergie des liaisons entre atomes.
- La nature des forces élastiques de rappel.
- La structure du matériau (amorphe, cristallin).

I.9.3.9. Contraction latérale et coefficient de poisson

L'allongement x de l'éprouvette dans le sens de la traction est accompagné d'une augmentation de volume. Si la déformation est élastique il y a une compensation partielle de cette augmentation du volume par contraction latérale de l'éprouvette (Δy et Δz) suivant les directions perpendiculaires à la traction. Les déformations relatives dans les directions y et z

sont égaux pour un matériau isotropes et peuvent s'écrire sous la forme : [27]

$$\varepsilon_y = \frac{\Delta y}{y_0}, \varepsilon_z = \frac{\Delta z}{z_0} \quad (\text{I.17})$$

On définit le coefficient de Poisson comme suite :

$$\sigma_0 = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x}, -\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_x} \quad (\text{I.18})$$

I.9.3.10. Formules des modules d'élasticités pour les symétries cubiques

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

Pour la symétrie cubique les formules qui nous permet de calculer le module de cisaillement et de rigidité sont données par les relations suivantes : [28]

$$\left\{ \begin{array}{l} G_R = \frac{5(c_{11}-c_{12})c_{44}}{4c_{44}+3(c_{11}-c_{12})} \\ G_V = \frac{3c_{44}+c_{11}-c_{12}}{5} \end{array} \right. \quad (\text{I.19})$$

Ainsi le module de rigidité est :

$$B_S = \frac{c_{11}+2c_{12}}{3} \quad (\text{I.20})$$

Le module de cisaillement est :

$$c' = \frac{c_{11}+2c_{12}}{3} \quad (\text{I.21})$$

Le module de Young est :

$$Y_0 = \frac{(c_{11}+2c_{12})(c_{11}-c_{12})}{(c_{11}+c_{12})} \quad (\text{I.22})$$

Le coefficient de Poisson est :

$$\sigma_0 = \frac{c_{12}}{c_{11}+2c_{12}} \quad (\text{I.23})$$

I.9.3.11. Les conditions de stabilité mécanique

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

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

$$c_{11} > 0$$

$$c_{44} > 0$$

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

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

I.9.3.12. Le factor anisotropie

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

$$A = \frac{c_{11}-c_{12}}{2c_{44}} \quad (\text{I.24})$$

I.10.4. Propriétés mécaniques (micro-dureté) des matériaux III-V

La dureté d'un matériau définit la résistance qu'oppose une surface de l'échantillon à la pénétration d'un poinçon. S'il y résiste bien, il est dit dur, sinon il est dit mou. La dureté se mesure sur différentes échelles selon le type de matériau considéré. La micro-dureté est utilisée depuis longtemps pour caractériser le comportement mécanique des matériaux [29]. Elle est exprimée par la relation suivante:

$$H = 0.139G_V \quad (\text{I.25})$$

Avec:
$$G_V = \left(\frac{c_{44} + c_{11} - c_{12}}{5} \right) \quad (\text{I.26})$$

I.11. Les avantages des semi-conducteurs III-V

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

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

calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).

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

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz [29].

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium [30].

I.12.Applications

Ces propriétés singulières font en sorte que ces matériaux sont destinés à des applications technologiques variées telles que des dispositifs optoélectroniques pour les télécommunications et des cellules photovoltaïques.[31,32] Plus précisément, les dispositifs où ces alliages s'avèrent prometteurs sont les transistors bipolaires à hétérojonctions (HBT),[33] les photodiodes à avalanche (APD),[34] les lasers à émission de surface à cavité verticale (VCSEL), les photo-détecteurs à cavités résonantes (RCE) et les diodes électroluminescentes (LED).

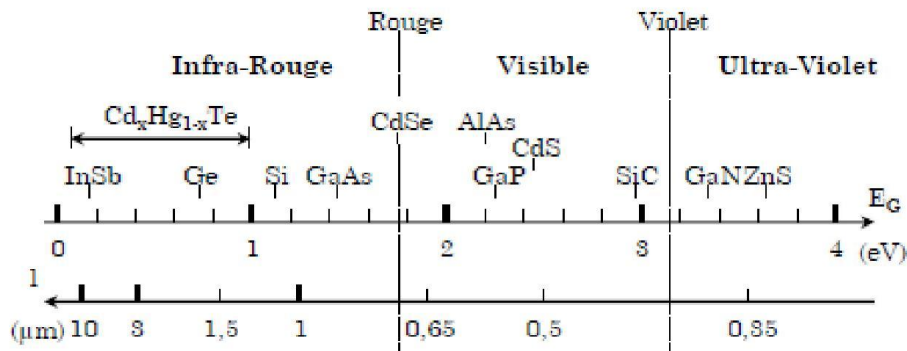


Figure I.20. Spectre optique des semi-conducteurs.

I.13. L'effet de la pression hydrostatique sur les semi conducteurs III-V

L'étude des matériaux sous l'effet des hautes pressions est l'un des nouveaux domaines de recherche dans la physique de l'état solide pour cela, un dispositif qui est la cellule à enclumes de diamant vient révolutionner le monde de la physique des matériaux par sa capacité de produire de très hautes pressions [35].

I.13.1. La technologie de la haute pression

Durant les dernières années, l'étude des matériaux sous haute pression est devenue un sujet extrêmement important jouant un accroissement explosif. Les cellules de l'enclume du diamant DAC (Diamond Anvil Cell) compriment des échantillons entre ces faces de petit (~ 1/3 carat) diamant de la qualité de la pierre précieuse [37].

Les avantages de la cellule du diamant incluent la capacité d'atteindre la plus haute pression (>150 GPa). Bien que les dimensions de l'échantillon comprimé soient assez petites, la cellule du diamant est convenue idéalement pour la caractérisation des matières à haute pression [36,37].

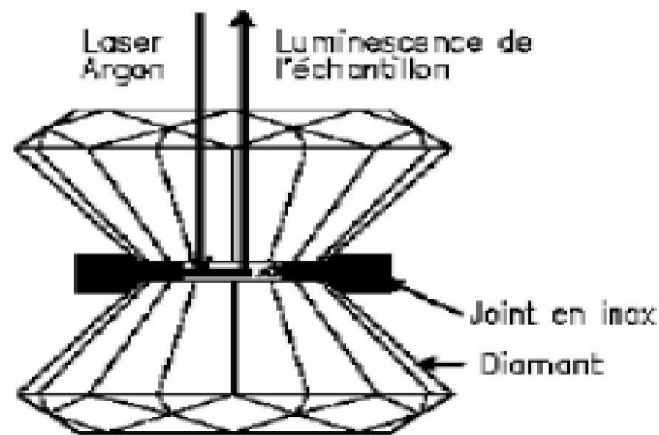


Figure I .21.Représentation de la cellule à enclumes de diamant.

I.13.2.L'effet de la pression sur la géométrie de la structure

La compressibilité d'un cristal s'accompagne par des modifications de la géométrie de la structure, cela apparaît comme suit :

Pour les substances fortement comprimés, il y'aura un rétrécissement des liaisons atomiques qui correspondent à une diminution de la taille des tétraèdres qui responsable à la réduction du volume, même pour les cristaux où l'empilement atomique n'est pas compact, la diminution du volume résulte d'une rotation des tétraèdres autours des sommets ou d'arrêts communes [38]. Lors de cette rotation, les distances entre un atome et ses plus proches voisins ne varient que très peu, mais les seconds voisins se rapprochent beaucoup plus.

I.13.3.L'effet de la pression sur les niveaux électroniques

L'application de la pression sur les semi-conducteurs 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 minima de ces bandes principalement dans les points de haute symétrie Γ , X et L dans le cristal [38], cette redistribution entraîne un élargissement des bandes et donc une augmentation des bandes interdites.

Références

- [1] A.CHOVET ,P.MASSON.Cours de Physique des Semi-conducteurs. Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille Département Micro-électronique et Télécommunications.
- [2] E. Mooser, « Introduction à la Physique du solide », 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [3] www.creea.u-bordeaux.fr/physique_technologie_composants_puissance.pdf.
- [4] T.L. Floyd « Electronique : Composants et systèmes d'application », Ed Reynald Gouletinc , (2004).
- [5] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, « Physique des solides », Ed EDP Science, France,(2002).
- [6] H. Mathieu, « Physique des semiconducteurs et des composants électronique », 4 Ed.Masson (1998).
- [7] R. Omnès, « Comprendre la mécanique quantique », Ed EDP sciences, France (1999).
- [8] K.BENATMANE, Thèse de Magister ‘ ‘ Etude de lasers à base de semi-conducteur III-V ’ ’ Université El-Hadj Lakhder – Batna(2011).
- [9] N.BAGHDADLI, Thèse de Magister ‘ ‘ ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS III-V A BASE DE GALIUM ’ ’. Université Abou-Bakr Belkaid –Tlemcen, (2010).
- [10] <http://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hemt/Hemtc1b.htm>
- [11] R.CASTAGNE, J.P.DUCHEMIN, M.GLOANEC, CH.RUMELHARD, « Circuits intégrés en GaAs », Paris, 1989.
- [12] P.KIREEV, « Physique des semi-conducteurs », Edition Mir, Moscou, 1975.
- [13] Francis Levy. Traité des matériaux (18).Physique et technologie des Semi-conducteurs. Presses polytechniques et universitaires Romandes(1995)
- [14] J.S . Blakemore. J.Appl.phys.53 (10) . (1982).
- [15] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/index.html>.
- [16] A.PHILIPPON-MARTIN, « Etude d'une nouvelle filière de composants sur technologie GaN : Conception et réalisation d'amplificateurs distribués de puissance large bande à cellule cascade en montage flip-chip et technologie MMIC », Docteur en Télécommunication, Université de Limoges, 2007.
- [17] O.BONNAUD, « physique des Solides, des Semi conducteurs et Dispositifs », juin 2003.
- [18] T.CHIHI, thèse Doctorat ‘ ‘Contribution à l'étude des nitrures à base de métaux de transition des groupes IV et V: phases stables et métastables’’. UNIVERSITE FERHAT ABBAS – SETIF.(2013).

- [19] E. Dieulesaint, D. Royer. Ondes élastiques dans les solides. Application au traitement du signal. Ed. Masson, Paris 6, 1974, 407 p.
- [20] A. Gicquel, Diamond and Related Materials, 20(7) (2011) 875
- [21] T. Ouisse; D. Chaussende; L. Auvray, J. Appl. Cryst., 43 (2010) 122
- [22] P. Navi Propriétés acoustiques des matériaux: Propagation des ondes planes harmoniques (2006).
- [23] P. Pavlov, A. Khokhlov. Physique du solide. Ed. Mir, Moscou, 1989, 416 p.
- [24] J. Nye, Propriétés Physiques des Cristaux (Edition Dunod, Paris, 1961).
- [25] Ahmed Gueddouh Thèse magister : Université de Laghouat 2009.
- [26] C. Kittel .Introduction a la physique de l'état solide, Dunode (1972)
- [27] K. B. Panda and K. S. R. Chandran, Acta Mater 54, (2006) 1641.
- [28] S.Adachi, Properties of Group-IV, III-V, and II-VI Semiconductors, Wiley, Chichester, 2005.
- [29] J.Zimmermann, thèse de doctorat d'état " Etude par la méthode Monté Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régime stationnaires et non stationnaire. Application à la simulation de composants submicroniques", université de l'île 1, (1980).
- [30] W.T.Anderson " simulation of Semiconductor Device failure Mechanisms", Naval research Laboratory, Washington. D. C, 2. Fraunhofer Institute, Freiburg, Germany (2003).
- [31] J.F. Geisz et D.J. Friedman, III-N-V semiconductors for solar photovoltaic applications, Semicond. Sci. and Technol. 17, (2002) 769.
- [32] Y. Zhang, A. Mascarenhas, S. K. Deb, H. P. Xin, et C. W. Tu, Heavily nitrogen-doped III-V semiconductors for high-efficiency solar cells, Proceedings of 28th IEEE Photovoltaic Specialists .Conference, 2001, p. 1189. IEE.
- [33] C.W. Tu, III-N-V low-bandgap nitrides and their device applications, J. Phys. Condens. Matter.13, (2001) 7169.
- [34] G.S. Kinsey, D.W. Gotthold, A.L.Holmes Jr., et J.C. Campbell, GaNAs resonant-cavity avalanche photodiode operating at 1.064 micron, Appl. Phys. Lett. 77, (2000) 1543.
- [35] N.Y.Aouinaa, F.Mezraga, M.Boucenna, M.El-Farrab, N.Bouarissa. ELSEVIER. 123 (2005)87-93.
- [36] N.Bouarissa, ELSEVIER.61(2000)109-114.
- [37] S.Saib, N.Bouarissa. ELSEVIER.50(2006)763-768.
- [38] N.Bouarissa. ELSEVIER.44(2000)2193-2198.

Chapitre II

La méthode du pseudo-potentiel

La méthode du pseudo-potentiel

II.1. Introduction

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

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

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

II.2. Formulation mathématique

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

La fonction d'onde de cristal est donné par :

$$\Psi = \Phi + \sum b_c \Phi_c \quad (\text{II-1})$$

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

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

Ce qui nous donne :

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

Avec :

Ψ est la fonction d'onde, elle satisfait l'équation de Schrödinger :

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

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

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

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

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

Où

V_R est le potentiel répulsif

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

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

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

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

Où $V_P = V_c + V_R$ est le pseudo-potentiel, la pseudo équation de Schrödinger est donné par :

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

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

L'équation (II-9) devient :

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

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

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

$$\Psi V_R \Psi = \sum_c (E^v - E^c) \left| \int dr \Psi^c^* \Psi \right|^2 \quad (\text{II-11})$$

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

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

$$V_R = V(r, r') = \sum_c (E - E_c) |\Phi(r)\rangle \langle \Phi_c(r) | \Phi \rangle \quad (\text{II-12})$$

Où la fonction Φ dépend de r .

Si on tient compte de l'effet du cœur, le pseudo-potentiel devient non local. L'expression non locale du pseudo-potentiel est réservée pour le moment angulaire, puisque V_R est la somme sur les états c occupés du cœur [21].

II.3. Les modèles du pseudo-potentiel

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

II.3.1. Le modèle local

Ce modèle est plus simple qui consiste en un potentiel local dépendant de la variable r , à cet effet plusieurs formes de potentiel ont été proposées.

Le premier modèle consiste en un potentiel de Coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région du cœur. La forme de ce potentiel est [9].

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ \frac{-Ze}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-13})$$

Où:

Z : est la valence atomique.

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

Heine et Abarenkov ont introduit un potentiel à considérer comme constant dans la région du cœur dans ce cas le potentiel est [10].

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

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

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

II.3.2. Le modèle non local

Le pseudo-potentiel est essentiellement non local et dépend de r et de l'énergie, il est donné par la forme suivante [12].

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

Où

A_l : Une fonction dépendante de l'énergie des états du cœur.

f_l : Une fonction qui représente l'effet des états du cœur.

P_l : L'opérateur projecteur de la 1^{ème} composante des moments angulaires.

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

II.3.2.1. Modèle de Heine-Abarenkov [13,14]

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

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

Où:

A^I : caractérise la profondeur du puits de potentiel carré.

$\Theta(R^I - r)$: est une fonction stimulant l'effet du cœur.

R^I : représente le rayon du cœur ionique.

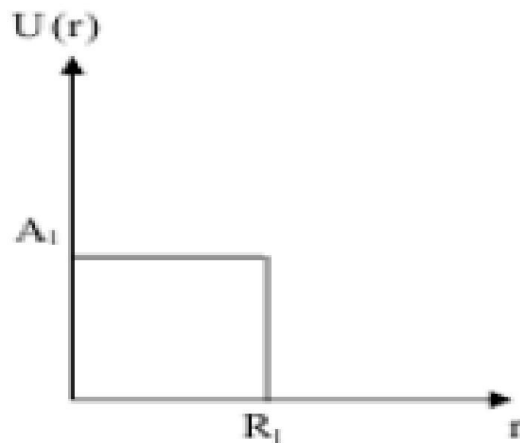


Figure II.1. Fonction de Heirne-Aberenkov

II.3.2.2. Le modèle de Gauss [15,16-17]

La fonction de Gauss est donnée par l'expression :

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

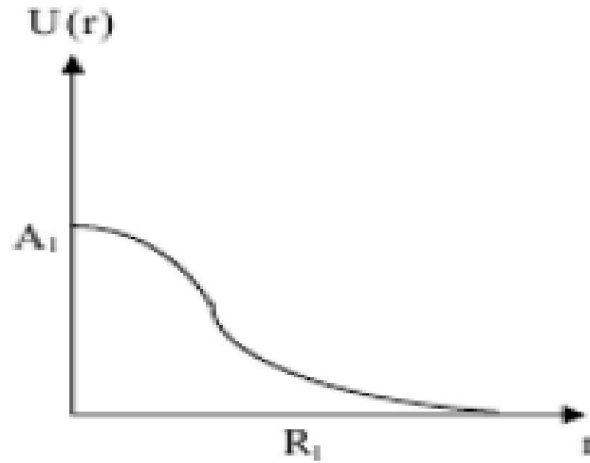


Figure II.2. Fonction de Gauss

II.3.2.3 Modèle d'Aschcroft [18,19]

Dans ce modèle : $F(r) = 0$ (II-19)

Cette dernière équation confirme que le potentiel répulsif dû à l'orthogonalisation de la fonction d'ondes des électrons de conduction sur les états du cœur, invalide le potentiel coulombien à l'intérieur du cœur ionique.

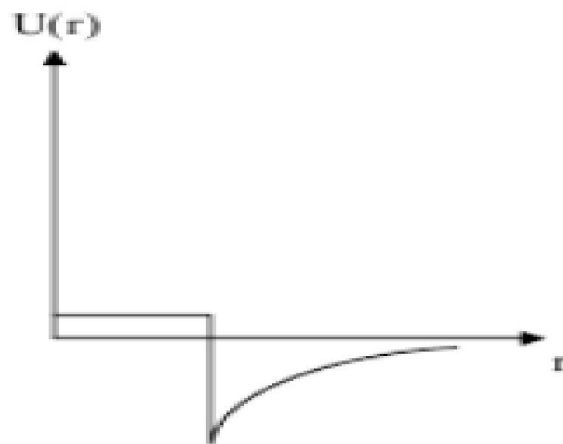


Figure II.3. Fonction d'Aschcroft

II.4. La méthode empirique de pseudo-potentiel local (EPM)

La méthode empirique des pseudo-potentiels est appliquée dans les semi-conducteurs diamants ou zinc blende, l'étude sur ces matériaux est basée sur une approximation locale [20]. Cette méthode est très importante dans les calculs de la structure des bandes électroniques [9].

La méthode empirique des pseudo-potentiels (EPM) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme empirique $V(G)$ du pseudo-potentiel $V_P(r)$ qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques [21], avec :

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

R est un vecteur du réseau direct, τ est le vecteur de translation du réseau direct.

Le potentiel $V_P(r)$ dans le réseau réciproque prend la forme suivante [22]

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

Avec

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

$V_\alpha(G)$ est le facteur de forme associé à α atomes.

$S_\alpha(G)$ est le facteur de structure pour les atomes du type α , il est donné par [23]

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

Dans le cas des composés $A^N B^{8-N}$ cristallisant dans la structure zinc blende les facteurs de forme symétriques et antisymétriques sont donnés par [24].

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

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

Avec :

V^S est le facteur de forme symétrique

V^A est le facteur de forme antisymétrique

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

Cette approximation se base sur l'interpolation des facteurs de forme à partir des expériences comme l'expérience de la réflectivité et pour la raison que le potentiel $V(G)$ soit plus faible pour les petites valeurs de G , on se limite à quelques facteurs de forme [23].

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

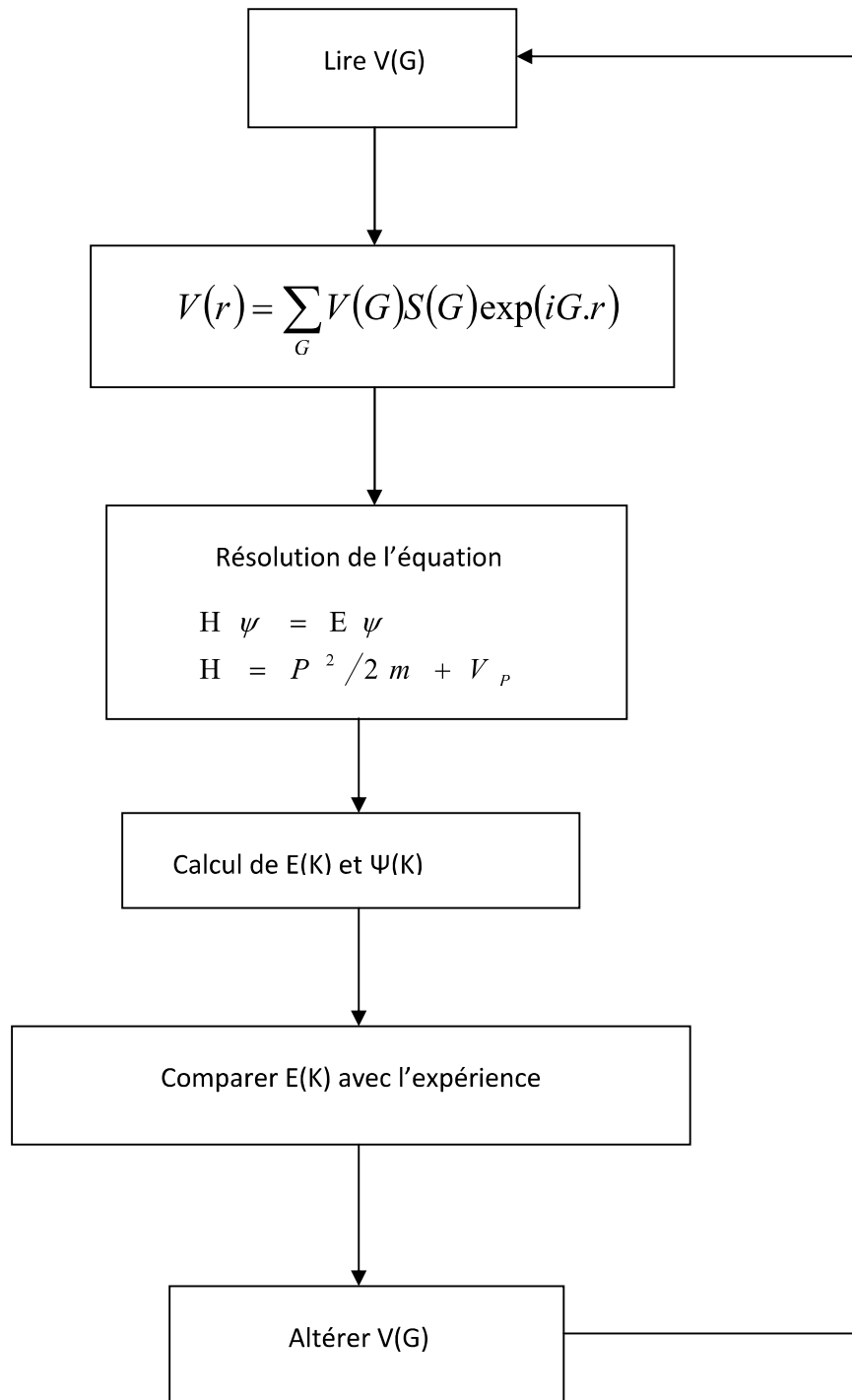


Figure. II.4. Digramme de la procédure de calcul par EPM

Références

- [1] R.M.Martin, Electric structure : Basic theory and practical methods Cambridge University Press, 2004.
- [2] R. D. Lide, CRC Handbook of chemistry and physics, 87th ed (2007).
- [3] J. C. Phillips, L. Kleinman, Phys. Rev. 116 (1959) 287.
- [4] J. C. Phillips. Phys. Rev. 112 (1958) 685.
- [5] F.D.Murnaghan. J.Wang. Proc.Natl.Acad.Sci.USA 300(1944)244.
- [6] J.Wang,S.Li,S.Yip,S.R.Phillpot,D.Wolf,phys.Rev.B 52 (1995).
- [7] T.Kobayasi,H.Nara,Bull.Coll.Med.Sci.,Tokoku.Univ. 2 (1993) 7.
- [8] A.Kan Garlu,phys.Rev.B 38 (1998) 9790.
- [9] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Berlin: Springer (1988).
- [10] J. C. Phillips and K. C. Pandey, Phys. Rev. Lett 30(1973)787.
- [11] T. Sona, J. Phys. Solid. Stat. Phys. 11 (1978) 2669.
- [12] C. S. Wang, B. M. Klein, Phys. Rev. B24, (1981) 3417.
- [13] I.V. Abarenkov, V. Heine, Phil. Mag. 13 (1965) 559.
- [14] M. L. Cohen and V. Heine, Solid State Physics 24, Eds, H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic press, New York) p37-248 (1970).
- [15] M. L. Cohen and V. Heine, Solid State Phys. 24 (1954).
- [16] M. Gell and al. Phys. Rev. B35, 1196 (1987).
- [17] H. Nara and A. Morita, J. Phys. Soc. Jpn. 21, 1852 (1966).
- [18] W. A. Harrison, « Pseudopotentials in theory of metals », Benjamin, New York (1966).
- [19] N. W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. 23, 48 (1966).
- [20] N.Bouarissa,R.Bachiri, physica B 322 (2002) 193.
- [21] S.Adachi, J.Appl.Phys. 61 (1987) 4869 and references cited therein.
- [22] P.Vogl, J.Phys.C11 (1978) 251.
- [23] J. M. Baranowski, J. Phys. C 17, 6287 (1984).

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

Chapitre III

RESULTATS ET DISCUSSION

Résultats et discussions

III .1.Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'essentiel de nos résultats de modélisation simulation des propriétés structurales et élastique avec les paramètres qui lui sont connexes de semi-conducteur binaire InSb sous pression hydrostatique .ces paramètres physiques ont été également calculé en utilisant la méthode empirique de pseudo-potentiel [1].

La configuration électronique de ce élément est comme suit:

In (1S₂ 2S₂ 2P₆ 3S₂ 3P₆ 3d₁₀ 4S₂ 4P₆ 4d₁₀ 5S₂ 5P₁)

Sb : (1S₂ 2S₂ 2P₆ 3S₂ 3P₆ 3d₁₀ 4S₂ 4P₆ 4d₁₀ 5S₂ 5P₃)

La représentation schématique de la structure de composé InSb est comme suit :

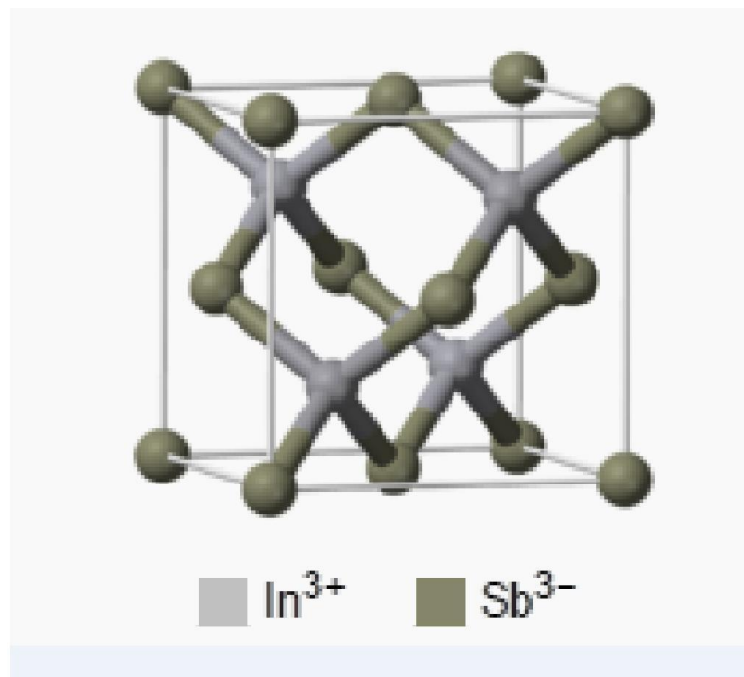


Figure. III.1. Représentation schématique de la structure de composé InSb

Dans le tableau (III.1) nous présentons les facteurs de formes de pseudo-potentiel local symétriques et antisymétriques ainsi que le paramètre du réseau du composé binaires semi-conducteur InSb dans la phase zinc blende.

Tableau III.1: Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) de matériau semi-conducteur InSb dans la phase zinc blende ainsi que la constante du réseau a en (unité atomique).

Pression (kbar)	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau (unité atomique)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
0	-0.20	0.01	0.028	0.06	0.03	0.02	12.26

Ces facteurs de formes sont utilisés pour le calcul des gaps d'énergies ainsi que d'autres propriétés de notre composée binaire InSb. Les gaps énergétiques du composé InSb dans la phase zinc blende utilisé dans l'ajustement sont présentés dans le tableau (III.2).

La figure III.2 représente la variation du facteur de forme symétrique $V_S(3)$ en fonction de la pression dans l'intervalle 0 à 20 kbar pour le semi-conducteur binaire InSb.

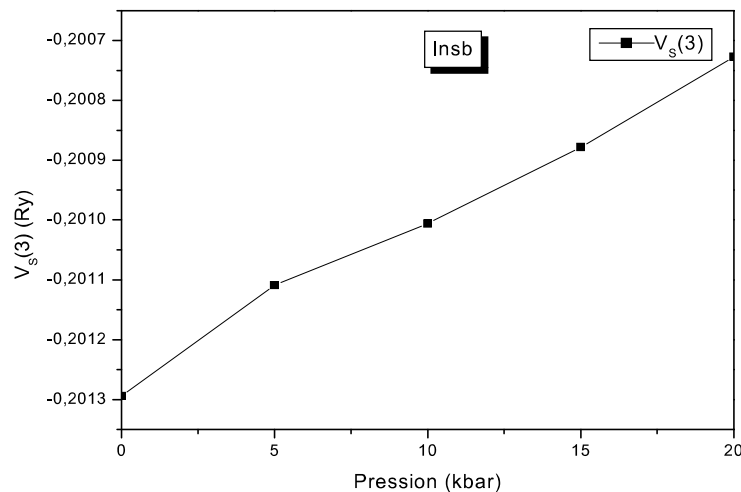


Figure III.2 Variation du facteur de forme $V_S(3)$ en fonction de la pression pour InSb.

On remarque que lorsqu'en augmente la pression en allons de 0 à 20 kbar le facteur de forme $V_S(3)$ augment aussi. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(3)$ en fonction de la pression donne la relation suivante:

$$V_S(3) = -0.20 + 2.98 \times 10^{-5}p - 1.23 \times 10^{-7}p^2 \quad (\text{III.1})$$

La figure III.3 représente la variation du facteur de forme symétrique $V_S(8)$ en fonction de la pression dans l'intervalle 0 à 20 kbar pour le semi-conducteur binaire InSb.

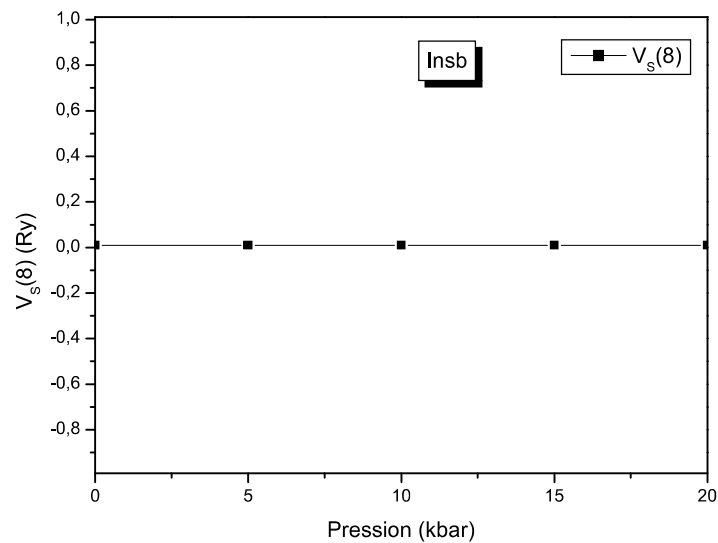


Figure III.3. Variation du facteur de forme $V_S(8)$ en fonction de la pression pour L'InSb.

La figure III.3 montre la variation du facteur de forme symétrique $V_S(8)$ en fonction de la pression pour l'InSb. on note qu'en augmentant la pression le facteur de forme $V_S(8)$ reste toujours constant à une valeur de (0.01 Ry). donc on peut dire que $V_S(8)$ est indépendant de la pression. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(8)$ en fonction de la pression donne la relation suivante:

$$V_S(8) = 0.01 \quad (\text{III.2})$$

La figure III.4 représente la variation du facteur de forme symétrique $V_S(11)$ en fonction de la pression dans l'intervalle 0 à 20 kbar pour le semi-conducteur binaire InSb.

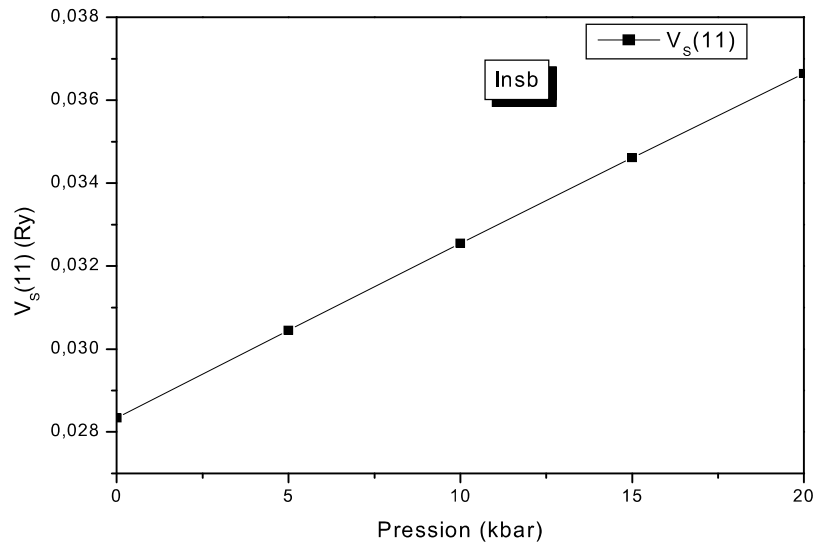


Figure III.4 Variation du facteur de forme $V_S(11)$ en fonction de la pression pour InSb.

On remarque que lorsque en augmente la pression en allons de 0 à 20 kbar le facteur de forme $V_S(11)$ augmente aussi. L'interpolation quadratique de nos données donne la relation suivante:

$$V_S(11) = 0.03 + 4.27 \times 10^{-4}p - 5.69 \times 10^{-7}p^2 \quad (\text{III.3})$$

La figure III.5 représente la variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(3)$ en fonction de la pression dans l'intervalle 0 à 20 kbar pour le semi-conducteur binaire InSb.

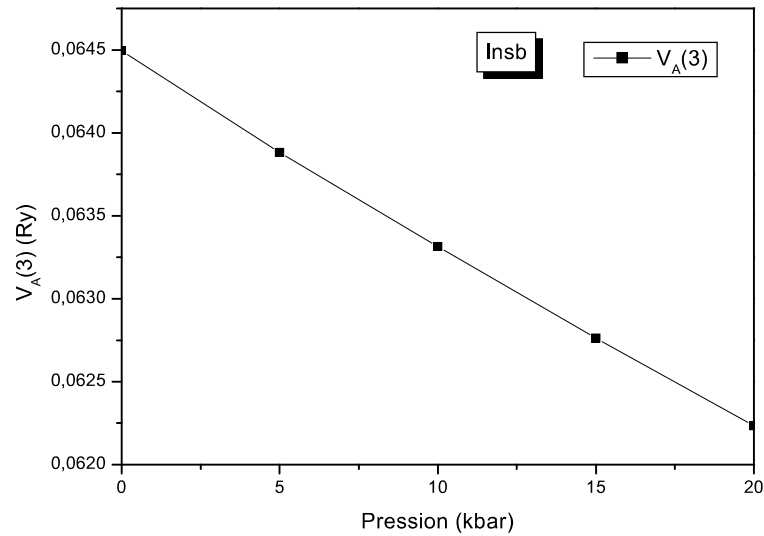


Figure III.5. Variation du facteur de forme $V_A(3)$ en fonction de la pression pour l'InSb.

La figure III.5 montre qu'en augmentant la pression le facteur de forme $V_A(3)$ diminue. Cette variation est monotone. L'interpolation quadratique de nos données de $V_A(3)$ donne la relation suivante:

$$V_A(3) = 0.06 - 1.23 \times 10^{-4}p + 5.23 \times 10^{-7}p^2 \quad (\text{III.4})$$

le terme quadratique de l'équation (III.4) confirme la liaison linéaire de $V_A(3)$ en fonction de la pression.

La figure III.6 représente la variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(4)$ en fonction de la pression dans l'intervalle 0 à 20 kbar pour le semi-conducteur binaire InSb.

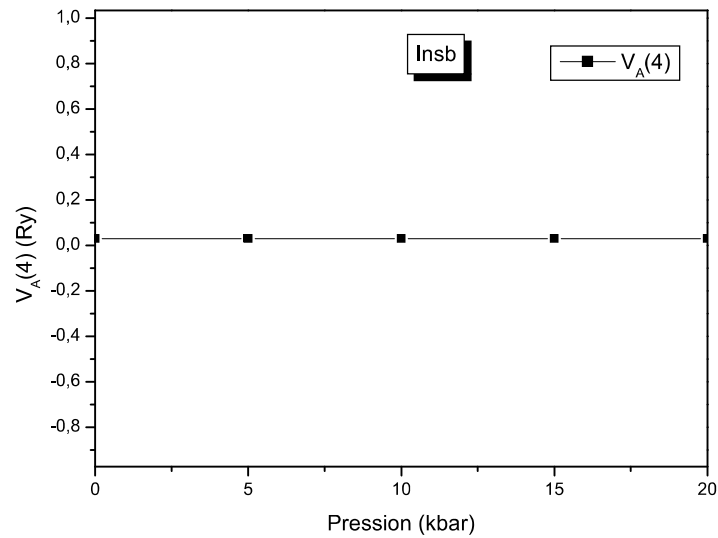


Figure III.6. Variation du facteur de forme $V_A(4)$ en fonction de la pression pour L'InSb.

La figure III.6 montre qu'en augmentant la pression le facteur de forme $V_A(4)$ reste toujours constant à une valeur de (0.03 Ry). L'interpolation quadratique de nos données de $V_A(4)$ donne la relation suivante:

$$V_A(4)=0.03 \quad (\text{III.5})$$

La figure III.7 représente la variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(11)$ en fonction de la pression dans l'intervalle 0 à 20 kbar pour le semi-conducteur binaire InSb.

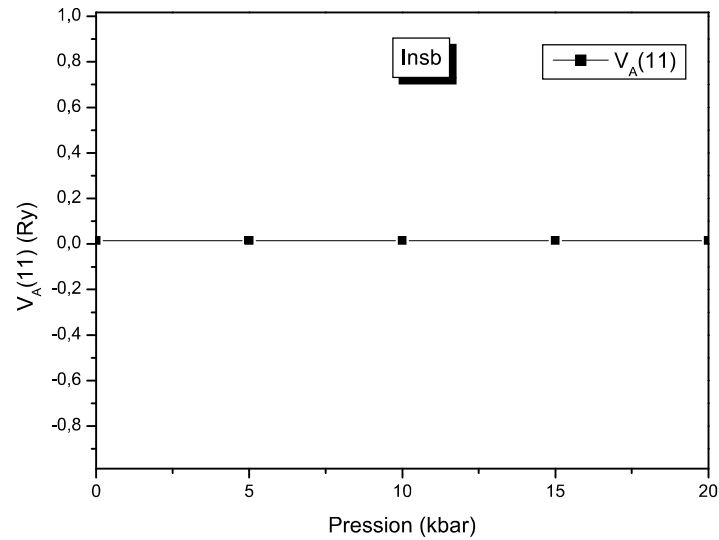


Figure III.7. Variation du facteur de forme $V_A(11)$ en fonction de la pression pour L'InSb.

La figure III.7 montre qu'en augmentant la pression le facteur de forme $V_A(11)$ reste toujours constant à une valeur de (0.015 Ry). L'interpolation quadratique de nos données de $V_A(11)$ donne la relation suivante:

$$V_A(11)=0.02 \quad (\text{III.6})$$

III .2. Propriétés structural

III .2.1.Paramètre du réseau

La figure III.8 représente la variation de paramètre du réseau en fonction de la pression pour l'InSb.

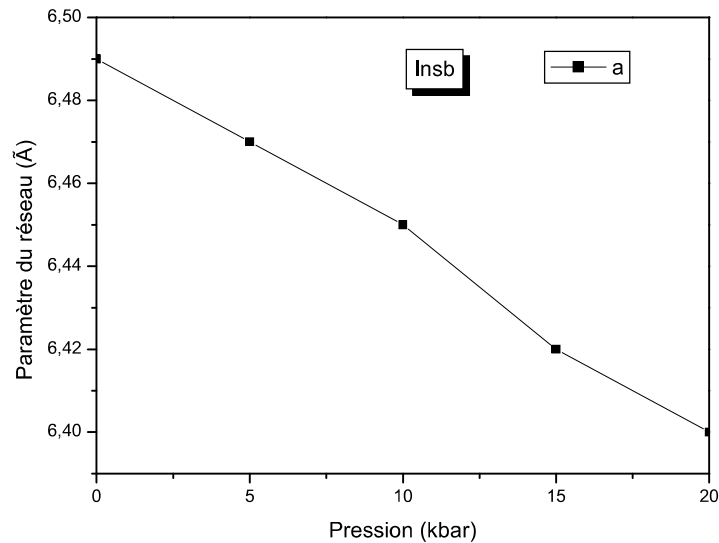


Figure III.8. Variation de paramètre du réseau en fonction de la pression pour l'InSb.

Figure III.8. Montre la variation de paramètre du réseau en fonction de la pression pour l'InSb. On note qu'en augmentant la pression le paramètre du réseau diminue le comportement est monotone. En effet, lorsque la pression augmente il se produit un chevauchement des nuages des électrons, ce qui entraîne une augmentation du nombre de charges qui migrent d'In à Sb.

Cela réduit la largeur de bande et diminue donc le paramètre de réseau. L'interpolation quadratique de nos données concernant le paramètre de réseau donne la relation suivante:

$$a = 6.49 - 0.04p - 2.86 \times 10^{-5}p^2 \quad (\text{III.7})$$

A partir de l'équation (III.7), on remarque que la variation de paramètre du réseau en fonction de la pression est presque linéaire. Cela est consistant avec les résultats reportés dans la référence.[2] .

III .2.2.La distance de liaison

La distance de liaison dans la structure zinc-blende des composés binaires semi-conducteurs diffère de manière significative dans la structure de celle des structures en

wurtzite [2]. dans la structure Zinc-blende il n'y a qu'un seul type de distance de premier voisin qui peut être exprimé par [3]

$$d(\text{In} - \text{Sb}) = \frac{\sqrt{3}}{4}a \quad (\text{III.8})$$

On utilisant l'équation (III.8), la distance de liaison pour l'InSb a été calculé pour différente pression .Nos résultats sont montrés sur la figure (III.9).

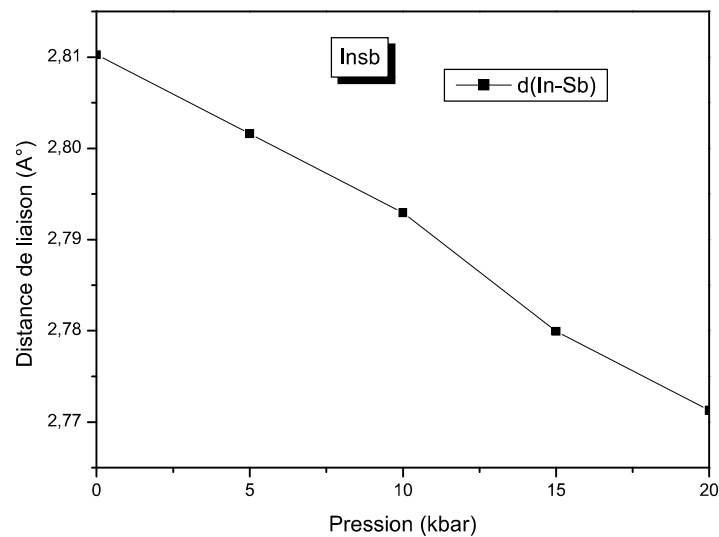


Figure III.9. Variation de distance de liaison en fonction de la pression pour l'InSb.

La figure III.9 montre qu'en augmentant la pression la distance de liaison diminue .ce comportement semble être monotone .En effet, la longueur de liaison et donc la force de liaison ont un effet sur l'énergie de clivage pour les plans de clivage observés expérimentalement [4].L'interpolation quadratique de nos données donne la relation suivante:

$$d(\text{In} - \text{Sb}) = 2.81 - 0.02p - 1.24 \times 10^{-5}p^2 \quad (\text{III.9})$$

A partir de cette équation, on peut conclure que la variation de distance de liaison en fonction de la pression dans l'intervalle 0 à 20 kbar est presque linéaire.

III.3. Propriétés électroniques

III.3.1. Gaps énergétiques

Tableau III .2 : Gaps énergétiques de composé zinc-blende InSb.

Composé	Gap d'énergie (eV)					
	E_{Γ}^{Γ}		E_{Γ}^X		E_{Γ}^L	
	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal
InSb	0.17 ^b	0.18 ^a	1.63 ^b	1.63 ^a	0.93 ^b	0.93 ^a

^a Nos calculs

^b Ref [5], [6]

A partir de ce tableau, on remarque que nos résultats qui sont en très bon accord avec l'expérience.

La Figure III.10 représente le gap d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} correspondant à la transition entre le minimum de la bande de valence et le maximum de la bande de conduction au centre de la zone de Brillouin pour l'InSb en fonction de la pression.

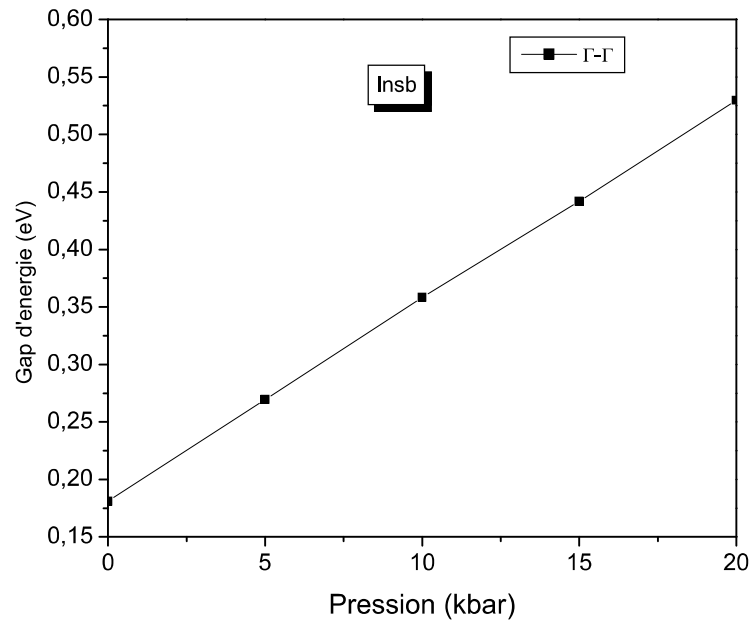


Figure III.10. Variation de gap d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression pour l'InSb.

On remarque que lorsqu'on augmente la pression le gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} augmente aussi. Le comportement est monotone et Presque linéaire. L'interpolation quadratique de nos données concernant E_{Γ}^{Γ} donne la relation suivante:

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 0.18 + 0.02p - 1.84 \times 10^{-5}p^2 \quad (\text{III.10})$$

Le terme quadratique de l'équation (III.10) confirme la linéarité de E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression.

La Figure III.11 montre la variation du gap d'énergie indirect E_{Γ}^{X} correspondant à la transition entre le minimum de la bande de valence au point de haut symétrie Γ dans la zone de brillouin et le maximum de la bande de conduction au point de haut symétrie X.

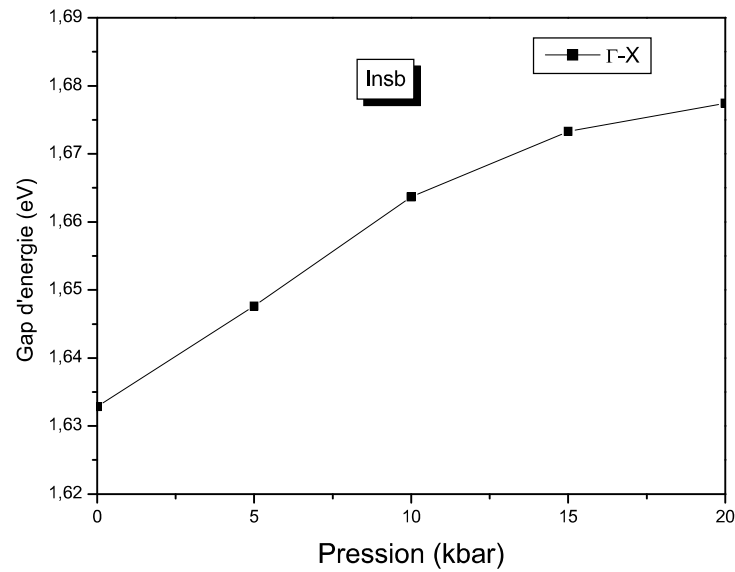


Figure III.11. Variation de gap d'énergie indirect E_{Γ}^X en fonction de la pression pour l'InSb.

La figure III.11 montre qu'en augmentant la pression le gap d'énergie E_{Γ}^X augmente aussi d'une façon monotone. L'interpolation quadratique de nos données concernant E_{Γ}^X donne la relation suivante:

$$E_{\Gamma}^X = 1.63 + 0.01p - 7.92 \times 10^{-5}p^2 \quad (\text{III.11})$$

A partir de l'équation (III.11) on peut dire que la variation de E_{Γ}^X est presque linéaire .

La figure III.12 illustre la variation du gap d'énergie indirect E_{Γ}^L qui correspondant à la transition entre le minimum de la bande de valence au point de haut symétrie Γ dans la zone de Brillouin et le maximum de la bande de conduction au point de haut symétrie L.

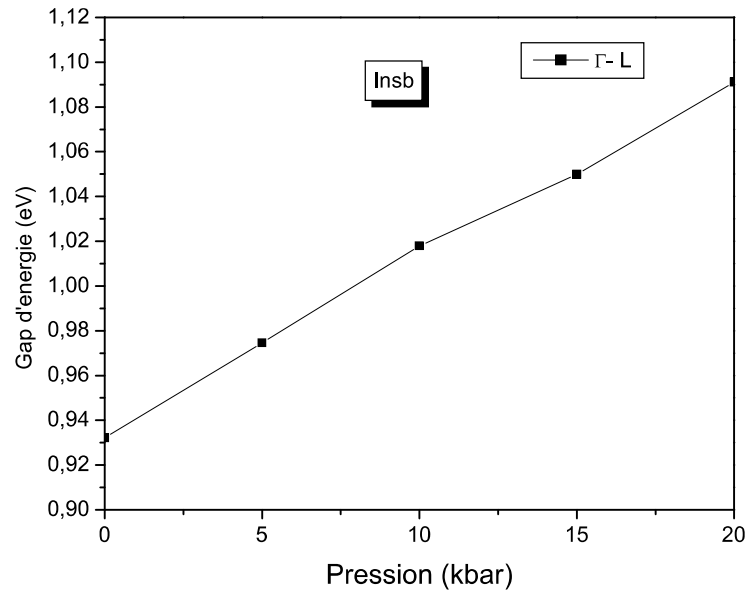


Figure III.12 . Variation de gap d'énergie indirect E_F^L en fonction de la pression pour l'InSb.

La figure III.12 montre qu'en augmentant la pression le gap d'énergie indirect E_F^L augmente aussi. Donc le même comportement a été observé pour les gaps direct et indirect de l'InSb sous l'effet de la pression. L'interpolation quadratique de nos données concernant E_F^L donne la relation suivante:

$$E_F^L = 0.93 + 0.01p - 3.96 \times 10^{-5}p^2 \quad (\text{III.12})$$

D'après l'équation (III.12) on remarque que la variation de E_F^L en fonction de la pression est aussi presque linéaire.

La Figure III.13 représente les variations de gap d'énergie direct E_F^Γ et indirect E_F^X , E_F^L en fonction de la pression pour l'InSb.

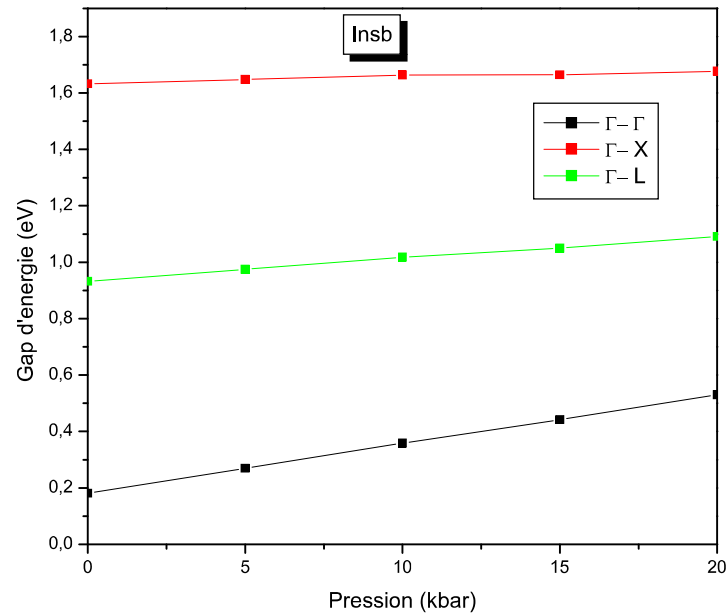


Figure III.13. Variation de gap d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} et indirect E_{Γ}^X , E_{Γ}^L en fonction de la pression pour l'InSb.

Afin de voir s'il y'a une transition de gap pour l'InSb sous pression dans l'intervalle 0-20 kbar, nous avons tracé les trois gap énergétiques en fonction de la pression sur la même figure, figure (III.12). On note que lorsque on augmente la pression les trois gaps d'énergies augmentent sans interaction indiquant qu'il y'a pas de transition de gap (il n'y'a pas de croisement entre les gaps énergétiques direct et indirecte). Cela veut dire que le semi-conducteur d'intérêt reste toujours un semi conducteur a gap direct dans l'intervalle de pression [0,20] kbar.

III.4. Propriétés élastiques

III.4.1. Constants élastiques

Les propriétés élastiques des matériaux semi-conducteurs sont très importantes pour la compréhension de beaucoup de leurs propriétés fondamentales pour les cristaux qui possèdent des éléments de symétrie, ce qui est exactement le cas des cristaux cubiques, le nombre des constants élastiques réduit et devient trois, a c_{11} , c_{12} et c_{44} .

Les constantes élastiques (C_{ij}) évaluées pour l'InSb à pression nulle sont portées dans le tableau III.3. Les résultats expérimentaux rapportés dans la littérature sont aussi présentés à titre de comparaison. Nos résultats semblent être en raisonnable accord avec ceux de l'expérience.

Les constantes élastiques C_{11} et C_{12} ont été calculé en se basant sur le modèle bouarissa [7], ou C_{11} et C_{12} sont exprimées par :

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5m} \hbar^2 (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} [4.37(5 + \lambda)(1 - \alpha_p^2) - 0.6075] \quad \text{III.13}$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5m} \hbar^2 (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} [4.37(3 - \lambda)(1 - \alpha_p^2) + 0.6075] \quad \text{III.14}$$

Ou m est la masse de l'électron et d est la distance entre les plus proches voisins, tel que: $d = \frac{\sqrt{3}a}{4}$, α_p^2 est la polarité, $\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)}$

λ est un paramètre sans dimension qui a une valeur de 0.738 [8].

La constante élastique C_{44} a été déterminée on utilisant suivante, qui a été obtenue du modèle de champ de la force de valence [9,10]

$$C_{44} = \frac{3(c_{11}+2c_{12})(c_{11}-c_{12})}{7c_{11}+c_{12}} \quad \text{III.15}$$

Tableau III.3 : Constants élastiques (C_{ij}) de InSb dans la phase zinc-blende à pression nulle.

Pression (kbar)	C_{11} (GPa)		C_{12} (GPa)		C_{44} (GPa)	
	EXP	Cal	EXP	Cal	EXP	Cal
0	66.08 ^b	62.60 ^a	35.31 ^b	27.10 ^a	30.27 ^b	25.26 ^a

^a Nos calculs

^b Ref [3]

A partir de ce tableau,

➤ on remarque que nos résultats sont en bon accord avec l'expérience.

- La valeur de C_{11} est grande par rapport à celles de C_{12} et C_{44} signifie que ce composé est plus résistant à la compression unidirectionnelle qu'à la déformation de cisaillement.

La variation de la constante élastique indépendante C_{11} en fonction de la pression hydrostatique du composé InSb est montrée sur la figure (III.14).

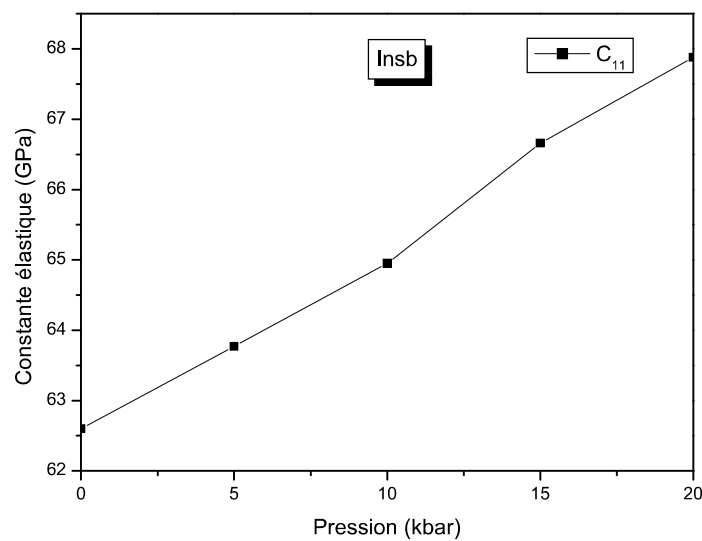


Figure III.14. Variation de la constante élastique C_{11} en fonction de la pression pour l'InSb.

La figure III.14 montre qu'en augmentant la pression à 20 kbar la constante élastique C_{11} augmente aussi. Son comportement est monotone. L'interpolation quadratique de nos données concernant C_{11} donne la relation suivante:

$$C_{11} = 62.57 + 0.2p + 0.002p^2 \quad (\text{III.16})$$

Le terme quadratique de l'équation (III.16) indique que C_{11} présente un comportement presque linéaire.

La variation de la constante élastique indépendante C_{12} en fonction de la pression hydrostatique du composé semi-conducteur InSb est montrée sur la figure (III.15).

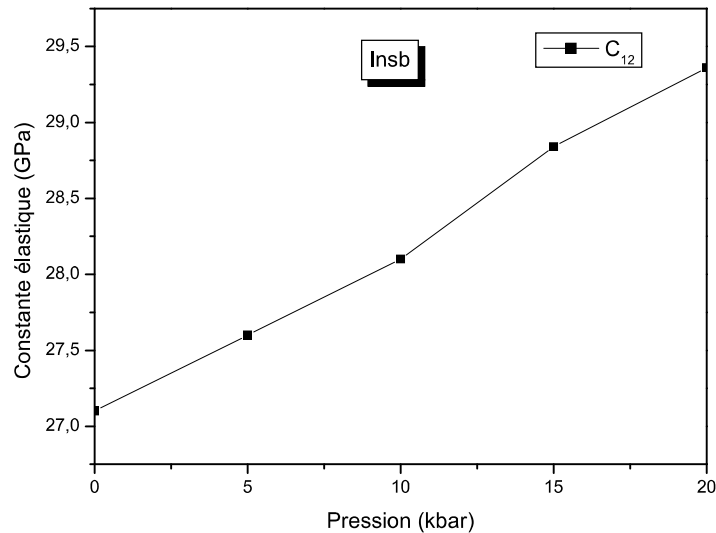


Figure III.15. Variation de la constante élastique C_{12} en fonction de la pression pour l'InSb.

La figure III.15 montre qu'en augmentant la pression à 20 kbar la constante élastique C_{12} augmente aussi. Son comportement est monotone. L'interpolation quadratique de nos données concernant C_{12} donne la relation suivante:

$$C_{12} = 27.09 + 0.1p + 8 \times 10^{-4}p^2 \quad (\text{III.17})$$

Le terme quadratique de l'équation (III.17) indique que C_{12} varie d'une façon presque linéaire par rapport à la pression.

La figure (III.16) représente la variation de la constante élastique C_{44} en fonction de la pression hydrostatique à 20 kbar. Notez qu'en augmentant la pression à 20 kbar la constante élastique C_{44} augmente aussi. Le comportement est également monotone. L'interpolation quadratique de nos données concernant C_{44} donne la relation suivante:

$$C_{44} = 25.25 + 0.1p + 7 \times 10^{-4}p^2 \quad (\text{III.18})$$

Le terme quadratique de l'équation (III.18) indique aussi que la variation de C_{44} par rapport à la pression est presque linéaire.

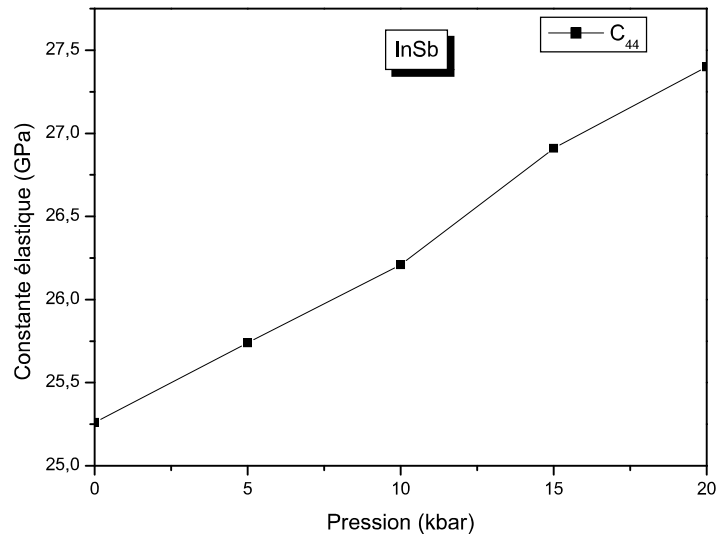


Figure III.16 .Variation de la constante élastique C_{44} en fonction de la pression pour l'InSb.

La figure (III.17) montre la variation des constantes élastique C_{ij} en fonction de la pression hydrostatique à 20 kabr. On remarque que le comportement de tous les C_{ij} 's par rapport à pression est monotone. Néanmoins, le taux de variation de la pression dans C_{11} semble être plus important que ceux de C_{12} et C_{44} .Ceci est généralement compatible avec le comportement de pression de C_{ij} 's indiqué pour le composé tétraédrique semi-conducteur [2].

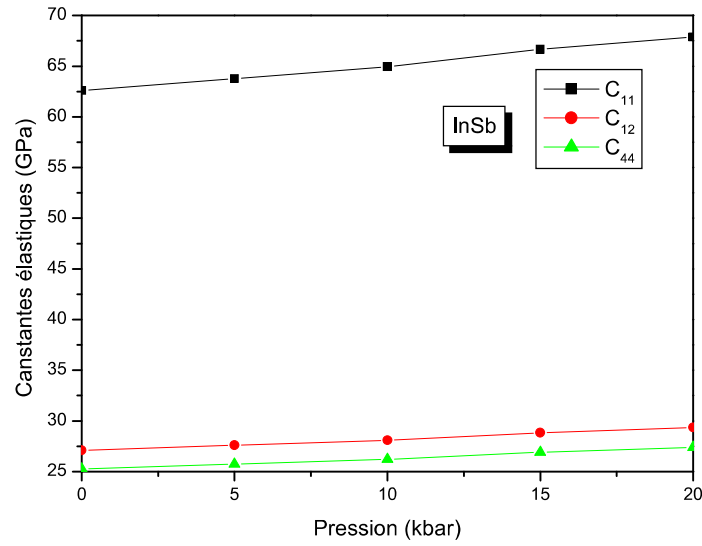


Figure III.17. Variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} en fonction de la pression pour l'InSb.

La connaissance de C_{ij} 's a permis de vérifier la stabilité mécanique de InSb dans la plage de pression 0-20 kbar en utilisant les critères de stabilité élastique généralisés.

$$K = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + p) > 0 \quad (\text{III.19})$$

$$G = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12} - 2p) > 0 \quad (\text{III.20})$$

$$G' = (C_{44} - p) > 0 \quad (\text{III.21})$$

Selon nos résultats, tous ces critères sont satisfaits pour toutes les pressions d'intérêt. Cela suggère que l'InSb est mécaniquement stable pour toutes les pressions comprises entre 0 et 20 kbar.

III .4.2.Paramètres élastiques

III .4.2.1.Module de compressibilité

La compressibilité B_G est une caractéristique d'un corps quantifiant sa variation relative de volume sous l'effet d'une pression appliquée, Un corps ne peut être stable que si son volume diminue lorsque la pression augmente.

Le module de compressibilité B_S est un paramètre important qui donne une mesure de sa dureté. Pour les cristaux cubiques, on peut généralement obtenir du B_S au moyen de l'expression [11]

$$B_S = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3} \quad (\text{III.22})$$

A pression zéro, notre valeur calculé de B_S est 38.933 GPa cette valeur est en bon accord avec celle de l'expérience qui de 45.6 GPa (voire tableau III .4).

La variation du module de compressibilité (B_S) en fonction de la pression est présenté sur la figure (III.18). On note qu'en augmentant la pression à 20 kbar le module de compressibilité augmente aussi. Cela veut dire que le semi-conducteur d'intérêt devient plus rigide sous pression. L'interpolation quadratique de nos données donne la relation suivante:

$$B_S = 38.92 + 0.1p + 0.001p^2 \quad (\text{III.23})$$

Le terme quadratique de l'expression (III.23) est faible, indiquent que le comportement de B_S est presque linéaire.

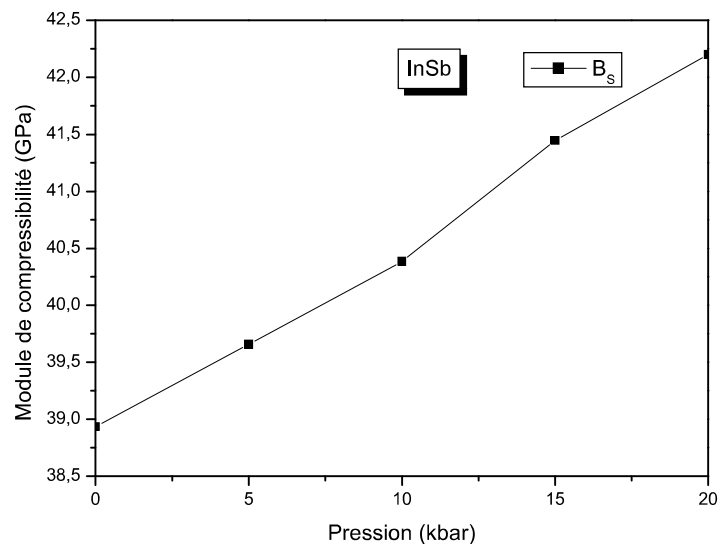


Figure III.18. Variation de module de compressibilité en fonction de la pression pour l'InSb.

III .4.2.2. Module de cisaillement

Le module de cisaillement est une grandeur physique intrinsèque à chaque matériau et qui intervient dans la caractérisation des déformations causées par des efforts de cisaillement, et appelé c' dans le présent document, le dernier peut être obtenue à partir de la connaissance des constantes élastiques C_{11} et C_{12} en utilisant la relation suivante [12]

$$C' = \frac{(C_{11}-C_{12})}{2} \quad (\text{III.24})$$

A pression zéro, notre valeur calculé de C' est 17.75 GPa cette valeur est raisonnable accord avec celle de l'expérience qui de 15.4GPa (voire tableau tableau III .4).

La variation du module de cisaillement (C') en fonction de la pression est montré sur la figure (III.19). On remarque qu'en augmentant la pression le module de cisaillement augmente aussi.

Cela indique que lors de la compression, l'InSb devient plus résistant aux déformations transversales. L'interpolation quadratique de nos données concernant C' donne la relation suivante:

$$C' = 17.74 + 0.07p + 5 \times 10^{-4}p^2 \quad (\text{III.25})$$

Le terme quadratique de l'équation (III.25) suggère un comportement est presque linéaire de C' en fonction de la pression.

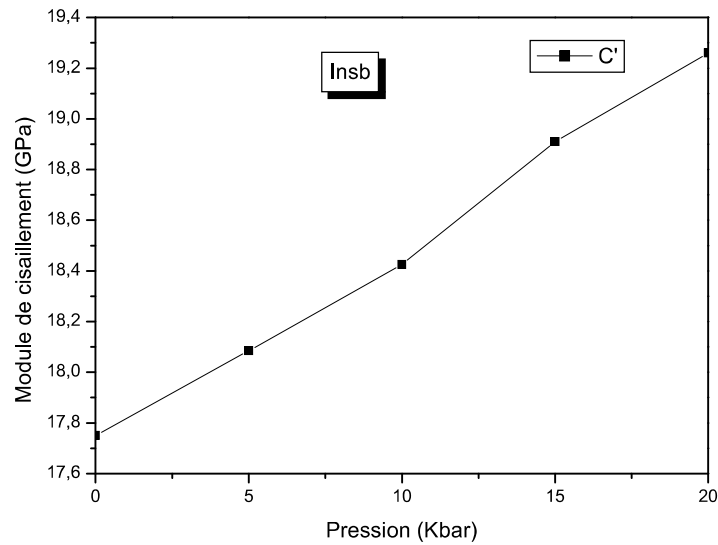


Figure III.19. Variation de module de cisaillement en fonction de la pression pour l'InSb.

III .4.2.3. Module de Young

Le module de Young est la constante qui relie la contrainte de compression et le début de la déformation d'un matériau élastique isotrope. En utilisant la relation suivante:

$$Y_0 = \frac{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}{(C_{11}+C_{12})} \quad (\text{III.26})$$

A pression zéro, notre valeur calculé de Y_0 est 46.225 GPa cette valeur est raisonnable accord avec celle de l'expérience qui de 41.5 GPa (voire tableau III .4).

La figure (III.20) présente la variation du module de Young (Y_0) en fonction de la pression. On note qu'en augmentant la pression à 20 kbar le module de Young augmente aussi. L'interpolation quadratique de nos données concernant Y_0 donne la relation suivante:

$$Y_0 = 46.20 + 0.17p + 0.001p^2 \quad (\text{III.27})$$

Encore une fois, Le terme quadratique de l'équation (III.27) suggère une variation presque linéaire de Y_0 en fonction de la pression.

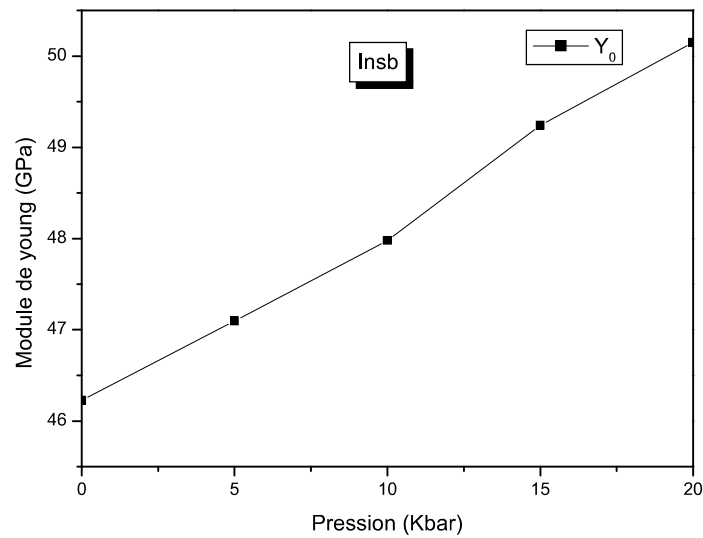


Figure III.20. Variation de module de Young en fonction de la pression pour l'InSb.

Tableau. III.4. Module de compressibilité (B_S), module de cisaillement (C'), module de young (Y_0) de zinc-blende pour le composé semi-conducteur InSb.

Pression (kbar)	B_S (GPa)		C' (GPa)		Y_0 (GPa)	
	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal
0	45.60 ^b	38.93 ^a	15.40 ^b	17.75 ^a	41.5 ^b	46.23 ^a

^a Nos calculs

^b Ref [3]

Ce tableau montre nos résultats sont en bon accord avec l'expérience.

III.4.2.4. Coefficient de Poisson

Le coefficient de Poisson permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué. Il est exprimé par la relation suivante:

$$\sigma_0 = \frac{C_{12}}{C_{11} + 2C_{12}} \quad (\text{III.28})$$

A pression zéro, notre valeur calculé de σ_0 est 2.32 cette valeur est raisonnable accord avec celle de l'expérience qui de 3.48 (voire tableau III .5).

La figure (III.21) montre la variation du coefficient de Poisson (σ_0) en fonction de la pression pour le composé semi-conducteur InSb. On note que lorsque la pression augmente à 20 kbar, le coefficient de Poisson σ_0 diminue d'une façon monotone.

En outre, on peut déduire que l'augmentation de pression peut modifier les liaisons chimiques de notre composé InSb qui ne sont pas purement covalente.

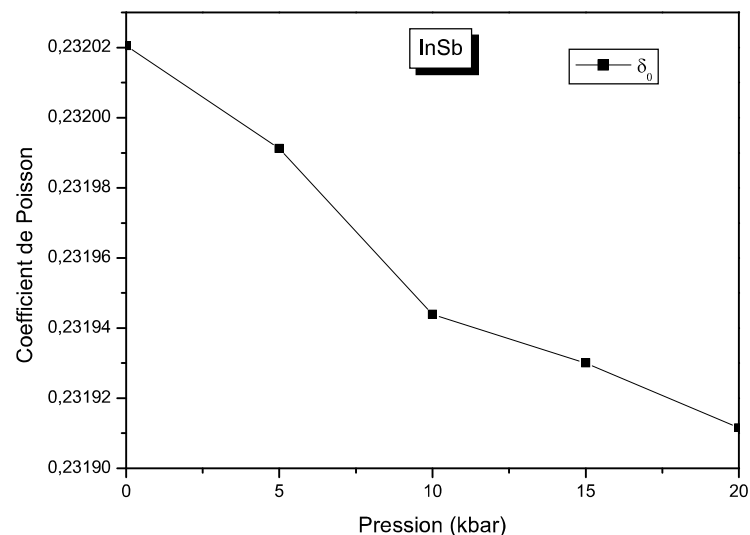


Figure III.21 .Variation de coefficient de Poisson en fonction de la pression pour l'InSb.

le coefficient de poisson a été utilisé par Farnetsevich et al. [13] ,pour faire la distinction entre la ductilité et la fragilité des matériaux .La règle de Farnetsevich est:

- si la valeur de σ_0 est inférieure à 0,33, le matériau d'intérêt est considéré se comporter de manière fragile.
- si la valeur de σ_0 est supérieur à 0,33, le matériau d'intérêt est considéré se comporter de manière ductile.

Dans nos calculs on a trouve $\sigma_0 = 0.23$; $0.23 < 0.33$

Donc on peut conclure que l'InSb se comporter de manière fragile. L'interpolation quadratique de nos données concernant σ_0 donne la relation suivante:

$$\sigma_0 = 0.23 - 8.74 \times 10^{-6} + 1.58 \times 10^{-7} p^2 \quad (\text{III.29})$$

Le terme quadratique de l'équation(III.29) indique que σ_0 varie linéairement avec la pression.

III.4.2.5.Fraction d'anisotropie

L'anisotropie élastique est la propriété mécanique de l'être dépendant de la direction. Le facteur d'anisotropie (A) est un paramètre mécanique utile lié aux constantes élastiques dans les cristaux cubiques [12].

$$A = \frac{c_{11}-c_{12}}{2c_{44}} \quad (\text{III.30})$$

A pression zéro, notre valeur calculé de A est 7.03 cette valeur est raisonnable accord avec celle de l'expérience qui de 5.08 (voire tableau III .5).

La variation du facteur d'anisotropie (A) en fonction de la pression pour l'InSb est montré sur la figure(III.22).on remarque qu'en augmentant la pression, la fraction d'anisotropie reste toujours constant à une valeur donnée de (0.70). En effet, un matériau semi-conducteur isotrope doit avoir $A = 1$. Par conséquent, le degré d'anisotropie élastique dépend de la déviation de A par rapport à 1.Le matériau d'intérêt est donc caractérisé par une anisotropie de cisaillement à pression nulle .en fonction de la compression hydrostatique jusqu'à 20 Kbar, la variation de A s'avère très faible (négligeable).Ceci suggère que le degré d'anisotropie dans le matériau en question reste

presque identique lorsque la pression est appliquée. L'interpolation quadratique de nos données concernant A, donne la relation suivante:

$$A = 0.7 \quad (\text{III.31})$$

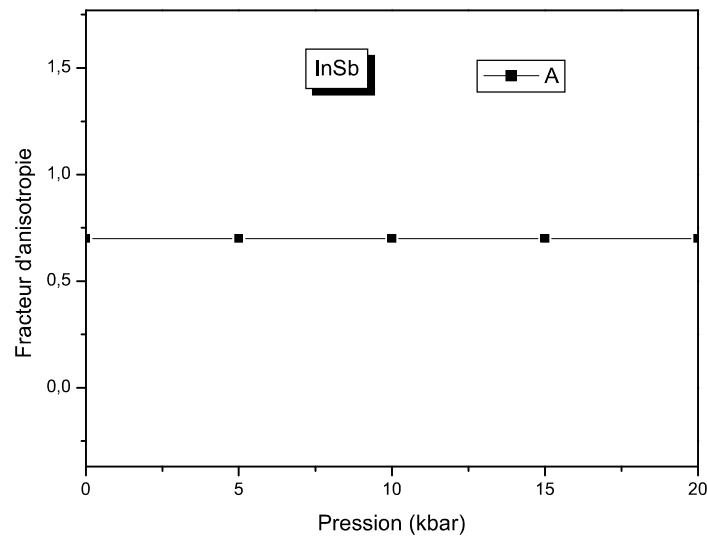


Figure III.22. Variation de la fraction d'anisotropie en fonction de la pression pour l'InSb.

III .4.2.6.Micro-dureté

La micro-dureté est utilisée depuis longtemps pour caractériser le comportement mécanique des matériaux [3]. Elle est exprimée par la relation suivante:

$$H = 0.139G_V \quad (\text{III.32})$$

Avec:
$$G_V = \left(\frac{C_{44} + C_{11} - C_{12}}{5} \right) \quad (\text{III.33})$$

A pression zéro, notre valeur calculé de H est 3.09 GPa cette valeur est raisonnable accord avec celle de l'expérience qui de 2.93 GPa (voire tableau III .5).

On utilise les équations (III.32) et (III.33), la variation de micro dureté H en fonction de la pression est présenté sur la figure (III.21).on remarque qu'en augmentant la pression à 20 kbar la micro dureté de l'InSb augmente aussi. le comportement semble être monotone .Cela indique que, lors de la compression, la dureté du composé semi-

conducteur InSb devient meilleure, ce qui réduit l'effet nuisible sur les performances opérationnelles des dislocations et la dégradation induite pendant la fabrication du dispositif. L'interpolation quadratique de nos données de H donne la relation suivante:

$$H = 3.09 + 0.01p + 8.74 \times 10^{-5}p^2 \quad (\text{III.34})$$

A partir de terme quadratique de l'équation (III.34), on peut déduire que le comportement de H par rapport à la pression est linéaire.

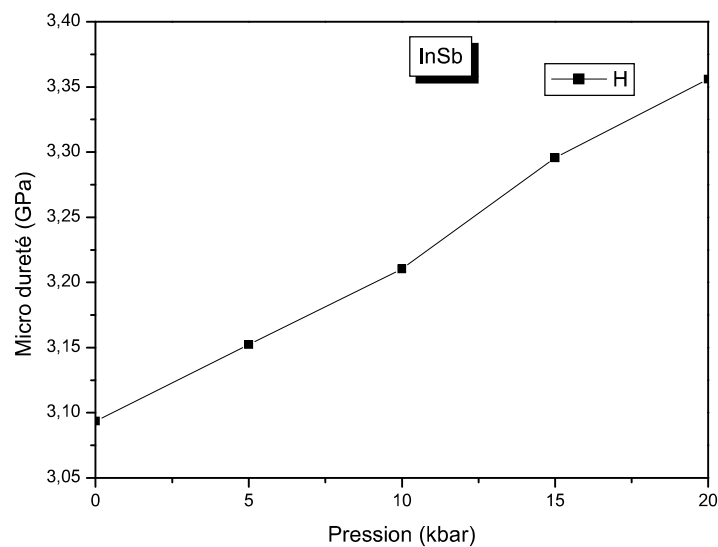


Figure III.23. Variation de la micro dureté en fonction de la pression pour l'InSb.

Tableau III.5. Coefficient de poisson (σ_0), facteur d'anisotropie (A), et micro-dureté (H) de zinc-blende pour le composé semi-conducteur InSb.

Pression (kbar)	σ_0		A		H (GPa)	
	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal
0	3.48 ^b	2.32 ^a	5.08 ^b	7.03 ^a	2.93 ^b	3.09 ^a

^aNos calculs

^bRef [3]

Ce tableau montre que nos résultats sont en raisonnable accord avec l'expérience.

Références

- [1] M.L. Colien, J.R. Chelikowsky, Electric structure and optical properties of semiconductor, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [2] N. Bouarissa, S. Saib, M. Boucenna, F. Mezrag, ELSEVIER, xxx(2018)xxx-xxx.
- [3] S. Adachi, Properties of Group-IV, III-V, and II-VI Semiconductors, Wiley, Chichester, 2005
- [4] M.A. Berding, S. Krishnamurthy, A. Sher, A.-B. Chen, J. Appl. Phys. 67(1990)6175.
- [5] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [6] S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI
- [7] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. 65 (2000) 107.
- [8] S. Aouadi, Thèse doctorat, Université de Anaba, Calcul ab initio des propriétés structurales, Élastiques, Électroniques, Optiques et dynamiques des semi-conducteurs III-V à base de phosphore, (2009).
- [9] N. Bouarissa, Master. Chem. Phys. 100(2006)41.
- [10] J. M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287.
- [11] H. Algarni, O. A. Al-Hagan, N. Bouarissa, T. F. Alhuwaymel & M. Ajmal Khan
- [12] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, and M. Shur (Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol.2, World Scientific, Singapore, 1999.
- [13] I.N. Frantsevich, F.F. Voronov, S.A. Bocuta, in : I.N. Frantsevich (Ed), Elastic constants and Elastic Moduli of Metals and Insulators Handbook, Naukova Dumka, Kiev, 1983, pp.60-180.

CONCLUSION
GENERALE

Au cours de ce travail, nous avons étudié quelques propriétés fondamentales à savoir, structurales et élastiques du composé InSb sous pression hydrostatique dans l'intervalle [0-20] kbar. Les calculs ont été effectués par la méthode du pseudo-potentielle empirique (E.PM).

Le but de ce travail est l'investigation de l'effet de la pression hydrostatique sur les propriétés fondamentales du composé semi-conducteur InSb.

Nos résultats concernant les propriétés structurales tels que la distance de liaison ($d_{\text{In-Sb}}=2.81$) obtenus par l'EPM sont en accord avec les valeurs de la littérature. L'étude des structures de bandes électroniques nous a permis de conclure que le gap est direct pour InSb. Il faut noter que la valeur du gap énergétique obtenue par la méthode de pseudo-potential, ($E_g = 0.18$) concordent mieux avec les données de la littérature.

On a évalué les propriétés élastiques tel que les constants élastiques ($C_{11}=62.6$, $C_{12}=27.1$, $C_{44}=25.26$), et les paramètres élastiques (module d'Young Y_0 ($Y_0=46.225$), coefficient de Poisson σ_0 ($\sigma_0=2.32$), le module de compressibilité B_S ($B_S=38.993$) et le module de cisaillement C ($C=17.75$), facteur d'anisotropie A ($A=7.03$) et la micro-dureté H ($H=3.09$) en se basant essentiellement sur la méthode de pseudo-potential. Nos résultats ont montrés que le composé InSb est stable mécaniquement, résistant beaucoup plus à la compression unidirectionnelle et la déformation de cisaillement, qu'il est anisotrope et fragile.

Liste des figures

N°	Titre	Page
Figure .I.1	Différents matériaux	4
Figure .I.2	L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium).	5
Figure .I.3	Semi conducteur intrinsèque	6
Figure .I.4	Silicium dopé au Phosphore. a) $k=0k$ et b) $k \neq 0k$	7
Figure .I.5	Structure de bande énergétique relative	7
Figure .I.6	Silicium dopé au Bore. a) $k = 0k$ et b) $k \neq 0k$	8
Figure .I.7	Structure de bande énergétique relative	8
Figure .I.8	Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux.	9
Figure .I.9	Semi-conducteur a gap direct et indirect	10
Figure .I.10	Mailles cristallographiques de la structure Zinc Blende.	13
Figure .I.11	Structure Zinc Blende en projection sur un plan formé par une des faces du cube.	13
Figure .I.12	Première zone de Brillouin d'un cristal "Zinc Blende"	15
Figure .I.13	Première zone de Brillouin d'un cristal " Wurtzite	15
Figure .I.14	Structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin	16
Figure .I.15	Les composantes du tenseur des contraintes.	19
Figure .I.16	Présentations des comportements élastiques.	20
Figure .I.17	Compression uniforme.	22

Figure .I.18	L'angle de cisaillement et la contrainte de cisaillement.	23
Figure. I.19	Allongement d'éprouvette.	24
Figure. I.20	spectre optique des semi-conducteurs.	27
Figure. I.21	Représentation de la cellule à enclumes de diamant.	28
Figure. II.1	Fonction de Heirne-Aberenkov	36
Figure. II.2	Fonction de Gauss	37
Figure. II.3	Fonction d'Aschcroft	3
Figure. II.4	Digramme de la procédure de calcul par EPM	40
Figure. III.1	Représentation schématique de la structure de composé InSb	43
Figure. III.2	Variation du facteur de forme $V_S(3)$ en fonction de la pression pour l'Insb.	44
Figure. III.3	Variation du facteur de forme $V_S(8)$ en fonction de la pression pour L'Insb.	45
Figure. III.4	Variation du facteur de forme $V_S(11)$ en fonction de la pression pour l'Insb.	46
Figure. III.5	Variation du facteur de forme $V_A(3)$ en fonction de la pression pour l'Insb.	47

Figure. III.6	Variation du facteur de forme $V_A(4)$ en fonction de la pression pour L'Insb.	48
Figure. III.7	Variation du facteur de forme $V_A(11)$ en fonction de la pression pour L'Insb.	49
Figure. III.8	Variation de paramètre du réseau en fonction de la pression pour l'InSb.	50
Figure. III.9	Variation de distance de liaison en fonction de la pression pour L'InSb.	51
Figure. III.10	Variation de gap d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression pour l'InSb.	53
Figure. III.11	Variation de gap d'énergie indirect E_{Γ}^X en fonction de la pression pour l'InSb.	54
Figure. III.12	Variation de gap d'énergie indirect E_{Γ}^L en fonction de la pression pour l'InSb.	55
Figure. III.13	Variation de gap d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} et indirect E_{Γ}^X , E_{Γ}^L en fonction de la pression pour l'InSb.	56
Figure. III.14	Variation de la constante élastique C_{11} en fonction de la pression pour l'InSb.	58
Figure. III.15	Variation de la constante élastique C_{12} en fonction de la pression pour l'InSb.	59
Figure. III.16	Variation de la constante élastique C_{44} en fonction de la pression pour l'InSb.	60
Figure. III.17	Variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} en fonction de la pression pour l'InSb.	61
Figure. III.18	Variation de module de compressibilité en fonction de la pression pour l'InSb.	62
Figure. III.19	Variation de module de cisaillement en fonction de la pression pour l'InSb.	64

Figure. III.20	Variation de module de young en fonction de la pression pour l'InSb.	65
Figure. III.21	Variation de coefficient de Poisson en fonction de la pression pour l'InSb.	66
Figure. III.22	Variation de la fraction d'anisotropie en fonction de la pression pour l'InSb.	68
Figure. III.23	Variation de la micro dureté en fonction de la pression pour l'InSb.	69

Liste des tableaux

N°	Titre	Page
Tableau. I.1	Représente un exemple de largeur de bande interdite .	10
Tableau. I.2	Extrait de la classification périodique des éléments.	11
Tableau. I.3	Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300°K.	12
Tableau. III.1	Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) de matériau semi-conducteur InSb dans la phase zinc blende ainsi que la constante du réseau a en (unité atomique).	44
Tableau. III.2	Gaps énergétiques de composé zinc-blende InSb.	52
Tableau. III.3	Constants élastiques (C_{ij}) de l' InSb dans la phase zinc-blende à pression nulle .	57
Tableau. III.4	Module de compressibilité (B_S), module de cisaillement (C'), module de young (Y_0) de zinc-blende pour le composé semi-conducteur InSb.	65
Tableau. III.5	Coefficient de poisson (σ_0), facteur d'anisotropie (A), et micro-dureté (H) de zinc-blende pour le composé semi-conducteur InSb.	69

Abstract

In this work we report on some fundamental properties, namely the structural, elastic and microhardness for InSb at normal and under high hydrostatic pressure in the range 0-20 kbar. The aim of the work is to show to what extent the hydrostatic pressure can affect the properties of interest. For that purpose a pseudo potential approach has been employed. Our results show generally a good accord with available data in the literature. The mechanical stability criteria are fulfilled suggesting that InSb is mechanically stable in the studied pressure range. The effect of pressure is found to increase the resistance to the deflection or deformation. Moreover, it increases the microhardness of the semiconductor in question.

Résumé

Dans ce travail, nous décrivons les mêmes propriétés fondamentales, à savoir les propriétés structurelles, élastiques et micro-dureté pour InSb à la pression atmosphérique normale et élevée, dans la plage de 0 à 20 kbar. Les auteurs doivent indiquer dans quelle mesure la pression hydrostatique peut affecter les propriétés d'intérêt. Pour ce faire, une approche pseudo-potentiel a été utilisée. Nos résultats sont généralement en bon accord avec les données disponibles dans la littérature. Les critères de stabilité mécanique sont remplis suggérant qu'InSb est mécaniquement stable dans la plage de pression étudiée. L'effet de la pression est censé augmenter la résistance à la déflexion ou à la déformation. En outre, il augmente la micro-dureté du semi conducteur en question.

تلخيص

في هذا العمل ، نقوم بوصف بعض الخصائص الأساسية ، وهي البنية الهيكلية والمرنة والمتناهية الصغر لـ InSb بشكل طبيعي وتحت ضغط هيدروستاتيكي عالٍ في النطاق من 0 إلى 20 كيلو بار. الهدف من العمل هو إظهار إلى أي مدى يمكن أن يؤثر الضغط الهيدروستاتيكي على الخصائص المدروسة. لهذا الغرض ، تم استخدام نهج شبه الكمون. تظهر نتائجنا بشكل عام توافقاً جيداً مع البيانات المتاحة في الأدبيات. تم استيفاء معايير الثبات الميكانيكي بالكامل مما يوحي بأن InSb مستقر ميكانيكياً في نطاق الضغط المدروس. تأثير الضغط مغرم لزيادة مقاومة الانحراف أو التشوه. علاوة على ذلك ، فإنه يزيد من صلادة شبه الموصل المدروس.