

# Université Mohamed Boudiaf - M'sila

FACULTÉ DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Numéro de série :.....

Numéro d'inscription : D.PHM/3C/02/17



## Thèse

Présentée pour l'obtention du diplôme de

**DOCTORAT 3<sup>ème</sup> cycle :**

**Spécialité :** Physique des Matériaux

**Option :** Physique des Matériaux

**THEME**

**Étude théorique de la structure de bandes électroniques et ses propriétés dérivées des semiconducteurs nanostructurés**

**Présenté Par**

LAKHAL Lynda

Nom & Prénom	Grade	Etablissement	Qualité
Hiba AZZEDDINE	Professeur	Univ. de M'sila	Présidente
Fadila MEZRAG	Professeur	Univ. de M'sila	Directrice de thèse
Ahmed GUEDDIM	Professeur	Univ. de Djelfa	Examineur
Kamel KASSALI	Professeur	Univ. de sétif	Examineur
Abdelmadjid BOUSSENDEL	Maître de conférences A	Univ. de M'sila	Examineur
Nadir BOUARISSA	Professeur	Univ. de M'sila	Invité

## **Remerciements**

*J'adresse mes remerciements et ma reconnaissance à ma directrice de thèse, professeur Fadila MEZRAG, pour ses efforts scientifiques et ses avis qui ont enrichi ma recherche afin qu'elle apparaisse sous sa forme actuelle malgré les conditions de travail difficiles.*

*J'adresse mes remerciements les plus chaleureux au professeur Nadir BOUARISSA qui nous a honoré en acceptant notre invitation d'être membre de ce jury, Je suis reconnaissante pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs.*

*Je tiens également à remercier Professeur Hiba AZZEDDINE d'être président de ce jury, Je remercie aussi très vivement Professeur Ahmed GUEDDIM de l'université de Djelfa, Professeur Kamel KASSALI de l'université de Sétif et Docteur Abdelmadjid BOUSSENDEL de l'université de M'sila, d'avoir accepté d'examiner ce travail, afin de l'enrichir de leurs précieux conseils.*

## **Dédicace**

*Aux personnes les plus proches de mon cœur, ma chère mère  
A ceux qui m'ont aidée et facilité mes difficultés, mon cher époux  
A mes fleurs et mon âme, mes chères filles Wafa, Souha, Noursine*

**Table des matières**

Remerciement.....i

Dédicace.....ii

Table des matières..... iii

Introduction générale..... 1

**Chapitre 1: Généralités sur les Semiconducteurs**

1 -1 Introduction ..... 3

1-2 Définition d'un semiconducteur..... 3

1-3 Différent types de semiconducteurs.....4

    1-3-1 Semiconducteur intrinsèque.....4

    1-3-2 Semiconducteur extrinsèque (dopés N et P) .....4

1-4 Les composés semiconducteurs .....6

    1-4-1 Les composés semi-conducteurs III-V .....6

    1-4-2 Les composés semiconducteurs II-VI .....6

    1-4-3 Les composés semiconducteurs IV-VI .....7

1-5 Les propriétés physiques des semiconducteurs .....7

    1-5-1 Les propriétés structurales des semiconducteurs.....8

        1-5-1-1 Structure cristalline .....8

        1-5-1-2 Paramètre de réseau .....9

    1-5-2 Les propriétés électroniques des semiconducteurs.....10

        1-5-2-1 Structure électronique .....10

        1-5-2-2 Notion de bandes d'énergie .....11

        1-5-2-3 Gap direct et gap indirect .....11

    1-5-3 Les propriétés optiques des semiconducteurs .....12

        1-5-3-1 L'indice de réfraction.....13

        1-5-3-2 Constante diélectrique .....13

1-6 La méthode empirique du pseudopotentiel (l'EPM) .....14

    1-6-1 L'approximation empirique locale.....14

1-7 Les applications des semiconducteurs.....16

    1-7-1 Diodes électroluminescentes (LED).....16

    1-7-2 Les transistors.....16

    1-7-3 Les circuits intégrés.....16

1-7-4 Les lasers.....	16
1-7-5 Les capteurs.....	17
1-7-6 Les mémoires.....	17
1-7-7 Photodétecteurs.....	17
1-7-8 Cellule photoconductrice .....	17
1-8 Conclusion.....	18
<b>Chapitre 2: Nanomatériaux et effet du confinement quantique</b>	
2-1 Introduction.....	19
2-2 Définitions.....	19
2-2-1 Nanotechnologie.....	19
2-2-2 Nanomatériaux.....	20
2-2-3 Nano-objets.....	21
2-2-4 Nanoparticules.....	22
2-3 Nanocristal .....	23
2-4 Les applications potentielles des nanocristaux.....	24
2-5 Différents types des nanomatériaux .....	24
2-5-1 Matériaux nanochargés ou nanorenforcés .....	25
2-5-2 Matériaux nanostructurés en surface .....	25
2-5-3 Matériaux nanostructurés en volume .....	25
2-6 Nanomatériaux semiconducteurs .....	25
2-7 Le confinement quantique.....	26
2-7-1 Puits, fils et boîtes quantiques.....	26
2-7-2 Excitons en points quantiques .....	27
2-8 Modélisation de l'effet quantique de taille.....	28
2-8-1 Modélisation.....	28
2-8-2 Effet sur les propriétés électroniques.....	29
2-8-3 Effet sur les propriétés optiques.....	30
2-9 Méthode d'élaboration.....	31
2-10 Applications des nanomatériaux semiconducteurs .....	33
2-11 Conclusion .....	33
<b>Chapitre 3: Résultats et discussion</b>	
3 -1 Introduction .....	34
3-2 Etude des propriétés électroniques .....	35
3-2-1 Méthode de la masse effective.....	38

3-2-2 Les Transitions du gap énergétique.....	44
3-3 Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction).....	50
3-4 Etude des propriétés diélectriques .....	58
3-4-1 Constante diélectrique de haute fréquence ( $\epsilon_{\infty}$ ).....	58
3-5 Propriétés physiques du GaSb à l'échelle nanométrique.....	64
3-5-1 Structure de bande du GaSb.....	64
3-5-2 Gap d'énergie.....	65
3-5-3 Masse effective.....	67
3-5-4 L'indice de réfraction.....	69
3-5-5 La constante diélectrique.....	70
3-6 Semiconducteurs II-VI.....	71
3-6-1 Méthode de la masse effective.....	72
3-6-2 Les Transitions du gap énergétique.....	75
3-2-3 Etude des propriétés optiques.....	81
3-2-3-1 L'indice de réfraction.....	81
3-5-3 Étude des propriétés diélectriques.....	87
3-5-3-1 La constante diélectrique de haute fréquence $\epsilon_{\infty}$ .....	87
3-7 Conclusion.....	92
Conclusion générale.....	93
Références bibliographiques.....	95
Liste des figures et liste des tableaux	
Résumé	

## Introduction Générale

## **Introduction générale**

Les semi-conducteurs sont des matériaux d'une grande importance en raison de leurs propriétés physiques spécifiques, ce qui suscite un vif intérêt dans les domaines fondamentaux et appliqués. Leur rôle essentiel est étroitement lié à leur utilisation dans de nombreux secteurs, tels que l'électronique, l'énergie, les télécommunications, l'informatique et les dispositifs médicaux.

Ces composés semi-conducteurs jouent un rôle crucial dans les dispositifs optoélectroniques en raison de leurs propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques. Par exemple, les diodes électroluminescentes (LED) utilisent des semi-conducteurs pour convertir l'électricité en lumière, tandis que les lasers exploitent les propriétés des semi-conducteurs pour générer une lumière cohérente et concentrée. Les cellules photovoltaïques, quant à elles, utilisent des semi-conducteurs pour convertir la lumière du soleil en électricité [1].

L'étude des matériaux semiconducteurs nanostructurés et de leurs propriétés physiques a connu des avancées significatives. Les nanostructures, telles que les points quantiques, présentent des propriétés uniques en raison de leurs dimensions réduites. Ces propriétés peuvent être exploitées pour contrôler et manipuler les électrons et les propriétés optiques des semiconducteurs, ouvrant ainsi la voie à de nouvelles applications et à une amélioration des performances des dispositifs.

L'utilisation de l'outil informatique, notamment la modélisation et la simulation, revêt une importance primordiale pour étudier les propriétés physiques des semiconducteurs. Les simulations permettent de prédire et d'analyser le comportement des semi-conducteurs dans des conditions spécifiques, ce qui permet de comprendre leur fonctionnement et d'optimiser leur conception. Cela offre la possibilité d'orienter les choix industriels de manière économique et efficace, en réduisant les coûts et les délais associés aux expériences réelles [2].

Cette thèse se concentre spécifiquement sur l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des semiconducteurs binaires nanostructurés. Les semi-conducteurs du type III-V, tels que GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP, ainsi que les semi-conducteurs du type II-VI, tels que MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe, sont des

exemples couramment étudiés. La méthode empirique du pseudo-potentiel est utilisée pour mener des simulations, offrant une approche pratique et précise pour évaluer les propriétés des semi-conducteurs. Les résultats de simulations sont présentés de manière claire et interprétés en comparaison avec les résultats théoriques, mettant en évidence les performances des modèles optimisés [3].

Le manuscrit est organisé en trois chapitres pour fournir une structure claire à l'étude. Le premier chapitre aborde les notions préliminaires relatives aux semi-conducteurs, notamment leur structure cristalline, leurs bandes d'énergie et leurs propriétés de transport. Le deuxième chapitre se concentre sur les semiconducteurs nanostructures et le confinement quantique.

Le troisième chapitre présente les résultats des simulations réalisées sur les semi-conducteurs binaires nanostructures. Les performances des modèles optimisés sont clairement présentées et interprétées en comparaison avec les résultats théoriques existants. Les propriétés électroniques, optiques et diélectriques des différents semi-conducteurs étudiés sont analysées en détail, mettant en évidence les variations et les tendances observées.

En conclusion générale, les résultats obtenus dans cette étude confirment l'importance des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des semiconducteurs nanostructures. Les avancées dans la compréhension et la manipulation des semiconducteurs nanostructures ouvrent de nouvelles perspectives pour la conception de dispositifs plus performants et plus efficaces.

# Chapitre 1: Généralités sur les semiconducteurs

## Chapitre1: Généralités sur les semiconducteurs

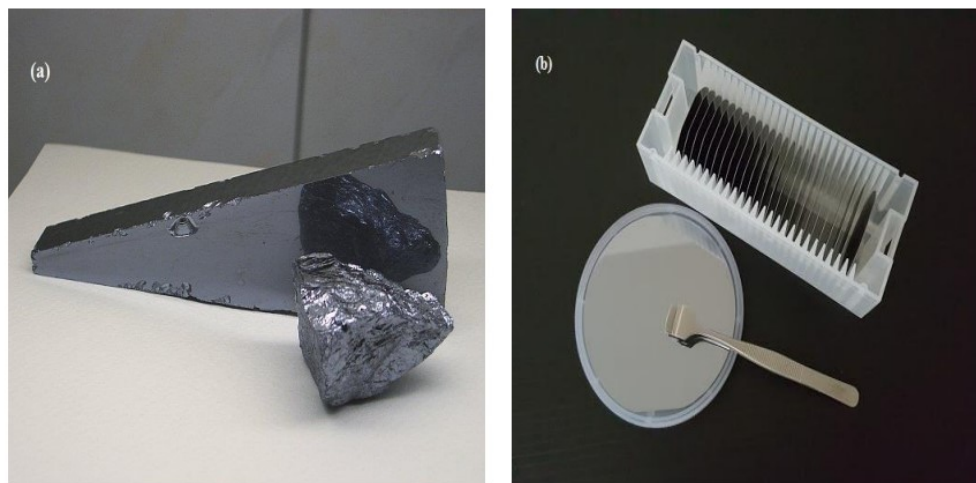
### 1-1 Introduction

Trois types de matériaux sont communément distingués: Les conducteurs, les semiconducteurs et les isolants. Dans ce chapitre, l'attention est portée sur les semiconducteurs, avec une présentation des propriétés physiques, structurelles, électroniques et optiques de ces matériaux. Une attention particulière est accordée aux composés semiconducteurs II-V et III-V.

### 1-2 Définition d'un semiconducteur

Depuis le début du XIX<sup>ème</sup> siècle, des recherches ont été menées pour explorer les propriétés des matériaux semiconducteurs, et de nombreux semiconducteurs ont été étudiés depuis (figure1-1). Les semiconducteurs possèdent deux modes de conduction: La conduction électronique et la conduction par les trous, comme cela a été noté dans la référence [4].

Un cristal isolant est un semiconducteur pur qui ne présente pas une grande conductivité, sauf en cas de perturbations thermiques d'impuretés ou de défauts. Les semiconducteurs se situent entre les métaux et les isolants en termes de conductivité. Leur conductivité peut varier considérablement en fonction de facteurs tels que la température et la lumière, souvent de plusieurs ordres de grandeur. Le dopage qui implique l'ajout d'impuretés, peut également considérablement modifier la conductivité des semiconducteurs, comme cela a été expliqué dans la référence [5].



**Figure 1-1: Matériaux semiconducteurs (a) Silicone, (b) GaAs tranche [6].**

### 1-3 Différents types de semiconducteurs

Il existe deux types de matériaux semiconducteurs différents. Le premier est le semiconducteur intrinsèque, également connu sous le nom de matériau semiconducteur pur, qui ne contient aucune impureté intentionnelle ajoutée. Le second est le semiconducteur extrinsèque dopé qui contient des impuretés intentionnelles ajoutées pour modifier ses propriétés électriques. Ce type de dopage peut être de deux types, N ou P.

#### 1-3-1 Semiconducteur intrinsèque

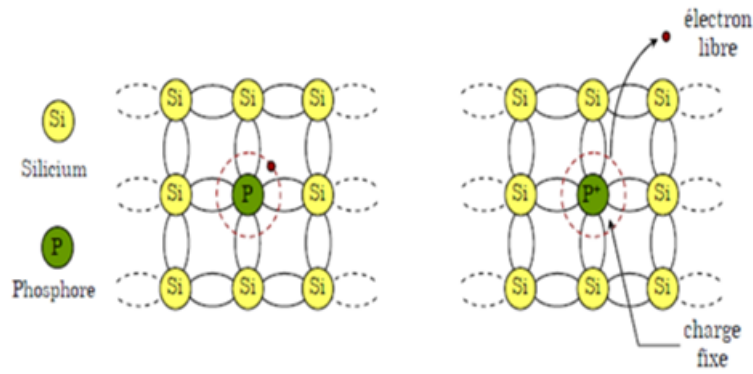
Un semiconducteur intrinsèque est un matériau semiconducteur qui n'a pas été dopé avec des impuretés pour modifier ses propriétés électriques. Ses propriétés sont donc déterminées uniquement par sa composition chimique et sa structure cristalline intrinsèque. Il représente la forme la plus pure d'un semiconducteur, sans défauts de structure ou impuretés ajoutées [7].

#### 1-3-2 Semiconducteur extrinsèque

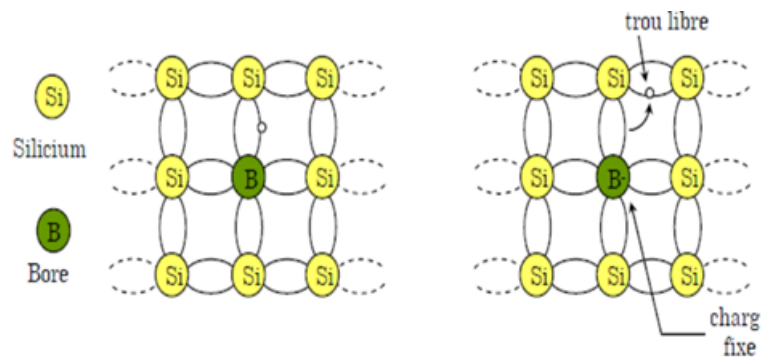
Un semiconducteur extrinsèque est un matériau semiconducteur qui a été dopé avec des impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage [9] pour modifier ses propriétés électriques. Le dopage peut être de deux types: N (donneur) ou P (accepteur), selon le type d'impureté utilisée.

Dans le cas d'un dopage de type N, l'impureté introduite est un élément avec cinq électrons de valence ou plus, tels que le Phosphore ou l'Arsenic. Ces impuretés créent des électrons supplémentaires dans la bande de conduction, qui deviennent les porteurs majoritaires, tandis que les trous sont les porteurs minoritaires (figure 1-2).

Dans le cas d'un dopage de type P, l'impureté utilisée est un élément avec trois électrons de valence, tels que le Bore ou l'Aluminium. Ces impuretés créent des trous supplémentaires dans la bande de valence, qui deviennent les porteurs majoritaires, tandis que les électrons sont les porteurs minoritaires (figure 1-3).



**Figure 1-2:** Représentation schématique de la substitution d'un atome de Phosphore à un atome de Silicium (exemple du dopage N) [8].



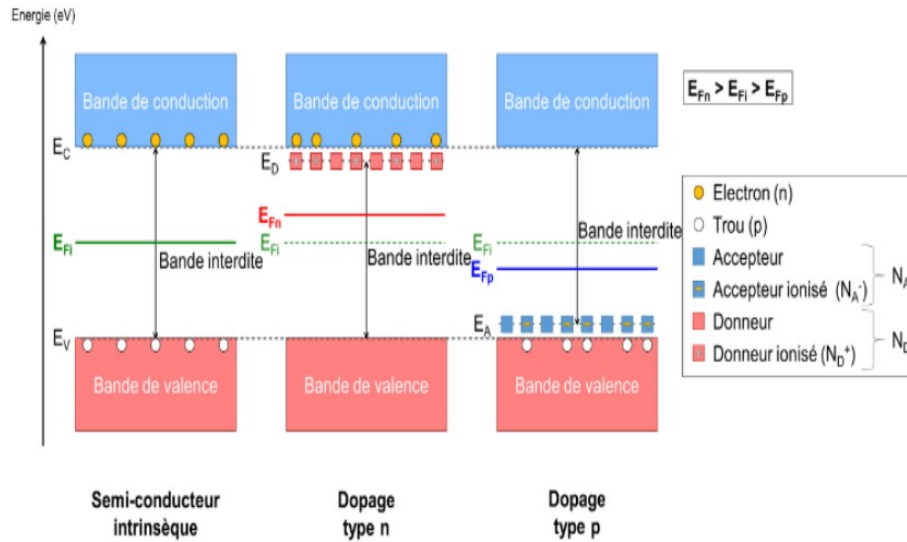
**Figure 1-3:** Représentation schématique de la substitution d'un atome de Bore par un atome de Silicium (exemple du dopage P) [8].

La Figure (1-4) présente les type de dopage de semiconducteurs,  $E_{F_n}$ ,  $F_{P_1}$  et  $F_p$  sont :  
 Energie du niveau de Fermi correspondant respectivement au semiconducteur intrinsèque,  
 au semiconducteur dopé n et au semiconducteur dopé p.

$E_V$  : Energie du sommet de la bande de valence [9].

$E_C$ : Energie du bas de la bande de conduction.

$E_A$  et  $E_D$  : Energie du niveau accepteur et du niveau donneur.



**Figure 1-4:** Modèle de structures semi-conductrices intrinsèques et extrinsèques avec dopage de type n et de type p,  $T > 0K^0$  [10].

Lorsque l'on dope un matériau, cela induit des modifications dans sa structure électronique, créant ainsi de nouveaux états dans les bandes énergétiques interdites. Pour que le dopage soit efficace, ces nouveaux états doivent être des donneurs pour le dopage de type N ou des accepteurs pour le dopage de type P, et doivent être situés près de la bande de conduction ou de la bande de valence. Le dopage de type N augmente la conductivité du matériau car les électrons excités vers la bande de conduction remplissent le niveau donneur. Quant au dopage de type P, il crée un trou dans la bande de valence qui peut participer à la conduction du matériau [10].

### 1-4 Les composés semiconducteurs

Dans cette thèse nous étudions les semiconducteurs de type III-V et II-VI, ces matériaux sont composés de deux éléments qui apparaissent dans le tableau périodique des éléments de la figure 1-5.

#### 1-4-1 Les composés semiconducteurs III-V

Les éléments de la colonne III du tableau périodique La figure 1-5 comprennent le Bore, l'Aluminium, le Gallium, l'Indium, le Thallium et le Nickel. La colonne V comprend N, P, As, Sb, Bi, Mc. Les semiconducteurs III-V sont des composés de paires d'éléments issus de ces deux colonnes, tels que AlP, AlAs, AlSb, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs et InSb.

#### 1-4-2 Les composés semiconducteurs II-VI

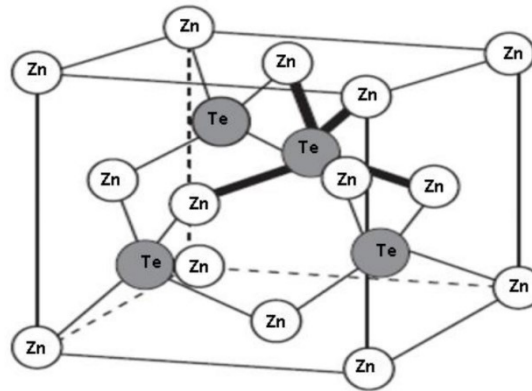
La signification des symboles II et VI dans le tableau périodique des éléments représente la deuxième colonne qui comprend le Zinc, le Cadmium, le Mercure et le



## 1-5-1 Les propriétés structurales

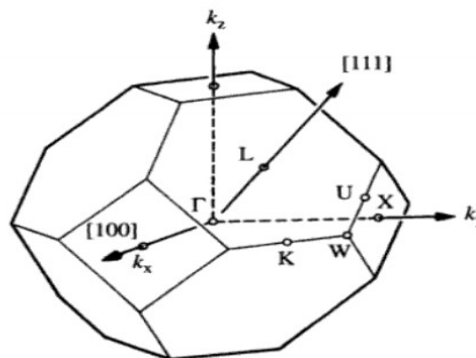
### 1-5-1-1 Structure cristalline

Les semiconducteurs III-V et II-VI sont caractérisés par une structure atomique sphalérite (Figure 1-6), qui est basée sur un réseau cubique à faces centrées de Bravais. Chaque site cristallin de cette structure contient un motif de deux éléments atomiques qui se trouvent à des positions spécifiques relatives de  $(0,0,0)$  et  $(1/4,1/4,1/4)$ . Cette structure est semblable à celle du semiconducteur diamant IV, tels que le Silicium et le Germanium [11].

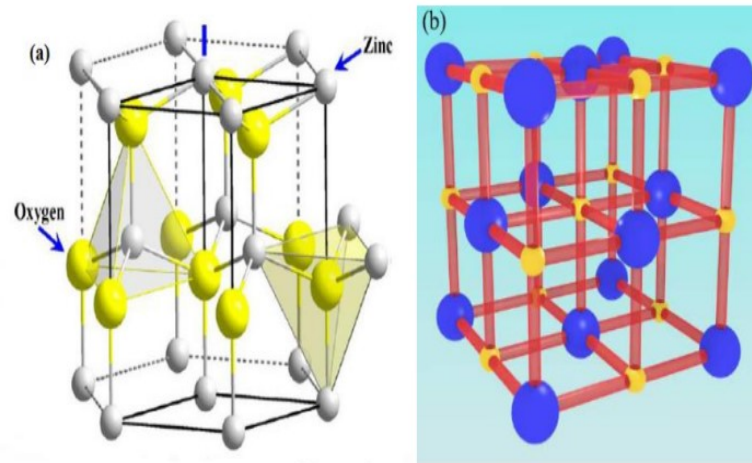


**Figure 1-6:** Structure cubique du zinc blende (sphalérite) ZnTe.

La structure de type zinc-blende est associée à une cellule inverse cubique centrée. Sa première zone de Brillouin est représentée par une cellule unitaire (figure 1-7) ayant un centre de symétrie  $\Gamma$  à l'origine ( $k = 0$ ) et des axes de symétrie. Cette cellule unitaire peut être utilisée pour décrire les vecteurs d'onde  $k$ .



**Figure 1-7:** Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées [11].

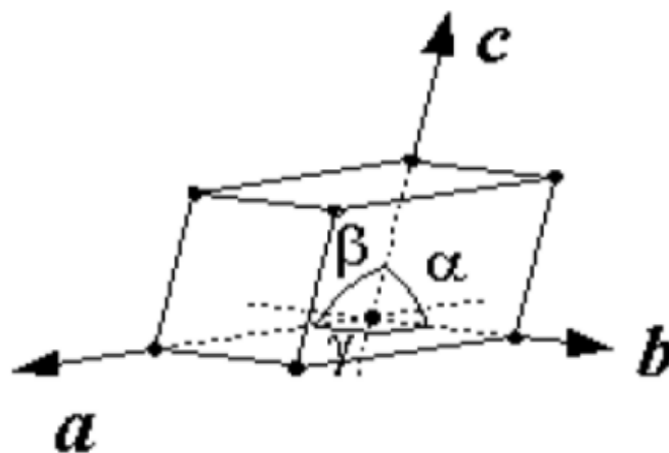


**Figure1-8:** Structures (a) wurtzite (ZnO) [12]. (b) Structure Rock-Salt (PbSe) des semiconducteurs IV-VI

Les sphères bleues et jaunes indiquent les deux types d'atomes. Les cylindres rouges indiquent les premières connexions voisines [10].

#### 1-5-1-2 Paramètre de réseau

La définition du réseau cristallin dépend de trois paramètres  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et de trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  qui les séparent les uns des autres, comme illustré dans la figure (I-9). Les valeurs relatives de ces six quantités permettent de définir différentes structures cristallines [13].



**Figure 1-9:** Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

Les deux tableaux 1-1 et 1-2 montrent les paramètres du réseau et la structure cristalline des semiconducteurs III-V et II-VI [14] et [15].

**Tableau 1-1:** Paramètres de réseau et structure cristalline des semiconducteurs III-V [14].

Matériau	a(Å)	Structure
GaAs	5.65330	Zinc-blende
InAs	6.0583	Zinc-blende
InP	5.8690	Zinc-blende
AlAs	5.66139	Zinc-blende
AlSb	6.1355	Zinc-blende
GaP	5.4508	Zinc-blende

**Tableau 1-2:** Le paramètre de réseau et la structure cristalline des semiconducteurs II-VI [15].

Matériau	a(Å)	Structure
MgSe	5.91	Zinc-blende
CdSe	6.481	Zinc-blende
ZnS	5.41	Zinc-blende
ZnSe	5.668	Zinc-blende
ZnTe	6.104	Zinc-blende

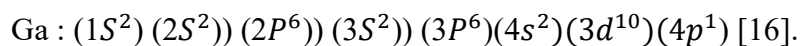
## 1-5-2 Les propriétés électroniques des semiconducteurs

### 1-5-2-1 Structure électronique

La disposition des électrons dans une substance est expliquée par la configuration électronique en physique des particules élémentaires et en chimie quantique. Cette configuration utilise les fonctions d'onde qui sont liées aux orbitales atomiques ou moléculaires. Cette organisation électronique est cruciale pour déterminer les caractéristiques physiques et chimiques de la substance, comme sa stabilité, sa réactivité et ses propriétés magnétiques [16].

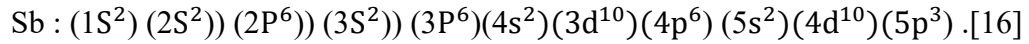
#### Cas du Gallium (Ga) :

L'atome du Gallium (Ga) possède 31 électrons, la configuration électronique du phosphore ( $Ga^{31}$ ) est donnée par la forme condensée suivante:



### Cas de l'Antimoine l'atome (Sb):

L'Antimoine a 51 électrons répartis dans différents niveaux d'énergie ou orbitales autour du noyau. Les cinq électrons externes occupent la sous-couche p du cinquième niveau d'énergie. Sa structure électronique est:



#### 1-5-2-2 Notion de bandes d'énergie

La Théorie des bandes d'énergie est couramment utilisée pour modéliser le comportement électrique des semiconducteurs. Cette théorie quantique en physique du solide permet de déterminer les énergies permises des électrons dans les solides et de mieux comprendre le concept de conductivité électrique. Elle est basée sur la théorie des orbites moléculaires et permet de distinguer les bandes autorisées des autres bandes interdites. Les bandes autorisées sont celles où les électrons peuvent acquérir des valeurs d'énergie, tandis que les bandes interdites sont celles où les électrons ne peuvent pas acquérir d'énergie. Les bandes de valence correspondent aux bandes de basse énergie du solide pour les électrons impliqués et maintiennent la structure cristalline du solide comme le montre la (figure 1-10) [17].

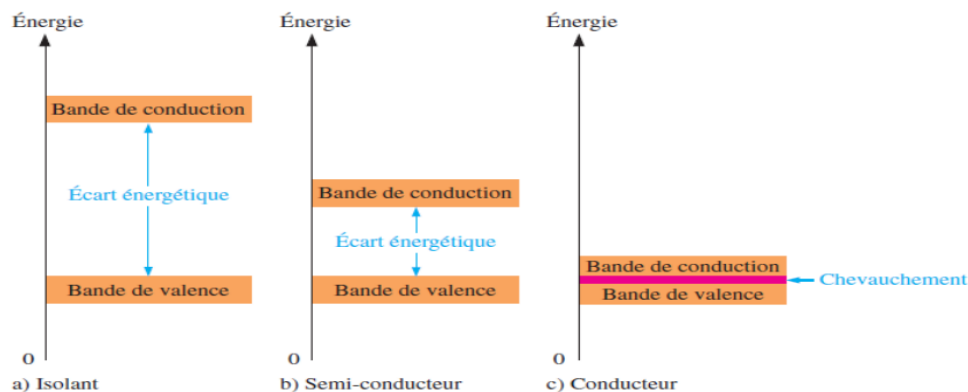
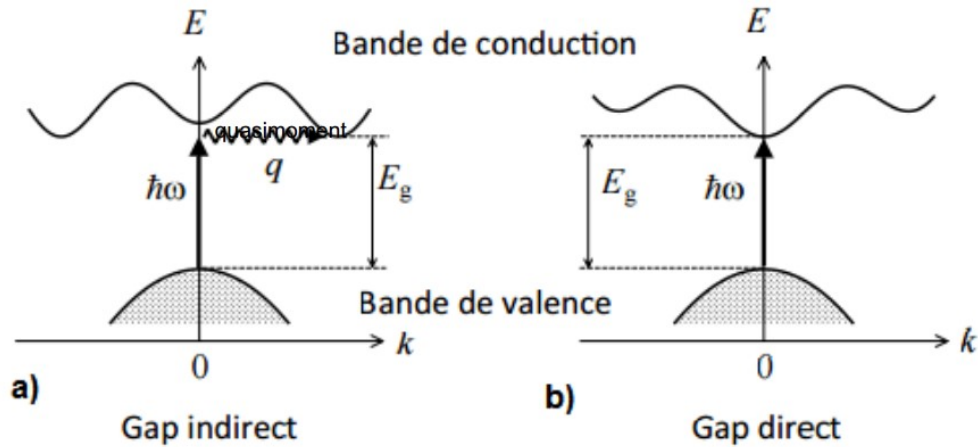


Figure 1-10: Diagrammes d'énergie pour trois types de matériaux.

#### 1-5-2-3 Gap direct et indirect

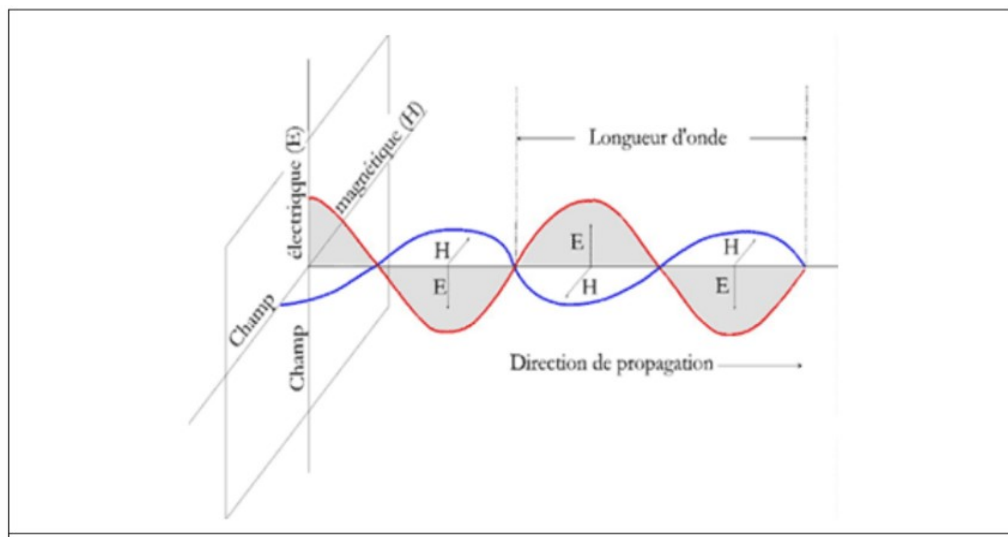
En physique des semiconducteurs, la "bande interdite" est le terme utilisé pour décrire la différence d'énergie entre l'état d'énergie le plus bas de la bande de valence et l'état d'énergie le plus élevé de la bande de conduction. Lorsque deux extrêmes correspondent à une déviation quasi immédiate, on parle de "gap direct", tandis que, lorsque la différence entre les vecteurs d'onde de ces deux extrêmes n'est pas nulle, on parle de "Gap indirect" (Figure 1-10) [21].



**Figure 1-11:** Structure de bandes d'énergie : (a) gap indirect (b) gap direct

### 1-5-3 Les propriétés optiques des semiconducteurs

La compréhension des propriétés optiques des solides est essentielle pour comprendre leur structure électronique et atomique. Avant d'aborder l'interaction entre la lumière et la matière, il est important de comprendre le formalisme utilisé pour décrire la lumière électromagnétique. Les champs électromagnétiques sont générés par les mouvements de particules chargées, telles que les électrons et les protons et toute perturbation de ce champ peut créer des ondes électromagnétiques qui se propagent. Cette onde électromagnétique caractérisée par deux paramètres, sa fréquence et sa longueur d'onde présentée dans la figure 1-12 [19-20].



**Figure 1-12:** L'onde électromagnétique

### 1-5-3-1 Indice de réfraction

En utilisant différents modèles qui intègrent la bande interdite, l'indice de réfraction ( $n$ ) d'un semiconducteur peut être calculé ainsi que sa dépendance vis-à-vis des paramètres du réseau [21]. L'indice de réfraction ( $n$ ) est défini comme le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ( $C=299,792$  km/s) et la vitesse de la lumière dans le matériau [16]. La précision de la détermination de cet indice est cruciale pour les applications optoélectroniques telles que les diodes laser à hétérojonction, les amplificateurs optiques et les fibres optiques [22]. La bande interdite d'un semiconducteur est donc importante pour calculer cet indice et optimiser ces applications optoélectroniques.

### 1-5-3-2 Constantes diélectriques

Les constantes diélectriques sont des grandeurs physiques qui décrivent la réponse d'un matériau à un champ électrique pour comprendre les propriétés électromagnétiques des matériaux, elles sont étudiées dans de nombreux domaines de la physique, en particulier en optique où elles permettent de déterminer l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière. La fonction diélectrique  $\epsilon(\omega, k)$  décrit l'excitation appropriée d'un matériau, et la permittivité optique  $\epsilon_\infty$  tient compte des contributions des processus ioniques-électroniques. Par contre la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  est une constante qui quantifie la permittivité du vide et intervient dans les équations électromagnétiques pour décrire le comportement des champs électriques et magnétiques. Elles sont souvent désignées par le symbole  $\epsilon$  et représentent la permittivité du matériau. Le tableau 1-3 montre les valeurs des constantes diélectriques statiques et optiques de certains matériaux semiconducteurs [20].

**Tableau 1-3:** Les valeurs expérimentales et théoriques des constantes diélectriques statique et de haute fréquence de quelques matériaux semiconducteurs II-VI.

Matériau	Constante diélectrique statique $\epsilon_0$	Constante diélectrique de haute fréquence $\epsilon_\infty$
MgSe		4.58 <sup>a)</sup>
CdTe	9.8 <sup>b)</sup>	8.49 <sup>c)</sup>
ZnS	8.9 <sup>d)</sup>	5.7 <sup>d)</sup>
ZnSe	9.1 <sup>d)</sup>	6.11 <sup>d)</sup>
ZnTe	10.3 <sup>d)</sup>	7.28 <sup>d)</sup>

<sup>a)</sup> [23], <sup>b)</sup> [24], <sup>c)</sup> [25], <sup>d)</sup> [26].

**Tableau 1-4:** Les valeurs expérimentales et théoriques des constantes diélectriques statique et de haute fréquence de quelques matériaux semiconducteurs III-V.

Matériau	Constante diélectrique statique $\epsilon_0$	Constante diélectrique optique $\epsilon_\infty$
GaAs	12,9 <sup>a)</sup>	10,9 <sup>a)</sup>
InAs	14,9 <sup>d)</sup>	12,3 <sup>d)</sup>
InP	12,4 <sup>b)</sup>	9,6 <sup>c)</sup>
GaP	10,7 <sup>c)</sup>	8,5 <sup>c)</sup>

<sup>a)</sup> [23], <sup>b)</sup> [24], <sup>c)</sup> [25], <sup>d)</sup> [26].

### 1-6 La méthode empirique du pseudopotentiel (l'EPM)

La méthode des pseudopotentiels est utilisée pour déterminer les paramètres nécessaires au calcul de la structure de bande électronique en utilisant des données expérimentales [27]. Cette technique a été appliquée avec succès à des semiconducteurs présentant des structures spécifiques, telles que la structure diamant et la structure zinc-blende. L'utilisation des pseudopotentiels présente deux approximations importantes :

- ✓ l'approximation empirique locale
- ✓ l'approximation empirique non-locale.

#### 1-6-1 L'approximation empirique locale

Dans cette technique, la structure de bande est calculée en utilisant un nombre limité de facteurs de forme de termes  $V(G)$  qui sont déterminés à partir d'ajustements théoriques basés sur les mesures de réflexion et d'absorption des cristaux. En d'autres termes, la méthode empirique Pseudopotentiel (EPM) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme  $V(G)$  du pseudopotentiel  $V_p(r)$ , qui est considéré comme une combinaison linéaire des pseudopotentiels atomiques. Mathématiquement, cela peut être exprimé de la manière suivante: [28]

$$V_p(r) = \sum_{R-\tau} V_a(r - r - \tau) \quad (1-1)$$

$R$  est un vecteur du réseau direct, tandis que  $\tau$  est un vecteur de translation du réseau direct. Lorsque nous étendons le potentiel dans le réseau réciproque, il prendra la forme suivante:

$$V_p(r) = \sum_G S(G) V_a(G) \exp(iG \cdot r) \quad (1-2)$$

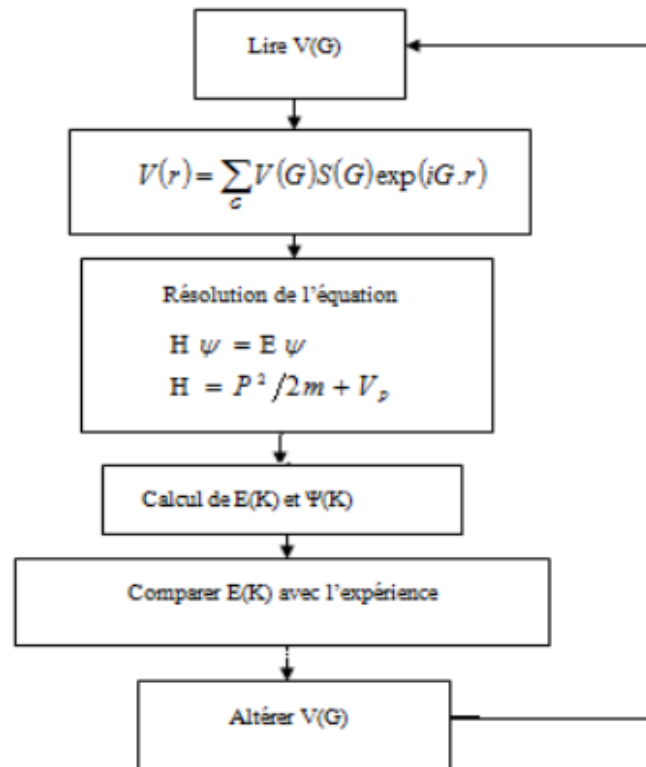
$V_a(G)$  : Le facteur de forme

$S(G)$  : Le facteur de structure

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

$N_a$  Étant le nombre d'atomes de base.

L'utilisation des pseudopotentiels dans le calcul de la structure des bandes électroniques repose sur la décomposition des fonctions d'onde en une série d'ondes planes. Cette méthode est largement utilisée car elle permet d'obtenir des résultats précis en utilisant un nombre limité de facteurs de forme. Le processus de calcul de la méthode empirique de Pseudopotentiel (EPM) est expliqué dans le schéma présenté ci-dessous [29].



**Figure 1-13:** L'Algorithme du calcul de l'EPM

La procédure débute en choisissant  $V(G)$  et en introduisant la structure via le facteur de structure, par la suite, l'équation de Schrödinger est résolue pour obtenir les énergies  $E_n(k)$  et les pseudofonctions  $\Psi_{n,k}(r)$ . Ces énergies sont ensuite comparées à l'expérience. En cas de désaccord entre l'expérience et la théorie,  $V(G)$  est modifié. Cependant, cette méthode a démontré sa convergence avec un nombre limité d'itérations.

Différentes approches de pseudopotentiels ont été développées pour le calcul de la structure de bandes parmi elles, la méthode self-consistante qui utilise la fonction d'onde obtenue par l'EPM, principalement pour le calcul des fonctions diélectriques. Il existe également la méthode *Ab initio*, connue sous le nom de pseudopotentiel du premier principe, qui est utilisée pour calculer l'énergie totale et les propriétés structurales des solides.

## **1-7 Les application des semiconducteurs**

Les semiconducteurs sont des matériaux qui ont des propriétés électriques intermédiaires entre les conducteurs (qui laissent facilement passer le courant électrique) et les isolants (qui bloquent le courant électrique). Cette propriété unique fait des semiconducteurs un élément clé de l'industrie électronique et informatique moderne voici quelques-unes des principales applications des semiconducteurs.

### **1-7-1 Diodes électroluminescentes (LED)**

Les diodes sont des composants électroniques qui permettent de laisser passer le courant électrique dans un seul sens. Elles sont souvent utilisées comme des éléments de commutation ou de redressement dans les circuits électroniques. Dans les interfaces utilisateur, il est courant d'utiliser des diodes électroluminescentes qui peuvent émettre une large gamme de couleurs. La jonction PN de la diode est entourée d'une couche transparente, généralement une résine plastique, qui recouvre l'époxy solide, à l'exception d'une fine couche plastique qui reflète les photons émis par la jonction [1].

### **1-7-2 Les transistors**

Les transistors sont des dispositifs électroniques qui permettent d'amplifier ou de commuter des signaux électriques. Ils sont largement utilisés dans les circuits électroniques, tels que les amplificateurs, les régulateurs de tension, les oscillateurs, les convertisseurs de puissance, etc.

### **1-7-3 Les circuits intégrés**

Les circuits intégrés sont des ensembles de composants électroniques miniaturisés, tels que des transistors, des diodes et des résistances, qui sont intégrés sur une seule puce de Silicium. Les circuits intégrés sont la base de la plupart des technologies informatiques modernes, telles que les ordinateurs, les téléphones portables, les tablettes, etc.

### **1-7-4 Les lasers**

Les lasers sont des dispositifs qui émettent de la lumière cohérente et monochromatique. Le fonctionnement du laser repose sur la conversion de l'énergie auto-émise par la source de pompage en énergie lumineuse. Cette énergie lumineuse est ensuite amplifiée entre deux miroirs, permettant à la lumière de se réfléchir plusieurs fois avant d'être émise.

Ils sont utilisés dans une variété d'applications, telles que la communication optique, la chirurgie au laser, la gravure au laser, la mesure de distance au laser, etc.

### **1-7-5 Les capteurs**

Les capteurs sont des dispositifs qui détectent les variations physiques ou chimiques dans l'environnement et les convertissent en signaux électriques. Ils sont utilisés dans une variété d'applications, telles que les capteurs de température, de pression, d'humidité, de gaz, etc.

### **1-7-6 Les mémoires**

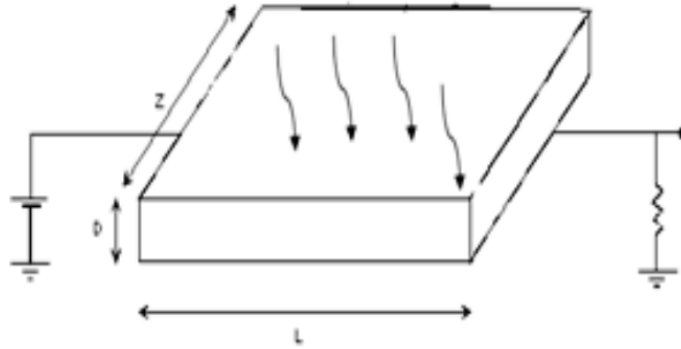
Les mémoires sont des dispositifs qui permettent de stocker et de récupérer des données. Les mémoires à semiconducteurs, telles que les mémoires flash et les mémoires dynamiques, sont largement utilisées dans les ordinateurs, les téléphones portables, les appareils photo numériques.. etc.

### **1-7-7 Photodétecteurs**

Les photodétecteurs exploitent les propriétés physiques des matériaux semiconducteurs pour convertir la lumière absorbée en une quantité mesurable, telle que le courant ou la tension. Ainsi, ces dispositifs sont fondés sur les phénomènes physiques liés aux matériaux semiconducteurs [20].

### **1-7-8 Cellule photoconductrice**

La conductivité électrique d'un semiconducteur est obtenue grâce à la formation de porteurs de charge sous l'influence de la lumière. En polarisant la cellule avec une tension, un courant électrique  $I$  circule à travers deux contacts ohmiques. La géométrie de la cellule a un impact direct sur sa conductivité. Une cellule solaire contient une épaisse couche de matériau semiconducteur qui absorbe la lumière solaire et génère un courant électrique par une jonction semiconductrice. Le courant est collecté par des contacts métalliques et transmis à un circuit fermé. Le Silicium monocristallin et l'Arséniure de Gallium sont des choix performants mais coûteux, tandis que le Silicium polycristallin et les matériaux minces en sandwich sont moins coûteux mais moins efficaces. Les cellules solaires sont principalement utilisées dans l'espace représenté sur la figure (1-14) [20].



**Figure 1-14:** Cellule photoconductrice

### 1-8 Conclusion

En conclusion, les semiconducteurs sont essentiels dans l'industrie électronique et informatique moderne. Leurs propriétés uniques permettent la fabrication de nombreux composants électroniques tels que diodes, transistors, circuits intégrés, cellules photovoltaïques, lasers, capteurs, mémoires et composants optoélectroniques.

Les avancées constantes dans les technologies de semiconducteurs ont conduit à des dispositifs de plus en plus performants, compacts et économes en énergie, ouvrant de nouvelles perspectives dans divers domaines. Leur utilisation est destinée à croître davantage dans les années à venir, impactant positivement des secteurs tels que la médecine, les télécommunications, les énergies renouvelables, l'automobile et l'aérospatiale.

## Chapitre 2: Nanomatériaux et effet du confinement quantique

## Chapitre 2: Nanomatériaux et effet du confinement quantique

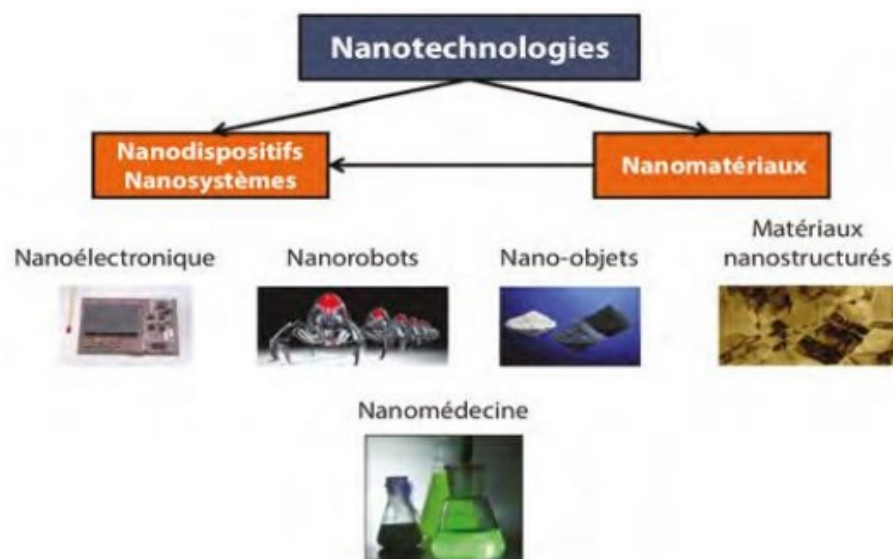
### 2-1 Introduction

Les nanosciences regroupent différentes disciplines scientifiques qui permettent de comprendre et de prédire les nouvelles propriétés des nanomatériaux, qui constituent les briques élémentaires des matériaux de demain. Aujourd'hui, les semiconducteurs nanostructurés suscitent un intérêt technologique important en raison de leurs nouvelles propriétés à l'échelle nanométrique et de leurs multiples applications. Dans ce chapitre, nous allons étudier les nanomatériaux semiconducteurs et le confinement quantique, ainsi que son impact sur les propriétés électroniques, optiques et diélectriques. Pour cela, nous allons fournir quelques définitions [31].

### 2-2 Définitions

#### 2-2-1 Nanotechnologie

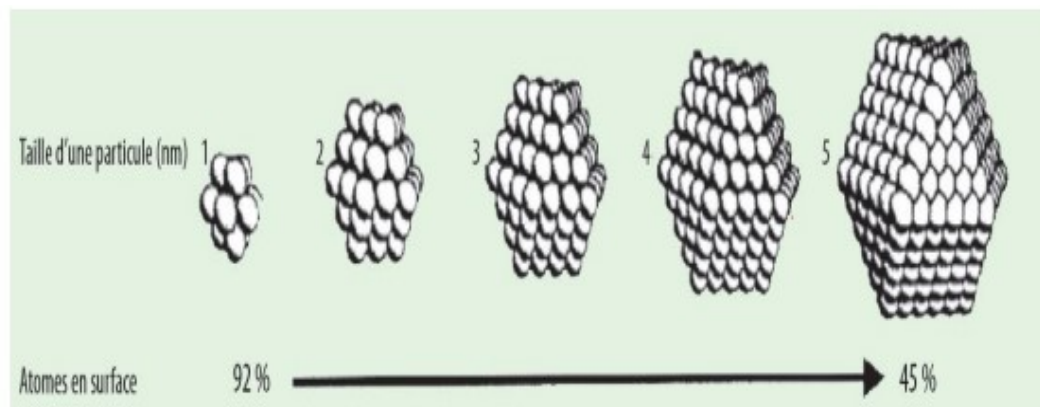
Elle constitue un domaine de recherche et de développement interdisciplinaire qui implique la fabrication de nouveaux matériaux et de nouveaux dispositifs à partir d'outils ou de techniques permettant la structuration de la matière au niveau atomique, moléculaire ou supramoléculaire. Les échelles caractéristiques des nanotechnologies vont de 1 à 100 nanomètres (Figure 2-1) [33].



**Figure 2-1:** Des nanotechnologies aux nanomatériaux et aux nano dispositifs [32].

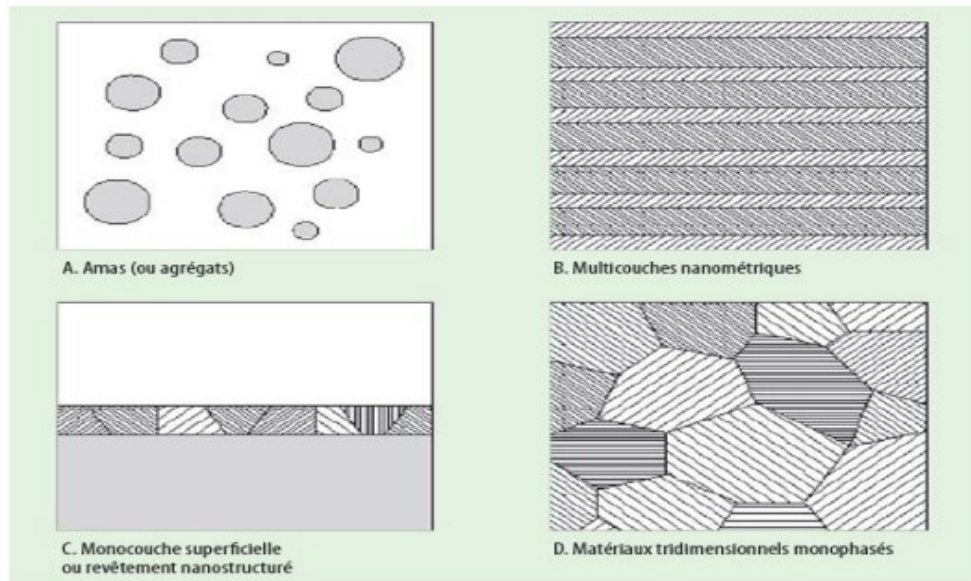
### 2-2-2 Nanomatériaux

Les nanomatériaux sont constitués de nanoparticules ayant au moins une dimension comprise entre 1 nm ( $10^{-9}$  m) et 100 nm. Ces matériaux présentent des propriétés physiques variées (optiques, catalytiques, mécaniques, magnétiques, conductrices, etc.) qui diffèrent de celles des objets plus volumineux. La structuration à l'échelle nanométrique des matériaux augmente considérablement leur surface d'échange, ce qui accroît leur interaction avec l'environnement. Par exemple, diviser une particule millimétrique en plusieurs nanoparticules multiplie toutes les interactions de surface et augmente considérablement la surface développée pour une quantité de substance donnée, passant de  $6\text{mm}^2$  à  $6\text{m}^2$ . De plus, la diminution de la taille des molécules entraîne une augmentation de la proportion d'atomes en surface par rapport à ceux en volume. Les atomes en surface ne présentent pas la même configuration électronique que ceux en volume. Dans certains cas, le pourcentage d'atomes à la surface d'une particule nanométrique peut dépasser 90%, (Figure. 2-2) [34].



**Figure 2-2:** Proportion d'atomes en surface en fonction de la taille d'une particule [35].

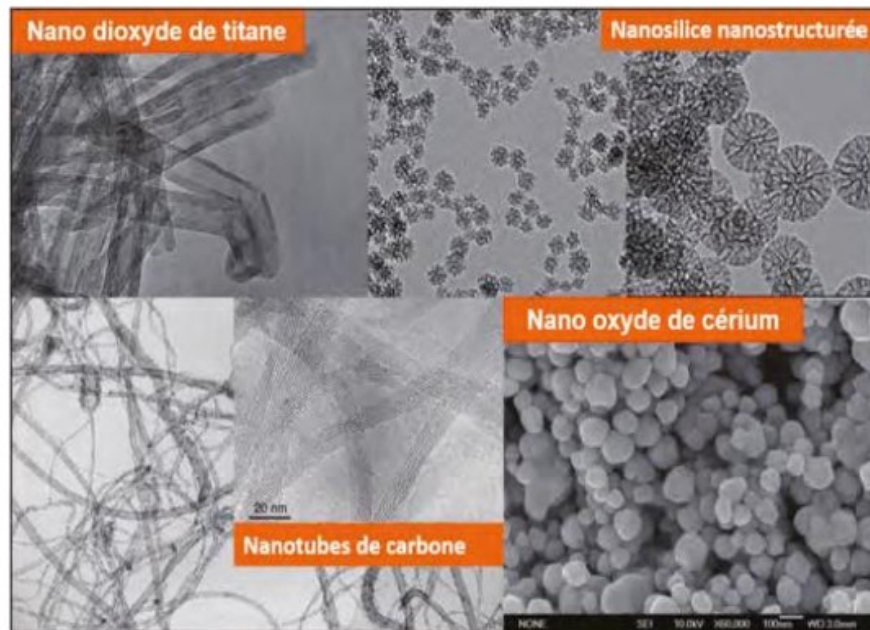
Les quatre principales familles de nanomatériaux manufacturés sont : Les amas ou agrégats de nanoparticules, les multicouches nanométriques, les monocouches superficielles et les matériaux tridimensionnels nanostructurés ils sont représentés sur la (Figure 2-3) [36].



**Figure 2-3:** Classification des nanomatériaux selon R.W. Siegel [36].

### 2- 2-3 Nano-objets

Les nano-objets peuvent être décrits comme des structures très petites, qui mesurent généralement quelques nanomètres ou moins, tels que des nanoparticules 3D, des nanoplaquettes 2D, des nanotubes et des nano fibres. Ces objets ont des propriétés uniques qui les rendent utiles dans divers domaines technologiques, tels que la médecine, l'électronique et les revêtements. Il est important de noter que les nanoparticules comme le dioxyde de Titan, l'oxyde de Cerium et certain types de nanotubes de Carbone (Figure 2-4) sont couramment utilisées dans les produits de la vie quotidienne, tels que les cosmétiques, les peintures et les écrans solaires et que nous y sommes tous exposés. Cependant, il est également crucial de prendre en compte les effets potentiels des nano-objets sur la santé et l'environnement [32].



**Figure 2-4:** Exemples de nano-objets: nano TiO<sub>2</sub>, nano CeO<sub>2</sub>, nano SiO<sub>2</sub>, nanotube de Carbone [32].

#### 2-2-4 Nanoparticules

En utilisant le terme "nano" qui signifie un milliardième de mètre ( $1 \times 10^{-9}$  mètres), les nanoparticules sont des agrégats d'atomes ou de molécules liés entre eux et qui ont des propriétés différentes de celles des matériaux massifs contenant les mêmes atomes liés. Les nanoparticules sont généralement considérées comme des agrégats d'atomes ou de molécules ayant un diamètre inférieur à 100 nm, ce qui en fait une subdivision de matériaux macromoléculaires. En d'autres termes, les nanoparticules peuvent être définies comme un groupe d'atomes ou de molécules ayant une taille comprise entre 1 et 100 nm. La figure 2-5 illustre schématiquement des nanoparticules de CdSe, avec (a) une surface exposée et (b) une surface recouverte de ZnS [37].

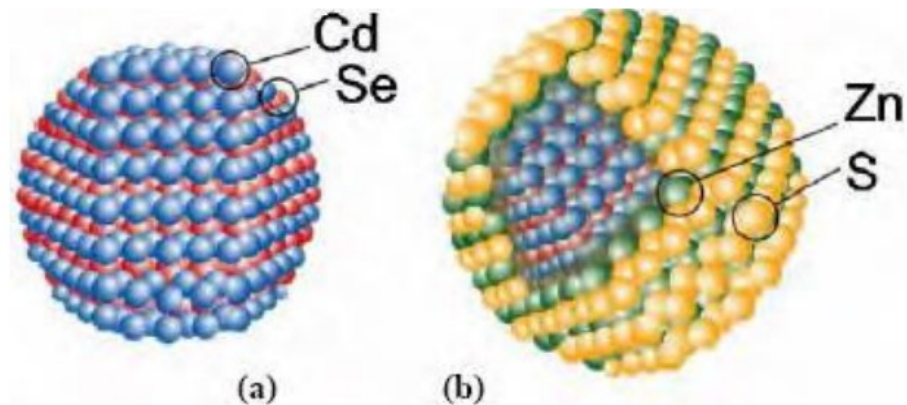


Figure 2-5: Schema des nanoparticules de CdSe et ZnS [37].

### 2-3 Nanocristal

Des travaux d'Ekimov, Henglin, Evros et Brussau dans les années 1980 ont étudié les nanocristaux, qui sont des substances cristallines avec des dimensions de l'ordre de quelques dizaines de nanometres. Ces matériaux sont également appelés boîtes quantiques et peuvent être amorphes ou métalliques. La forme des nanocristaux leur confère des propriétés physiques et chimiques uniques.

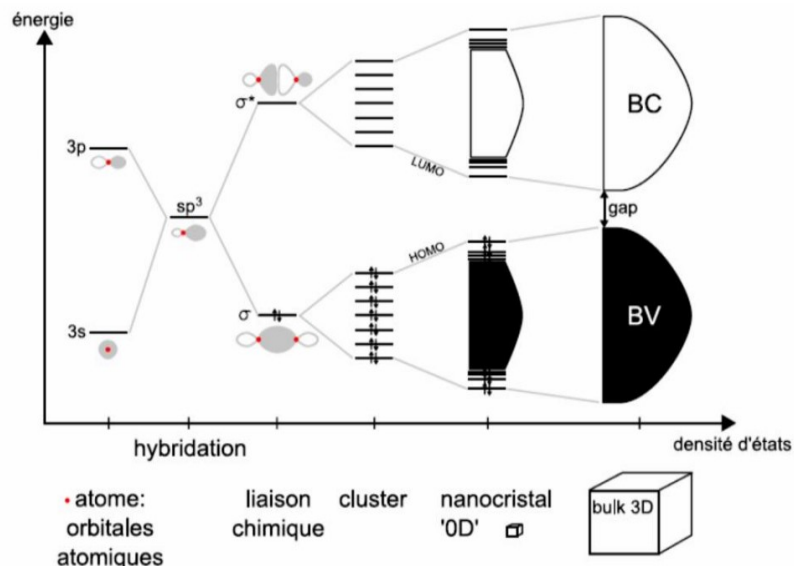


Figure 2-6: Evolution de la structure électronique d'un atome jusqu'au solide massif en passant par un nano cristal.

Les propriétés des nanocristaux qui se situent entre celles de la molécule et du solide (figure 2-6), Ils sont également appelés atomes synthétiques et peuvent être empilés pour

former des solides synthétiques. Les nanocristaux semiconducteurs colloïdaux, quant à eux, sont des nanoparticules semiconductrices constituées d'un noyau inorganique entouré d'une fine couche de molécules organiques. En réduisant leur taille, on peut augmenter leur confinement quantique, ce qui permet d'exploiter des propriétés optoélectroniques [38].

## 2-4 Les applications potentielles des nanocristaux

Les nanocristaux sont des briques élémentaires ou des atomes artificiels qui peuvent être utilisés pour construire des molécules synthétiques ou des solides aux propriétés souhaitées. Les propriétés physico-chimiques des nanocristaux dépendent du matériau utilisé, de sa taille et de sa forme. Les applications potentielles des nanocristaux sont nombreuses et incluent les cellules photovoltaïques, les transistors à effet de champ, les mémoires non volatiles, les matériaux thermoélectriques, les diodes électroluminescentes, les photo-détecteurs, les lasers, les marqueurs pour l'imagerie médicale et les calculateurs quantiques [39]. La Figure 2-7 montre l'intérêt et la croissance rapide des nanotechnologies.

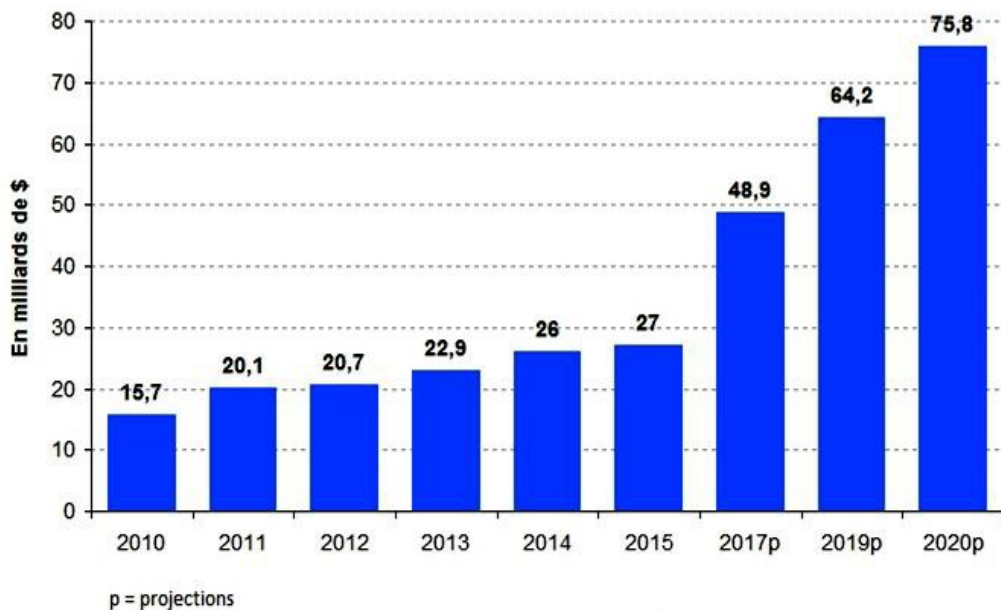


Figure 2-7: Marché mondial des nanotechnologies entre 2010 et 2020.

## 2-5 Différents types des nanomatériaux

Les nanomatériaux sont des matériaux composés de nano-objets dont la taille se situe entre 1 et 10 nm, ce qui leur confère des propriétés uniques à l'échelle nanométrique. Ils peuvent être classés en trois familles de produits différents [40].

### **2-5-1 Matériaux nanochargés ou nanorenforcés**

Ces matériaux sont fabriqués en intégrant des nano-objets dans une matrice organique ou minérale, ce qui permet d'ajouter de nouvelles fonctionnalités ou de modifier des propriétés telles que les propriétés mécaniques, optiques, magnétiques ou thermiques. Les nano-composites sont un type de matériau qui illustre cela [41].

### **2-5-2 Matériaux nanostructurés en surface**

Pour améliorer certaines propriétés ou ajouter de nouvelles fonctionnalités à ces matériaux, on peut y incorporer une ou plusieurs couches de nanomatériaux, ou encore y ajouter des nanoparticules qui forment un revêtement bien défini. Cette approche permet d'obtenir des propriétés telles que la résistance à l'érosion, à l'abrasion ou l'hydrophilie, ainsi que des fonctionnalités comme adhérence, la dureté ou l'aspect. Cette technique est souvent utilisée dans la fabrication de revêtements de surface pour différents types de matériaux [42].

### **2-5-3 Matériaux nanostructurés en volume**

Les matériaux nanostructurés en volume sont des matériaux dans lesquels la structure interne est constituée de nanostructures tridimensionnelles, qui se répètent de manière régulière à l'échelle nanométrique. Ces structures peuvent être produites par différentes techniques, telles que la pulvérisation cathodique, l'évaporation sous vide, la croissance en phase liquide, ou encore la méthode sol-gel. Les matériaux nanostructurés en volume présentent des propriétés particulières, telles qu'une résistance accrue à la déformation plastique, une conductivité électrique ou thermique élevée, une capacité d'absorption des rayonnements élevée, et une réactivité chimique accrue. Ces propriétés résultent de l'effet de confinement quantique, qui est dû à la petite taille des structures nanométriques et à leurs propriétés de surface particulières. Les matériaux nanostructurés sont utilisés dans de nombreuses applications, telles que les dispositifs électroniques, les capteurs, les matériaux composites, ou encore les matériaux catalytiques [43].

## **2-6 Nanomatériaux semiconducteurs**

Les nanomatériaux semiconducteurs sont un type de matériau qui a été conçu pour avoir des dimensions nanométriques (de l'ordre du milliardième de mètre) et des propriétés semiconductrices. Ces matériaux ont des propriétés électroniques, optiques et magnétiques différentes de celles de leurs homologues à l'échelle macroscopique, ce qui leur confère des applications potentielles dans de nombreux domaines. Les nanomatériaux semiconducteurs sont utilisés dans des applications telles que les cellules solaires, les diodes électroluminescentes (LED), les transistors, les capteurs, les batteries, et bien d'autres

encore. Ils peuvent être fabriqués à partir de différents matériaux, tels que le Silicium, le Germanium, les métaux de transition, les oxydes et les sulfures. La recherche sur les nanomatériaux semiconducteurs continue de susciter un grand intérêt en raison de leurs propriétés uniques et de leur potentiel d'applications [43].

### **2-7 Le confinement Quantique**

Dans un semiconducteur non dopé, la structure électronique se compose de trois bandes distinctes : la bande de valence, la bande de conduction et la bande interdite qui les sépare. Lorsqu'un photon est absorbé, il est possible de transférer un électron de la bande de valence vers la bande de conduction, créant ainsi un trou par réaction de coulomb.

Selon les travaux de Felix Bloch, le confinement quantique dans un matériau semiconducteur dépend de l'onde de Bloch et est influencé par les dimensions des cristaux. Lorsque la taille des cristaux devient inférieure à deux fois le rayon de l'exciton de Bohr (qui représente la distance caractéristique entre l'électron et le proton), cela entraîne un confinement quantitatif. Ce confinement est provoqué par le stress exercé sur les excitons [43].

#### **2-7-1 Puits, fils et boîtes quantiques**

Les puits quantiques présentent deux degrés de liberté, ce qui signifie que le mouvement se fait dans deux directions (surface), tandis que l'autre direction est quantifiée (confinement 1D). Pour les fils quantiques, le mouvement est restreint à une seule direction (confinement 2D). En revanche, dans le cas des points quantiques, les trois directions sont quantifiées (confinement 3D), comme illustré dans la figure 2-8 [44].

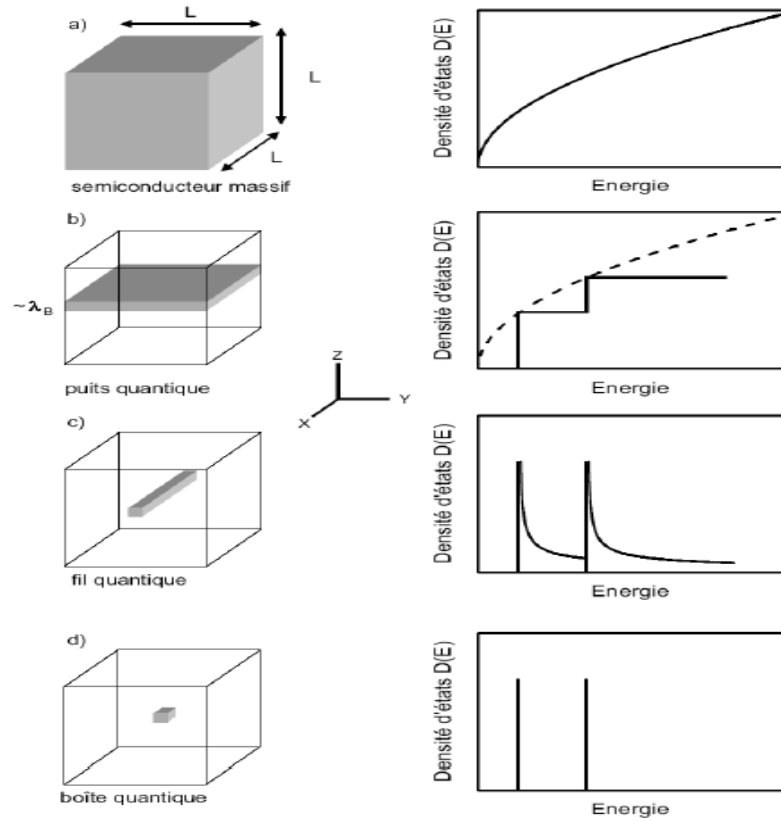


Figure 2-8: Divers types de confinements [44].

### 2-6-2 Excitons en points quantiques

L'exciton est une particule composée d'un électron et d'un trou qui sont liés ensemble par la force de Coulomb. Leur mouvement est fortement influencé par cette interaction, ce qui leur permet de se déplacer comme une seule entité à travers le cristal. Dans les cristaux ioniques, où l'interaction est intense, on parle d'exciton de Frenkel, tandis que dans la plupart des semiconducteurs où l'interaction est plus faible, on parle d'exciton de Wannier. Les excitons peuvent se déplacer librement à travers le cristal ou interagir avec des impuretés et des défauts du réseau, formant ainsi des excitons liés. Ces particules sont responsables des pics d'absorption intenses observés dans la bande interdite des matériaux semiconducteurs. L'Hamiltonien total qui décrit la paire électron-trou (exciton) dans un point quantique est donné par: [44]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 + V_{conf} \tag{1-1}$$

Avec  $V_{conf} = \Delta E_c - \Delta E_v$  (1-2)

$$V_{coul} = \frac{e^2}{\epsilon_0 |r_0 - r_h|} \tag{1-3}$$

Est :

$V_{coul}$ : Le potentiel de confinement

$\Delta E_c$ : La discontinuité de bande de conduction

$\Delta E_v$ : La discontinuité de la bande de valence

$V_{coul}$ : Le potentiel Coulombien.

$\epsilon_0$  : La constante diélectrique du milieu

Pour les PQ infini la fonction d'onde est divisée en deux parties :

$$\Psi(r) = \varphi_n^{XY}(x, y) \zeta_{ei}(Z_e) \zeta_{hj}(Z_h) \quad (1-4)$$

$$\text{Avec } \varphi_n^{XY}(x, y) = U_{c0} U_{v0} \varphi_n^{XY}(x, y) e^{ik_c^{xy} R_{XY}} \quad (1-5)$$

$$R = \frac{m_e x_e + m_h x_h}{m_e + m_h} \quad (1-6)$$

Et  $\varphi_n^{xy}$  la fonction enveloppe de l'exciton dans le plan xy, et  $U_{c0}$  et  $U_{v0}$  sont les fonctions de Bloch. R, représente le centre de masse de l'exciton.

La résolution de l'équation de Schrödinger dans le plan du mouvement (X, Y) est donnée dans ce cas, est une série de pics excitoniques situés à:

$$E_n^{2d} = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_r L^2 Z} - \frac{E_g}{(m - \frac{1}{2})^2} \quad (1-7)$$

Avec n et m des entiers et :

$$E_B = \frac{e^4 m_r}{2\epsilon_0^2 \hbar^2} \quad (1-8)$$

L'énergie de confinement de l'exciton est représentée par le deuxième terme de l'équation, tandis que le troisième terme correspond à l'énergie de liaison résultante de l'interaction coulombienne. Cette énergie de liaison de l'exciton est définie par la masse réduite à deux dimensions:

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (1-9)$$

Le troisième terme dans l'équation donne:

$$E_B^{2d} = 4E_B = E_B^{3d} \quad (1-10)$$

L'énergie de liaison de l'exciton est quatre fois supérieure à celle à 3D, quand le potentiel de confinement est infini ou à deux dimensions.

Le rayon de Bohr à deux dimensions est donné par :

$$a_B^{2d} = a_B^{3d} \left( n - \frac{1}{2} \right) \quad (1-11)$$

## 2-8 Modélisation de l'effet quantique de taille

### 2-8-1 Modélisation

Lorsqu'un semiconducteur est réduit à une taille nanométrique, on observe un effet quantique de taille qui entraîne une augmentation de la bande interdite en fonction du

nombre d'atomes. Cela modifie les propriétés électroniques et optiques des nanoparticules. Un exemple simple de ce phénomène est celui d'une particule confinée dans une boîte.

L'équation de l'énergie cinétique est:

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) \quad (1-12)$$

Les projections du vecteur d'onde  $K$  avec  $K_x$ ,  $K_y$  et  $K_z$ :

$$K_x = \frac{\pi n_x}{L_x} \quad (1-13)$$

$$K_y = \frac{\pi n_y}{L_y} \quad (1-14)$$

$$K_z = \frac{\pi n_z}{L_z} \quad (1-15)$$

La différence entre deux valeurs permises de l'énergie est donnée par l'expression :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{1}{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2} \right) \quad (1-16)$$

L'énergie cinétique d'une particule de masse  $m$  dans une boîte de dimension est :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{1}{d^2} \right) \quad (1-17)$$

L'énergie minimum de la particule dans un boîte quantique est donnée par :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \quad (1-18)$$

### 2-8-2 Effet sur les propriétés électroniques

Le rayon de Bohr ( $r_B$ ) de l'exciton est la distance séparant l'électron et le trou. Il est important de noter que la masse d'un proton est significativement supérieure à celle du trou. La formule du rayon de Bohr est:

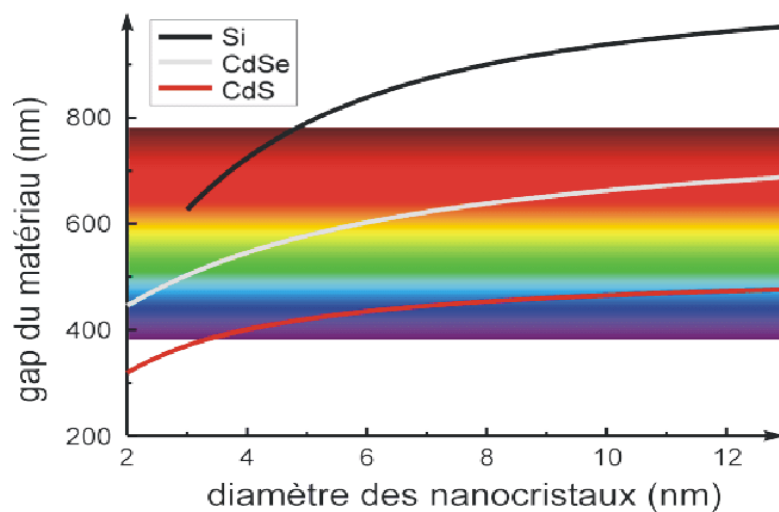
$$r_B = \frac{\hbar^2 \epsilon}{e^2} \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right) \quad (1-19)$$

Lorsque le rayon d'un point quantique (Qd) est inférieur ou égal au rayon de Bohr ( $r_B$ ) de l'exciton, les électrons et les trous se trouvent confinés à l'intérieur de l'espace restreint du point quantique. Cette confinement entraîne une augmentation de l'énergie de transition de l'exciton et un déplacement vers le spectre bleu observé dans la bande d'absorption. Le rayon de Bohr de l'exciton agit comme un seuil critique, et plus le rayon du point quantique est petit, plus l'effet de confinement est marqué. Dans de petits points quantiques, l'énergie de liaison de l'exciton et de la bi-exciton, ainsi que l'énergie d'interaction entre les excitons, sont considérablement plus élevées que dans les matériaux massifs[45]. Ces phénomènes sont directement attribuables à la nature quantique du système.

La réduction de la taille des molécules semiconductrices permet de confiner les niveaux électroniques dans un puits de potentiel dont la taille est comparable aux longueurs d'onde de transition électronique. Cela entraîne un décalage du seuil d'absorption vers des énergies plus élevées, Lorsque la taille des molécules est réduite, la plage de bande interdite devient plus large et cela a un impact sur la structure électronique. [46] Différentes méthodes de calcul des structures électroniques existent, mais la méthode de la masse effective est la plus couramment utilisée. Cette méthode suppose que les fonctions d'onde des porteurs sont le produit d'une fonction de Bloch et d'une fonction enveloppe, et que l'énergie cinétique des électrons et des trous est quantifiée par un potentiel sphérique d'un puits de potentiel de rayon R. Le potentiel coulombien est pris en compte pour tenir compte de l'interaction entre les porteurs [47].

### 2-8-3 Effet sur les propriétés optiques

La méthode employée pour étudier l'impact du confinement sur les propriétés optiques d'un semiconducteur est l'absorption optique. Lorsqu'un exciton est piégé, il contribue à l'absorption. Si le rayon de Bohr effectif de l'exciton est supérieur à la taille de la particule, il est confiné, entraînant ainsi une augmentation de son énergie. De plus, la taille des nanocristaux peut également influencer les propriétés optiques, comme illustré dans la figure (2-9) qui montre la variation de l'écart d'absorption pour différents semiconducteurs. Les nanométaux présentent également une modification des bandes d'absorption en fonction de leur taille. En somme, l'étude des effets de confinement sur les propriétés optiques des matériaux ouvre des perspectives passionnantes pour la recherche et le développement de nouvelles technologies [48].

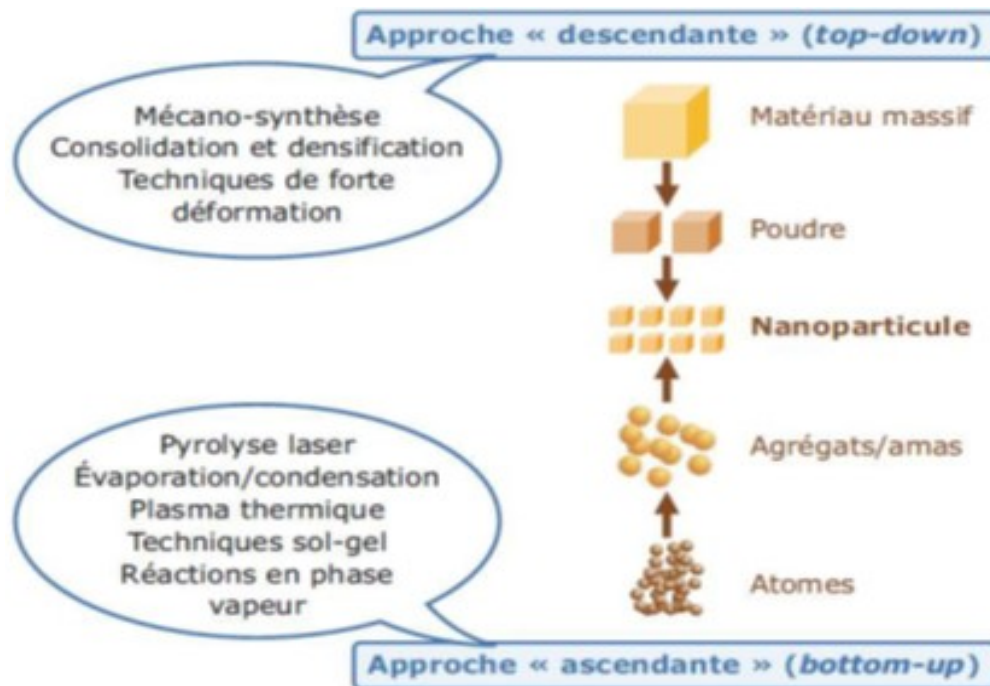


**Figure 2-9:** Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des Nanocristaux [49].

## 2-9 Méthode d'élaboration

### Méthode top down vs bottom up

Pour réduire la taille des granules d'un matériau, on peut soit descendre vers des dimensions plus petites (du haut vers le bas), soit augmenter les dimensions des granules plus petits (du bas vers le haut) comme illustré dans la figure 2-10. Ces deux méthodes sont opposées, car la première méthode vise à réduire la taille des objets ou des granules de plusieurs centaines ou dizaines de milliers de nanomètres, tandis que la seconde vise à augmenter la taille des granules plus petits [50].



**Figure 2- 10:** Schéma illustrant les méthodes d'obtention des nanostructures [50].

### Procédés par voie physique

L'élaboration de nanoparticules par voie physique en phase vapeur consiste à déposer le matériau sous forme solide en utilisant des méthodes telles que le chauffage ou le bombardement. Dans cette approche, il n'y a pas de réactions chimiques, mais plutôt des procédés tels que :

- La pulvérisation cathodique.
- L'ablation laser.
- L'effet joule.
- L'utilisation d'un faisceau d'électrons.

### Procédés par voie chimique

Les nanoparticules peuvent être synthétisées par voie chimique en phase vapeur en utilisant des réactions chimiques activées. Cette méthode peut être réalisée en utilisant soit

l'énergie thermique à pression atmosphérique, soit une assistance de type plasma à radiofréquences, micro-ondes ou laser.

### **Implantation ionique**

L'implantation ionique est une méthode couramment utilisée dans l'industrie des semiconducteurs, y compris pour les matériaux à l'échelle nanométrique. Cette technique implique l'accélération d'ions à des énergies comprises entre 10 et 100 KeV, afin de les faire pénétrer dans le substrat. Après un traitement thermique, des particules de taille nanométrique appropriée peuvent se former. Cette approche a été utilisée avec succès pour implanter divers éléments tels que le Silicium (Si), le Germanium (Ge), le Cobalt (Co), le Nickel (Ni), le Zinc (Zn) et le Tellure (Te) dans une matrice de silice ou de verre, permettant ainsi la formation de nanomatériaux métalliques tels que le Cobalt (Co), le Nickel (Ni) [49].

### **Méthode Sol –Gel**

Soigneusement contrôlée pour obtenir des nanoparticules de la taille et des propriétés souhaitées, la technologie Sol-Gel est une méthode polyvalente pour produire des nanoparticules car elle permet une grande variété de compositions chimiques et de morphologies, allant des particules sphériques aux structures plus complexes. Elle permet de mélanger des ions ou des précurseurs moléculaires dans une solution appelée sol, où des réactions chimiques, telles que l'hydrolyse, génèrent des fonctions réactives de polymérisation conduisant à la gélification. Cette technique trouve une large application dans de nombreux domaines, tels que la catalyse et la médecine en raison de sa capacité à produire des matériaux de haute pureté et à contrôler précisément les propriétés des nanoparticules obtenues. Les paramètres tels que le pH, la température et la concentration des réactifs sont déterminants dans le processus de synthèse [51].

Le pH est un facteur important dans la synthèse de nanoparticules par la méthode Sol Gel. Un pH acide peut accélérer l'hydrolyse mais ralentir la morphogénèse, tandis qu'un pH basique peut accélérer la condensation [52].

### **Méthodes mécaniques:**

La synthèse à l'état solide peut être limitée en termes de production de particules de taille inférieure à 100 nm. Cependant, grâce à de nouvelles innovations dans l'industrie, il est désormais possible de produire des nanoparticules de cette taille en utilisant des systèmes de broyage tels que le Netzsch LMZ-25 ZETA II et le Dyno-Mill ECM. Ces systèmes sont capables de produire des nanoparticules aussi petites que 30 nm en utilisant des particules initiales de 200  $\mu\text{m}$ . Ces avancées technologiques ont permis d'améliorer

considérablement la production de nanoparticules à grande échelle, ce qui ouvre la voie à de nouvelles applications dans de nombreux domaines, notamment la médecine, l'industrie alimentaire et l'environnement [52].

### **2-10 Applications des nanomatériaux semiconducteurs Quantum willinfrared (QWIP)**

L'infrarouge quantique (QWIP) est une nouvelle version de la caméra Il s'agit d'un photo-détecteur infrarouge quantique, qui est le premier modèle développé en mars 2003, le fonctionnement de (QWIP) est basé sur une structure hiérarchique. Un semiconducteur, à base de GaAs multicouche, chacune des couches de GaAs est extrêmement fine [52].

#### **Photovoltaïques**

Les cellules solaires à points quantiques ont effectivement montré une amélioration significative de leur efficacité par rapport aux cellules solaires en Silicium traditionnelles. Cette amélioration est due à la capacité des points quantiques à exploiter plus efficacement le spectre solaire, y compris les photons à énergie inférieure à la bande interdite du matériau. Les points quantiques sont des nanocristaux semiconducteurs de quelques nanomètres de diamètre. En utilisant différents matériaux et tailles de points quantiques, il est possible de modifier les propriétés optiques et électroniques du matériau y compris la bande interdite. En superposant plusieurs couches de points quantiques de différentes tailles, les photons solaires peuvent être absorbés à des énergies différentes, permettant une utilisation plus efficace du spectre solaire. La limite théorique de l'efficacité des cellules solaires à points quantiques est de 86%, ce qui est considérablement supérieur à l'efficacité maximale théorique de 33,7% des cellules solaires en Silicium traditionnelles. Cependant, il est important de noter que cette limite n'a pas encore été atteinte en pratique, et que les cellules solaires à points quantiques actuelles ont encore une marge d'amélioration importante [52].

### **2-11 Conclusions**

En conclusion, la nanoscience et les semiconducteurs sont des domaines extrêmement importants pour le développement de technologies innovantes et de haute performance. Les nanomatériaux semiconducteurs, avec leurs propriétés électroniques et optiques uniques, offrent un potentiel immense pour de nombreuses applications, allant des cellules solaires aux transistors, en passant par les capteurs et les diodes électroluminescentes. Les recherches dans ces domaines continuent d'évoluer rapidement, avec de nouvelles découvertes et avancées qui ouvrent la voie à des développements futurs passionnants.

## Chapitre 3: Résultats et discussion

## Chapitre 3: Résultats et discussion

### 3 -1 Introduction

Les composés semiconducteurs III-V et II-VI se réfèrent à des matériaux qui ont des propriétés optiques et électriques uniques qui les rendent très utiles dans l'industrie électronique et de l'optique, ils ont capté l'attention des chercheurs car ils ont un fort potentiel d'utilisation dans la création et l'amélioration de dispositifs optiques et optoélectroniques [53]. En revanche, la nouvelle classe de matériaux constituée par les nanostructures semiconductrices offre un large éventail d'applications. Les propriétés physiques des matériaux nanostructurés, tels que les points quantiques sphériques semiconducteurs, se situent entre celles des molécules individuelles et celles des semiconducteurs en massif. Cela les rend extrêmement importants dans des applications technologiques telles que les diodes électroluminescentes, l'informatique quantique, les lasers à diode, les cellules solaires et l'imagerie médicale [54-57]. Ces semiconducteurs nanostructurés sont des matériaux semiconducteurs qui ont une structure à l'échelle nanométrique, c'est-à-dire qu'ils ont une taille de l'ordre de 1 à 100 nanomètres (nm). Ces matériaux ont des propriétés optiques, électroniques et diélectriques uniques en raison de leur petite taille, ce qui les rend très utiles.

Notre objectif principal dans cette étude, est d'examiner les niveaux d'énergie électronique et les propriétés optiques et diélectriques des points quantiques sphériques de GaAs, GaP, InP, InAs, AlAs, GaSb, AlSb, MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et d'explorer les propriétés électroniques, optiques et diélectriques de ces matériaux telles que le gap énergétique l'indice de réfraction et la constante diélectrique ainsi que d'étudier leur dépendance vis-à-vis de la taille des points quantiques. Nous nous intéressons particulièrement à l'impact du confinement quantique sur ces propriétés.

Pour atteindre cet objectif, nous avons utilisé des techniques de modélisation numérique tout en tenant compte de la structure cristalline de ces matériaux, qui adopte une configuration de type Zinc-Blende. En analysant ces propriétés à l'échelle nanométrique, nous visons à obtenir une meilleure compréhension des variations et des comportements des matériaux semiconducteurs dans des dimensions réduites.

Cette étude revêt une grande importance, car elle peut fournir des informations précieuses pour le développement de dispositifs nanoélectroniques et optoélectroniques

avancés. En comprenant comment les propriétés électroniques, optiques et diélectriques sont modifiées en raison du confinement quantique, nous pourrions ouvrir la voie à de nouvelles applications et améliorations technologiques dans ces domaines.

### 3-2 Etude des propriétés électroniques

Nous effectuons principalement nos calculs en utilisant la méthode empirique de pseudopotentiel [58-59], cette méthode implique la création d'une combinaison linéaire de potentiels atomiques afin d'obtenir le potentiel du cristal, tout en l'ajustant pour reproduire le gap énergétique expérimental aux points sélectionnés de la zone de Brillouin [20, 53], même à l'échelle nanométrique, notre approche a donné des résultats satisfaisants [60-63]. Pour déterminer les facteurs de forme pseudopotentiels (PPFF), nous adaptons les facteurs de forme atomiques à l'expérience. L'optimisation des PPFF est réalisée en utilisant une méthode de moindres carrés non linéaire, comme décrit dans les références [61-63], afin de minimiser l'écart des niveaux d'énergie.

$$\delta = \left[ \sum \frac{(\Delta E_{ij})^2}{(m-n)} \right]^{1/2} \quad (3-1)$$

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{exp} - E_{ij}^{cal} \quad (3-2)$$

Les énergies observées et calculées, notées respectivement  $E_{ij}^{exp}$  et  $E_{ij}^{cal}$  représentent les énergies entre l'état  $i$  avec  $k = k_i$  et l'état  $j$  avec  $k = k_j$  de la même paire  $(i, j)$ ,  $n$  représente le nombre de paramètres du pseudopotentiel empirique. Les valeurs des facteurs de forme sont ajustées itérativement afin de minimiser l'écart des niveaux d'énergie  $\delta$  [64-66]. Dans la méthode du pseudopotentiel local, les facteurs de forme dépendent du point sélectionné dans la zone de Brillouin.

L'obtention des résultats précis et cohérents entre les résultats expérimentaux et les résultats semi-empiriques a une importance majeure, pour atteindre cet objectif, une méthode d'interpolation quadratique a été utilisée, accordant une grande priorité à l'obtention d'un accord étroit entre la plus grande bande de valence et la plus basse bande de conduction au point spécifique mentionné, faisant référence à la source [58].

Pour étudier les boîtes quantiques, nous avons réduit la dimensionnalité de l'environnement des électrons à zéro dimension. Des conditions aux limites appropriées ont été imposées aux fonctions d'onde, qui dépendent à la fois de la taille et de la forme des points quantiques afin de voir l'effet du confinement quantique sur la bande interdite fondamentale des semiconducteurs III-V et II-VI, les points quantiques sont déterminés en

utilisant la même approche comme celui utilisé dans les références [67-68]. Les masses effectives des 'électrons et des trous des semiconducteurs III-V et II-VI en massif sont obtenues en utilisant une méthodologie similaire à celle utilisée par Bouarissa [69].

Les tableaux 3-1 et 3-2 présentent respectivement les facteurs de forme symétriques et antisymétriques du pseudopotentiel local pour les composés semiconducteurs binaires III-V et II-VI objet de notre étude. Les paramètres de réseau correspondants sont répertoriés dans les tableaux 3-3 et 3-4.

**Tableau 3-1:** Les paramètres de pseudopotentiel utilisés pour les composés GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP en massif.

Composé	Facteurs de forme (Ryd)					
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
<i>GaAs</i> <sup>a)</sup>	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01
<i>InAs</i> <sup>b)</sup>	-0.217669	0.011	0.041633	0.054731	0.039485	0.024
<i>InP</i> <sup>c)</sup>	-0.213870	0.0	0.070502	0.088816	0.06	0.03
<i>AlAs</i> <sup>d)</sup>	-0.212694	0	0.092750	0.068833	0.05	-0.0075
<i>AlSb</i> <sup>d)</sup>	-0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	-0.0075
<i>GaP</i> <sup>e)</sup>	-0.210510	0.03	0.072244	0.132668	0.07	0.02
GaSb	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01

<sup>a)</sup> [70], <sup>b)</sup> [71], <sup>c)</sup> [72], <sup>d)</sup> [73], <sup>e)</sup> [74].

**Tableau 3-2:** Les paramètres de pseudopotentiel des composés MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe en massif.

Composé	Facteurs de forme (Ryd)					
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
<i>MgSe</i> <sup>(a)</sup>	-0.241454	0.026	0.05	0.15	0.089	-0.03
<i>CdTe</i> <sup>(b)</sup>	-0.3964	0.1983	0.4595	0.1311	0.2800	0.7081
<i>ZnS</i> <sup>(a)</sup>	-0.312939	0.021262	0.170554	0.030061	0.116	0.129269
<i>ZnSe</i> <sup>(a)</sup>	-0.207808	-0.008	0.036046	0.342762	0.099	0.022
<i>ZnTe</i> <sup>(c)</sup>	-0.22	0	0.05	0.13	0.1	-0.01

<sup>a)</sup> [75], <sup>b)</sup> [76], <sup>c)</sup> [77].

**Tableau 3-3:** Les paramètres du réseau des composés semiconducteurs III-V.

	GaAs	InAs	InP	AlAs	AlSb	GaP	GaSb
Paramètres de maille $a$ (Å) <sup>a)</sup>	5.65	6.05	5.86	5.66	6.13	5.45	6.11

<sup>a)</sup> [78].

**Tableau 3-4:** Les paramètres du réseau des composés semiconducteurs II-VI.

	MgSe	CdTe	ZnS	ZnSe	ZnTe
Paramètres de maille $a$ (Å) <sup>a)</sup>	5.91	6.48	5.41	5.66	6.10

<sup>a)</sup> [78]

Les facteurs de forme symétriques ( $V_S$ ) et antisymétriques ( $V_A$ ) ajustés en unités de Rydberg pour les semiconducteurs III-V et II-VI sont utilisés afin de calculer les gaps d'énergie en massif ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma}^X$ ,  $E_{\Gamma}^L$ ). Il est important de mentionner que nous avons aussi effectué des calculs en utilisant les paramètres de réseau convertis en unité atomique. Nous avons observé une excellente concordance entre nos résultats et les valeurs théoriques illustrées dans les tableaux 3-5 et 3-6.

**Tableau 3-5:** Les gaps d'énergie calculés en massif pour les composés semiconducteurs GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP comparés à des valeurs théoriques.

Composé	Gaps d'énergie théorique (eV)			Gaps d'énergie calculés (eV)		
	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^L$	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^L$
GaAs	1.42 <sup>a)</sup>	1.81 <sup>a)</sup>	1.72 <sup>a)</sup>	1.42	1.81	1.72
InAs	0.36 <sup>b)</sup>	0.37 <sup>b)</sup>	1.07 <sup>b)</sup>	0.36	1.37	1.07
InP	1.35 <sup>c)</sup>	2.21 <sup>c)</sup>	2.05 <sup>c)</sup>	1.35	2.21	2.05
AlAs	2.95 <sup>f)</sup>	2.16 <sup>f)</sup>	2.36 <sup>f)</sup>	2.95	2.15	2.36
AlSb	2.30 <sup>e)</sup>	1.615 <sup>e)</sup>	2.211 <sup>e)</sup>	2.30	1.62	2.21
GaP	2.78 <sup>g)</sup>	2.26 <sup>g)</sup>	2.6 <sup>g)</sup>	2.78	2.25	2.59
GaSb	0.72 <sup>d,e)</sup>	1.05 <sup>d,e)</sup>	0.78 <sup>d,e)</sup>	0.72	1.05	0.78

<sup>a)</sup> [79], <sup>b)</sup> [78], <sup>c)</sup> [72], <sup>d)</sup> [80], <sup>e)</sup> [81], <sup>f)</sup> [82], <sup>g)</sup> [83].

**Tableau 3-6:** Les gaps d'énergie calculés en massif des composés semiconducteurs CdTe, MgSe, ZnS, ZnSe, ZnTe comparés à des valeurs expérimentales et théoriques.

Composé	Gaps d'énergie théorique (eV)			Gaps d'énergie calculés (eV)		
	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^{\times}$	$E_{\Gamma}^L$	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^{\times}$	$E_{\Gamma}^L$
MgSe	4 <sup>a)</sup>	3.2 <sup>a)</sup>	4.19 <sup>b)</sup>	4.00	3.20	4.19
CdTe	1.51 <sup>a)</sup>	3.48 <sup>a)</sup>	2.47 <sup>c)</sup>	1.51	3.48	2.47
ZnS	3.726 <sup>a)</sup>	5.14 <sup>a)</sup>	4.81 <sup>b)</sup>	3.726	5.14	4.81
ZnSe	2.721 <sup>a)</sup>	3.4 <sup>a)</sup>	3.8 <sup>b)</sup>	2.721	3.40	3.80
ZnTe	2.27 <sup>a)</sup>	3.05 <sup>a)</sup>	2.38 <sup>d)</sup>	2.27	3.05	2.38

<sup>a)</sup> [78], <sup>b)</sup> [75], <sup>c)</sup> [84], <sup>d)</sup> [85].

### 3-2-1 Méthode de la masse effective

Nous avons utilisé le modèle de la masse effective pour de déterminer le gap énergétique à l'échelle nanométrique. Ces grandeurs sont calculées comme suit:

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left[ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] \quad (3-3)$$

Le paramètre  $E_g^0$  correspond au gap du matériau semiconducteur massif.  $E_g$  est le gap du matériau lorsque ce dernier prend la forme d'un point quantique sphérique de rayon  $a$ , ( $m_e^*$ ) et ( $m_h^*$ ) sont les masses effectives de l'électron et du trou respectivement, ( $\hbar$ ) est la constante de Planck réduite. Cependant, cette expression ne concorde pas avec les résultats expérimentaux. Afin d'améliorer ce modèle, un terme noté  $V_c$  est introduit, ce terme représente l'énergie coulombienne d'interaction entre l'électron et le trou [74].

$$V_c = -\frac{ce^2}{\epsilon a} \quad (3-4)$$

$\epsilon$  étant est la constante diélectrique du matériau massif de l'ordre de (1,8 [76] ; 1,786 [77]), dans ce cas l'équation 3-3 devient :

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left[ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] - \frac{1.8e^2}{\epsilon a} \quad (3-5)$$

Ainsi que dans le but d'analyser l'effet du confinement quantique sur les propriétés électroniques, nous avons calculé le gap énergétique fondamental en fonction du rayon du point quantique ( $a$ ) exprimé en nanomètres pour une gamme de composés semiconducteurs de type III-V tels que le GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP, ainsi que pour les semiconducteurs II-VI tels que le MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe. Les valeurs théoriques

des gaps énergétiques (Tableau 3-5, 3-6) et les masses effectives de l'électron et du trou (Tableau 3-7, 3-8) ont été utilisées pour ces calculs.

**Tableau 3-7:** Masses effectives  $m_e^*$  et  $m_h^*$  pour les matériaux de type III-V.

Composé	Masses effectives des électrons $\frac{m_e^*}{m_0^a}$	Masses effectives des trous $\frac{m_h^*}{m_0^a}$
GaAs	0.067	0.55
InAs	0.024	0.36
InP	0.07927	0.69
AlAs	0.124	0.81
AlSb	0.14	0.9
GaP	0.114	0.52
GaSb	0.05 <sup>b)</sup>	0.31 <sup>b)</sup>

<sup>a)</sup> [78], <sup>b)</sup> Nos Calculs

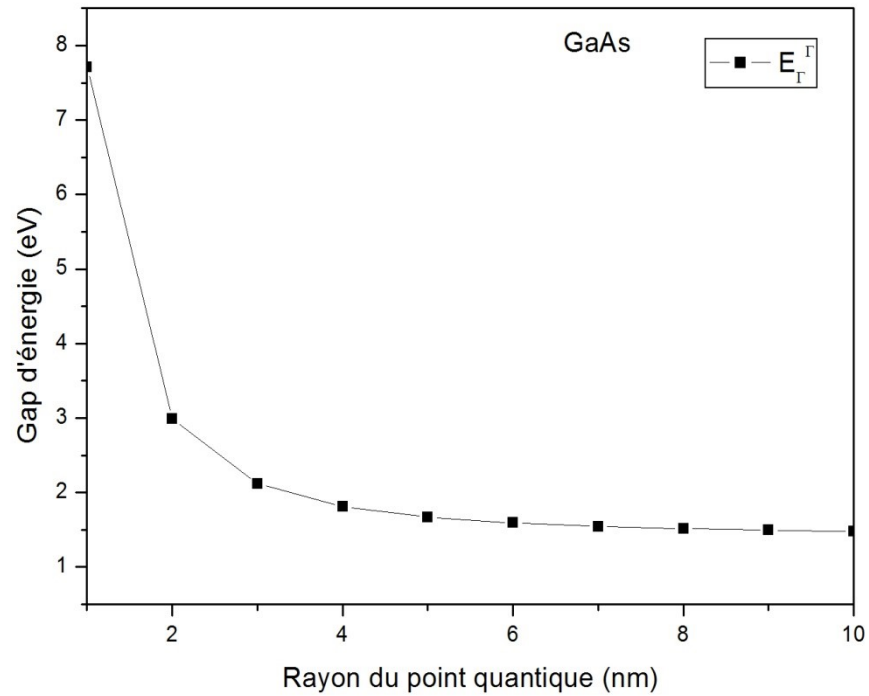
**Tableau 3-8:** Masses effectives  $m_e^*$  et  $m_h^*$  pour les matériaux de type II-VI.

Composé	Masses effectives des électrons $\frac{m_e^*}{m_0^a}$	Masses effectives des trous $\frac{m_h^*}{m_0^a}$
MgSe	0.20	0.88
CdTe	0.09	0.82
ZnS	0.20	1.42
ZnSe	0.137	0.82
ZnTe	0.117	0.67

<sup>a)</sup> [81].

Les calculs des gaps énergétiques ont été fait pour une large plage de rayon des points quantiques, allant de  $a = 1$  nm à  $a = 10$  nm. Lorsque le rayon atteint 100 nm, le matériau retrouve sa forme massive. Les courbes suivantes illustrent les variations du gap énergétique direct  $E_F^\Gamma$  pour les composés GaAs, InAs et InP. Ces composés présentent un gap direct dans leur forme massive. Cependant, leur étude à l'échelle nanométrique révèle une diminution non linéaire du gap énergétique. En d'autre terme, le gap énergétique direct  $E_F^\Gamma$  diminue à mesure que la taille du point quantique augmente en raison de l'effet du confinement quantique sur le gap énergétique. Cependant, cette diminution du gap se stabilise autour d'une valeur d'environ 6 nm pour le rayon du point quantique. Ce

comportement est similaire pour les composés étudiés, tels que le GaAs, InAs et InP. Cependant, il faut dire que chaque matériau a sa propre valeur de gap.



**Figure 3-1:** Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du GaAs en fonction du rayon du point quantique.

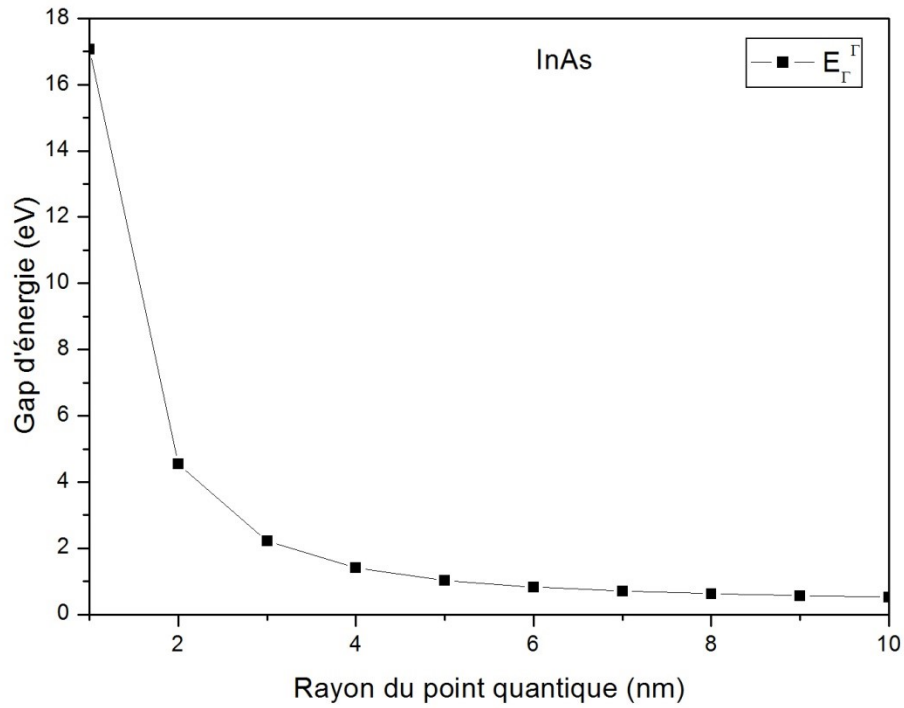


Figure 3-2: Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du InAs en fonction du rayon du point quantique.

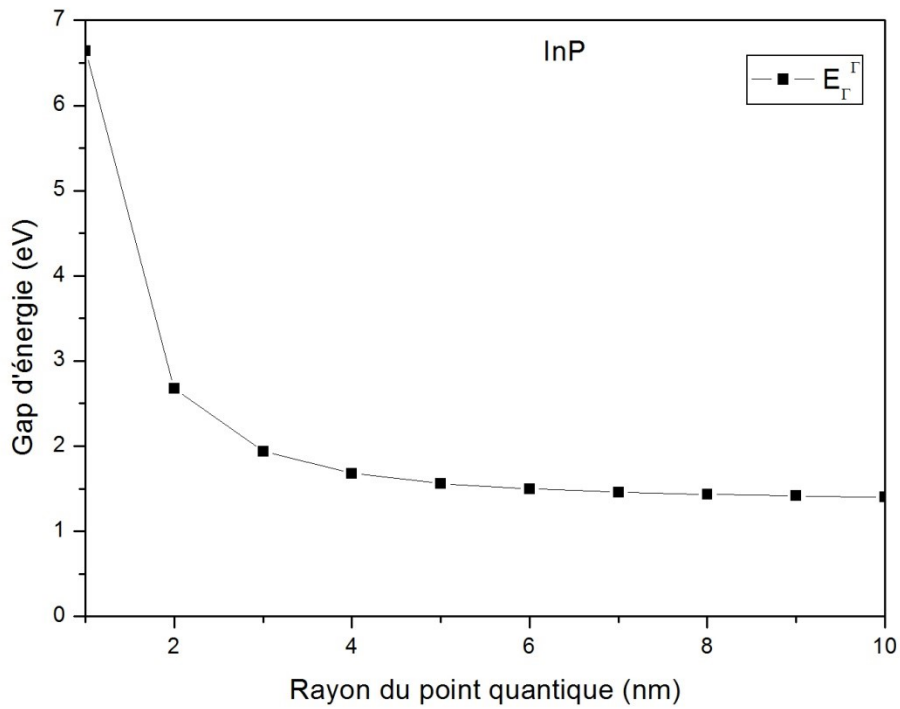


Figure 3-3: Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du InP en fonction du rayon du point quantique.

Les équations des ajustements polynomiaux de deuxième ordre pour le gap énergétique direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  de chaque matériau semiconducteur nanostructuré sont les suivantes:

GaAs :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 7.85963 - 1.98486a + 0.14163a^2 \quad (3-6)$$

InAs :

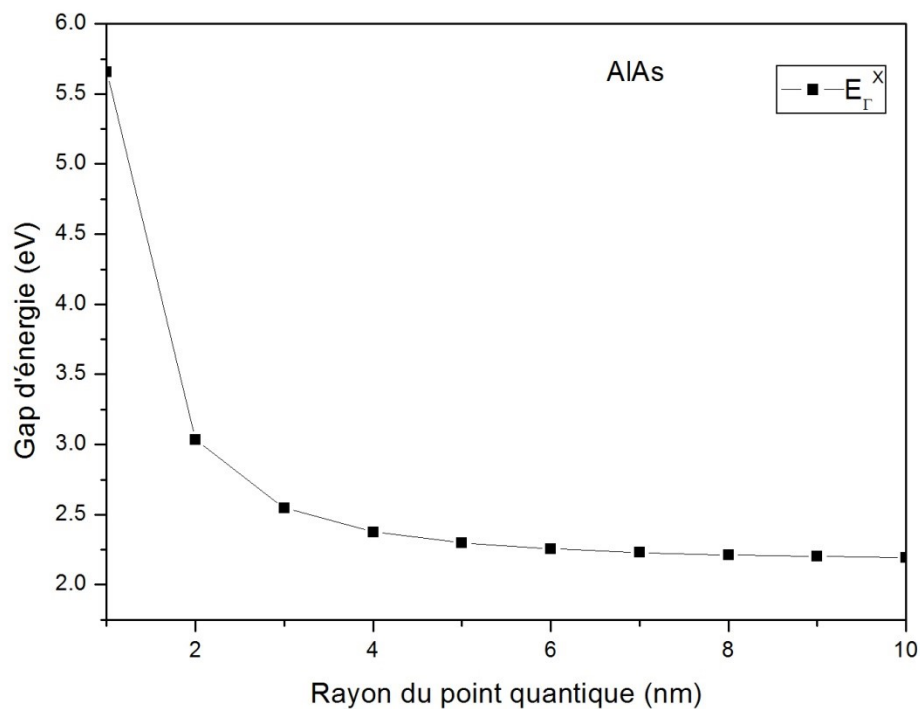
$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 17.45313 - 5.26858a + 0.37592a^2 \quad (3-7)$$

InP :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 6.75962 - 1.66736a + 0.11892a^2 \quad (3-8)$$

Ces équations présentent une modélisation du gap  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction du rayon de point quantique.

Pour les composés AlAs, AlSb et GaP sont à gap indirect  $E_{\Gamma}^{\text{X}}$ , la variation de leur gap énergétique en fonction du rayon en nanomètre est donnés dans les illustrations qui suivent:



**Figure 3-4:** Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^{\text{X}}$ ) du AlAs en fonction du rayon du point quantique.

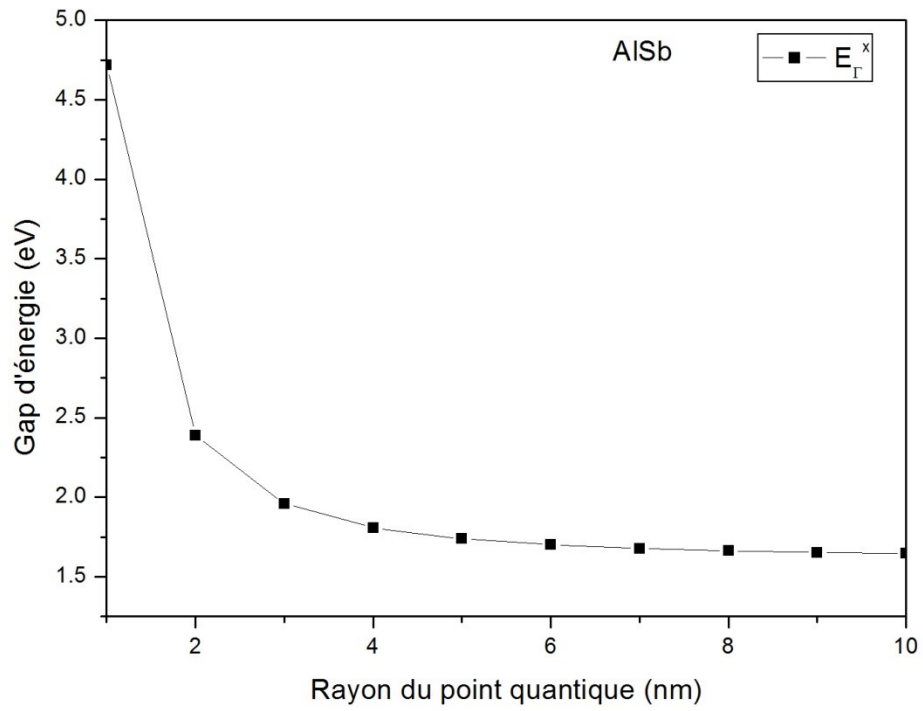


Figure 3-5: Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^X$ ) du AlSb en fonction du rayon du point quantique.

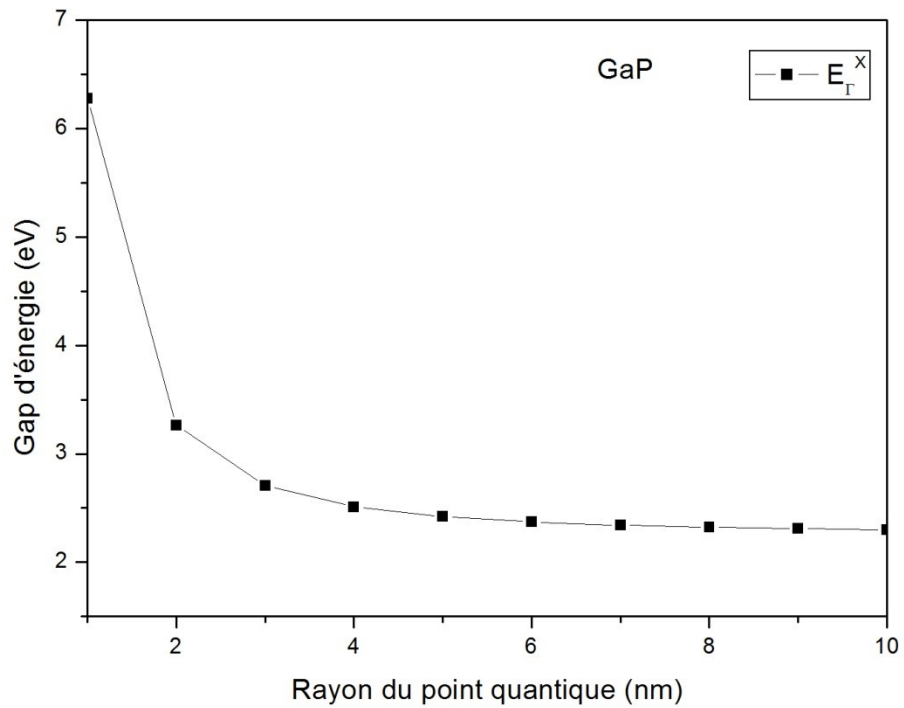


Figure 3-6: Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^X$ ) du GaP en fonction du rayon du point quantique.

Malgré la différence de la nature du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  (gap direct) pour le GaAs, InAs, InP, et  $E_{\Gamma}^{\chi}$  (gap indirect) pour le AlAs, AlSb et GaP le comportement du gap est la même, Nous constatons une relation inverse entre le rayon du point quantique et le gap énergétique, l'augmentation du rayon entraîne une diminution du gap énergétique. Cela est expliqué par l'effet du confinement quantique sur le gap énergétique qui est très important et influe les autres propriétés physiques. Les équations des fits quadratiques de deuxième ordre des gaps indirect sont les suivantes:

$$E(a) = A + Ba + Ca^2 \quad (3-9)$$

AlAs:

$$E_{\Gamma}^{\chi}(a) = 5.73695 - 1.10268a + 0.0786a^2 \quad (3-10)$$

AlSb:

$$E_{\Gamma}^{\chi}(a) = 4.78868 - 0.9783a + 0.06981a^2 \quad (3-11)$$

GaP:

$$E_{\Gamma}^{\chi}(a) = 6.37355 - 1.26792a + 0.09847a^2 \quad (3-12)$$

### 3-2-2 Les transitions des gaps énergétiques

Nous avons tracé les gaps énergétiques directs ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et indirects ( $E_{\Gamma}^{\chi}$ ,  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) sur une même figure pour chaque matériau semiconducteur nanostructuré, InAs, InP, AlAs, AlSb et GaP, afin d'observer une éventuelle transition de ces gaps pour une plage allant de 1 nm à 10 nm. Les résultats de ces analyses sont illustrés dans les figures suivantes:

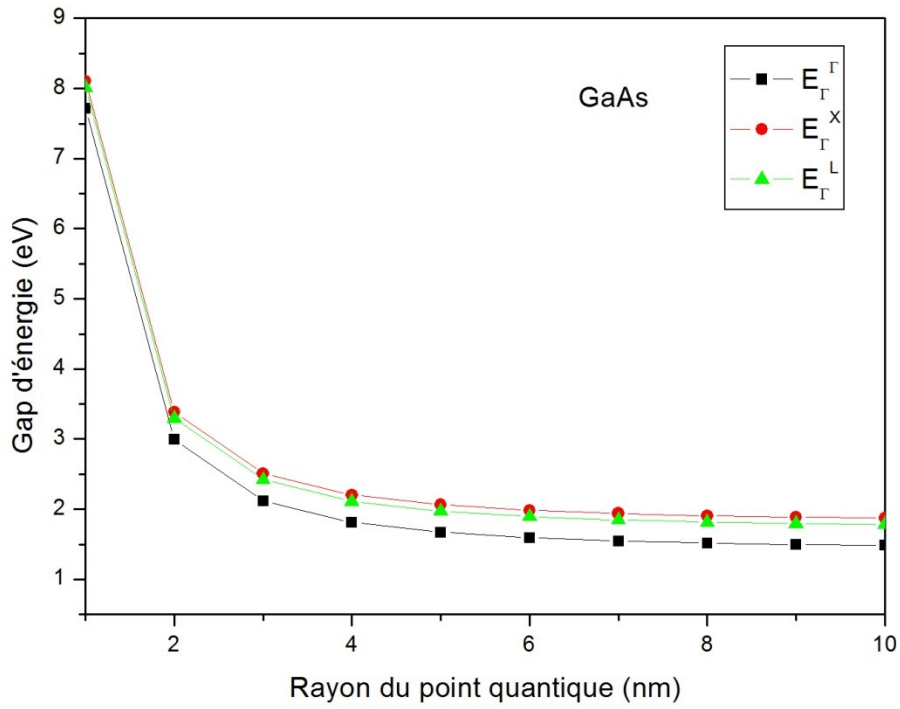


Figure 3-7: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du GaAs en fonction du rayon a.

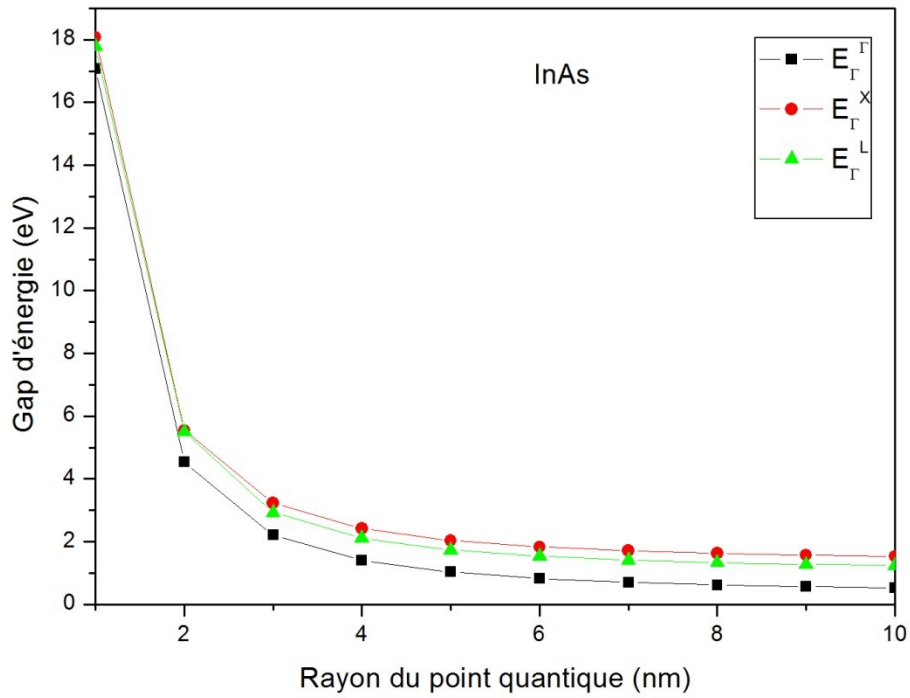


Figure 3-8: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) de InAs en fonction du rayon a.

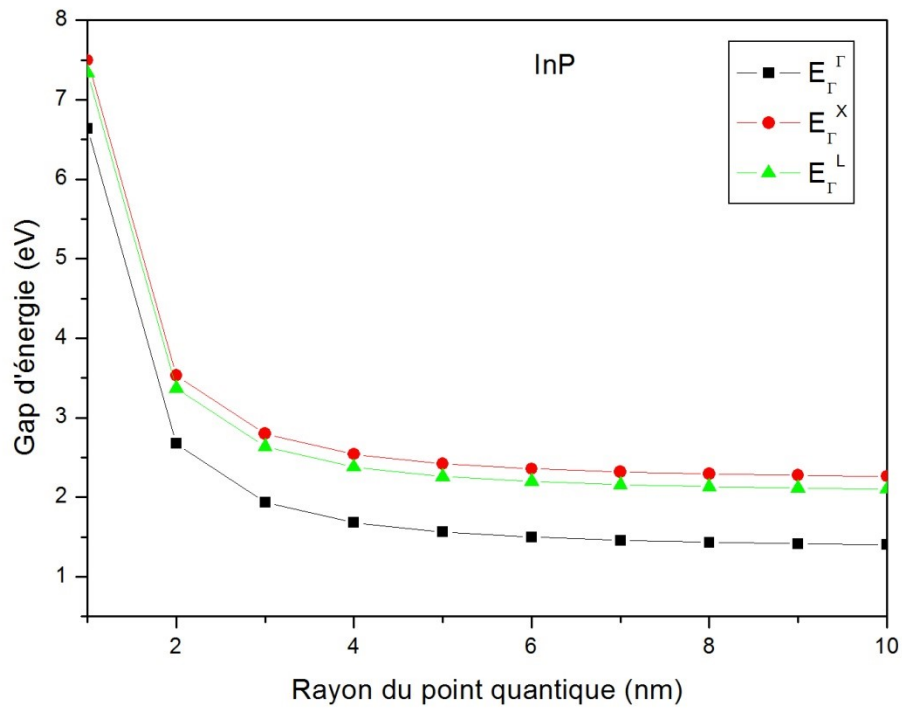


Figure 3-9: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du InP en fonction du rayon a

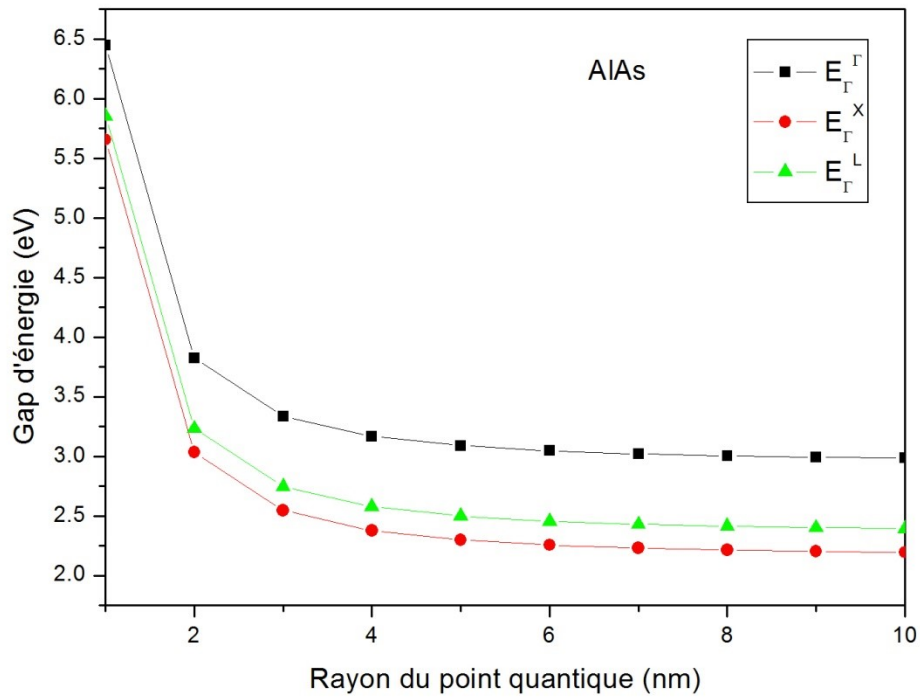


Figure 3-10: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du AlAs en fonction du rayon a.

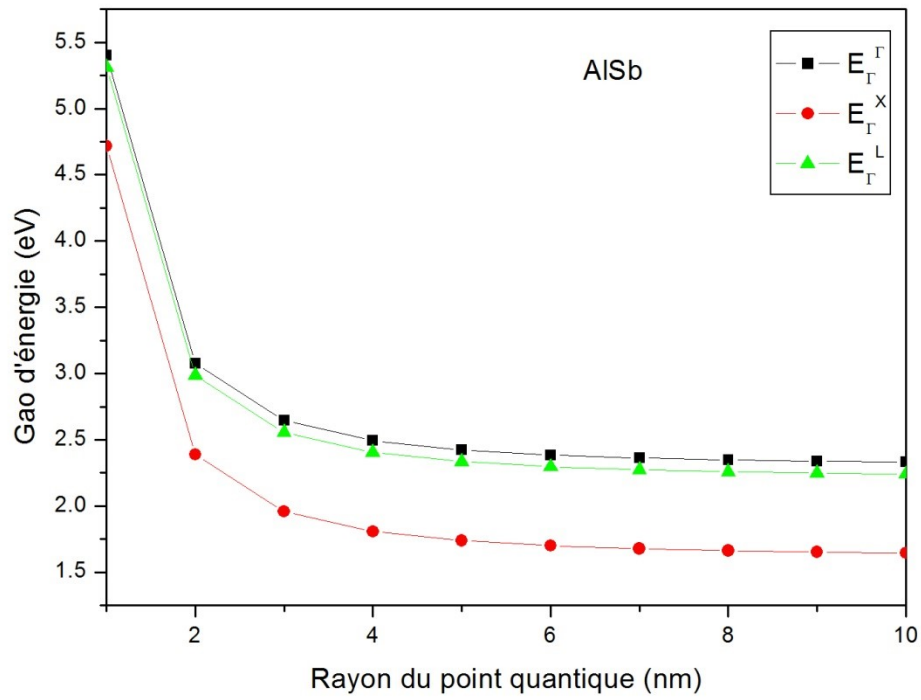


Figure 3-11: Gap direct ( $E_{\Gamma\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma\Gamma}^L$ ) du AlSb en fonction du rayon a.

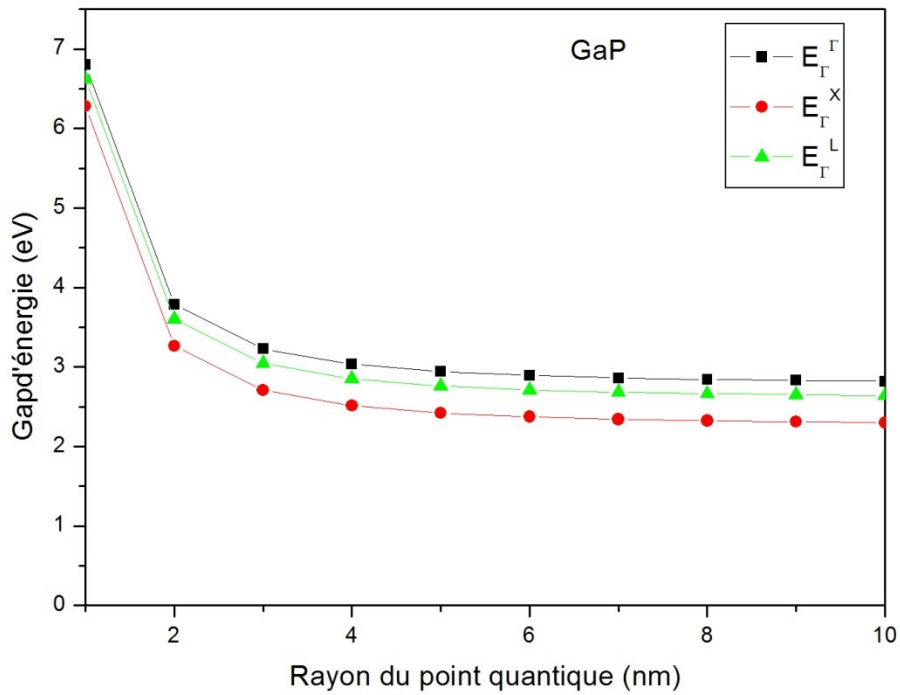


Figure 3-12: Gap direct ( $E_{\Gamma\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma\Gamma}^L$ ) du GaP en fonction du rayon a.

Le tableau 3-9 résume les différentes transitions possibles de gap ainsi que la valeur du rayon (a) pour l'ensemble des figures 3 (7-12) des composés nanostructurés objet de notre étude.

**Tableau 3-9:** Transitions de gaps énergétiques des composés semiconducteurs III-V.

Composés	Transition	Rayon du point quantique (nm)	Gap avant	Gap après
GaAs	Aucune transition	Pas de valeur	$E_{\Gamma}^F$	$E_{\Gamma}^F$
InAs	Aucune transition	Pas de valeur	$E_{\Gamma}^F$	$E_{\Gamma}^F$
InP	Aucune transition	Pas de valeur	$E_{\Gamma}^F$	$E_{\Gamma}^F$
AlAs	Aucune transition	Pas de valeur	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^X$
AlSb	Aucune transition	Pas de valeur	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^X$
GaP	Aucune transition	Pas de valeur	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^X$

L'application de la méthode de la masse effective, nous a permis d'effectuer les calculs des gaps énergétiques pour différents composés. Les résultats sont présentés dans le tableau 3-10. Il est important de mentionner que les valeurs des gaps sont obtenues pour un rayon de 100 nm.

**Tableau 3-10:** Gaps d'énergie des composés III-V obtenues par la méthode de la masse effective, comparées à des données théoriques.

Composés	$E_{\Gamma}^F$	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^L$
GaAs	1.43 <sup>a)</sup> 1.42 <sup>b)</sup> 1.42 <sup>c)</sup>	1.91 <sup>a)</sup> 1.81 <sup>b)</sup> 1.81 <sup>c)</sup>	1.72 <sup>a)</sup> 1.72 <sup>b)</sup> 1.72 <sup>c)</sup>
InAs	0.36 <sup>a)</sup> 0.36 <sup>b)</sup> 0.36 <sup>d)</sup>	1.37 <sup>a)</sup> 1.37 <sup>b)</sup> 1.37 <sup>d)</sup>	1.07 <sup>a)</sup> 1.07 <sup>b)</sup> 1.07 <sup>d)</sup>
InP	1.35 <sup>a)</sup> 1.35 <sup>b)</sup> 1.35 <sup>e)</sup>	2.21 <sup>a)</sup> 2.21 <sup>b)</sup> 2.21 <sup>e)</sup>	2.05 <sup>a)</sup> 2.05 <sup>b)</sup> 2.05 <sup>e)</sup>
AlAs	3.01 <sup>a)</sup> 2.95 <sup>b)</sup> 2.95 <sup>h)</sup>	2.15 <sup>a)</sup> 2.15 <sup>b)</sup> 2.16 <sup>h)</sup>	2.37 <sup>a)</sup> 2.36 <sup>b)</sup> 2.36 <sup>h)</sup>
AlSb	2.27 <sup>a)</sup> 2.30 <sup>b)</sup> 2.30 <sup>g)</sup>	1.62 <sup>a)</sup> 1.62 <sup>b)</sup> 1.62 <sup>g)</sup>	2.21 <sup>a)</sup> 2.21 <sup>b)</sup> 2.2 <sup>g)</sup>
GaP	2.76 <sup>a)</sup> 2.78 <sup>b)</sup> 2.78 <sup>i)</sup>	2.26 <sup>a)</sup> 2.25 <sup>b)</sup> 2.26 <sup>i)</sup>	2.63 <sup>a)</sup> 2.59 <sup>b)</sup> 2.6 <sup>i)</sup>

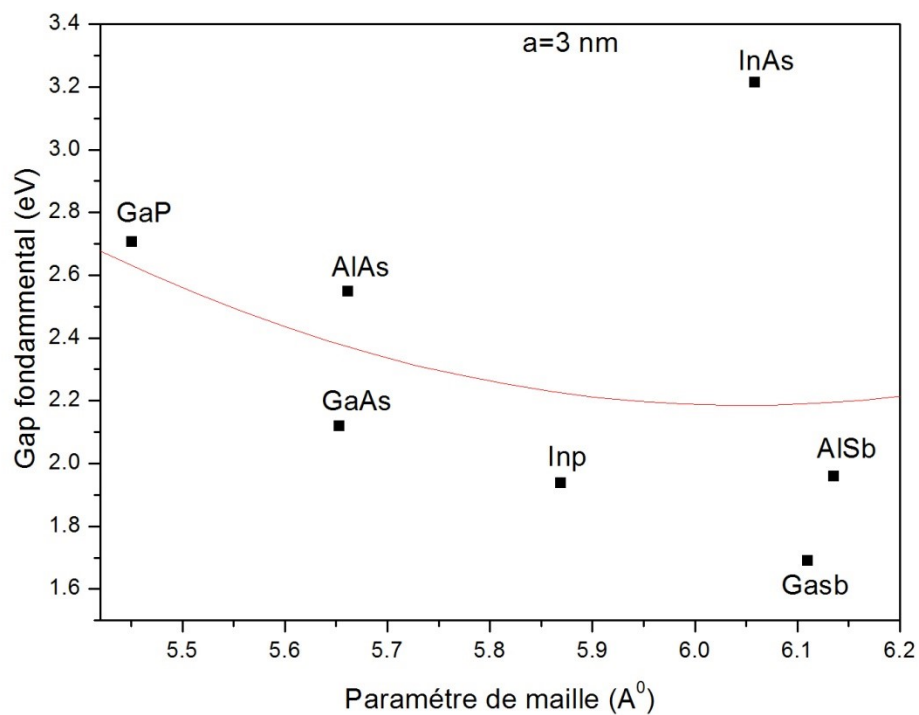
<sup>a)</sup> Les résultats de nos calculs effectués à l'aide de la méthode de la masse effective

<sup>b)</sup> Les résultats de nos calculs réalisés en utilisant la méthode du pseudo-potentiel.

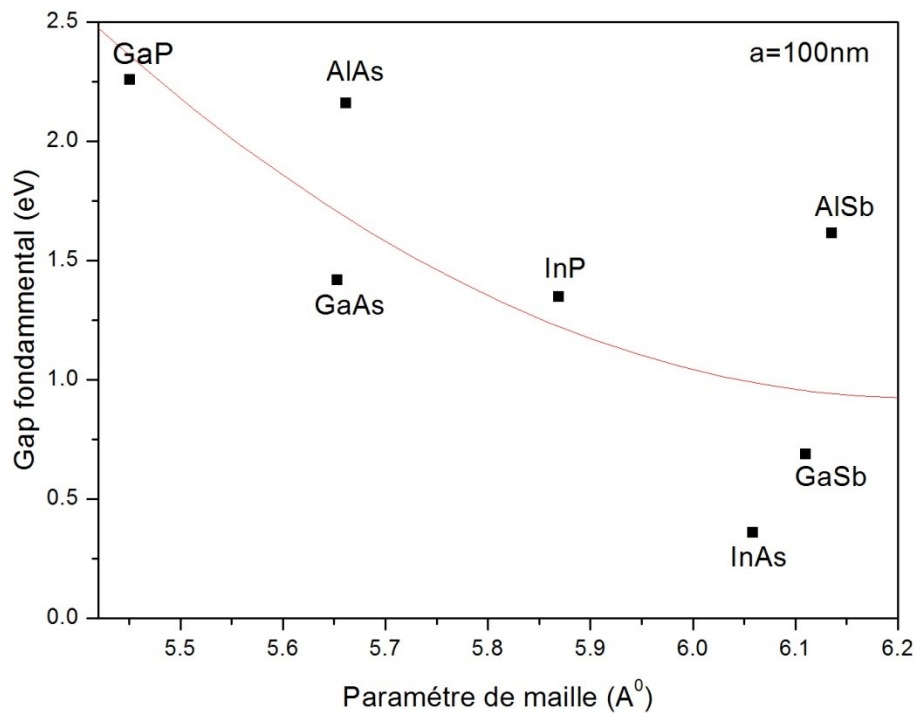
<sup>c)</sup> [79], <sup>b)</sup> [60], <sup>e)</sup> [75], <sup>f)</sup> [80], <sup>g)</sup> [81], <sup>h)</sup> [82], <sup>i)</sup> [83].

Les valeurs calculés par la méthode de la masse effective convergent à celles trouvées par la méthode de pseudopotentiel Il faut dire que ces résultats concordent bien avec les données théoriques rapportées dans les références indiquées.

Nous avons vu nécessaire de faire une corrélation entre le gap énergétique fondamental et le paramètre de réseau dans le but d'aboutir à une modélisation dans ce sens. La variation du gap énergétique fondamental des composés semiconducteurs binaires (GaAs, InAs, InP, AlAs, AlSb et GaP) en fonction du paramètre de réseau pour des valeurs de ( $a=3$  nm et  $a=100$  nm) est illustrée dans les figures ci-dessous:



**Figure 3-13:** Gap fondamental en fonction de paramètre du réseau ( $a=3$ nm).



**Figure 3-14:** Gap fondamental en fonction de paramètre du réseau ( $a=100$  nm)

Le GaP présente un gap fondamental particulièrement large, tandis que l'AlSb présente un gap fondamental inférieur (figure 3-13). Ainsi, nous pouvons conclure que le matériau qui a le paramètre de réseau le plus grand présente un gap fondamental plus faible. Les équations de l'ajustement quadratique du gap fondamental pour les composés semiconducteurs nanostructurés (GaAs, InAs, InP, AlAs, AlSb, GaP) en fonction du paramètre de réseau pour un rayon de point quantique ( $a = 3$  nm) et ( $a = 100$  nm) sont les suivantes:

$$a=3 \text{ nm} : E_g(x) = 89.87181 - 30.00877x + 2.56974x^2 \quad (3-13)$$

$$a=100 \text{ nm} : E_g(x) = 161.60299 - 55.63493x + 4.78075x^2 \quad (3-14)$$

x: est le paramètre de réseau

### 3-3 Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction)

L'indice de réfraction ( $n$ ) est un paramètre clé dans l'étude des propriétés optiques des matériaux semiconducteurs III-V, il est étroitement lié au gap d'énergie fondamental ( $E_g$ ). Il joue un rôle essentiel dans la fabrication de panneaux solaires et des fibres optiques. Différents modèles ont été développés pour calculer ce paramètre, Moss a établi

une relation entre l'indice de réfraction  $n$  et le gap énergétique  $E_g$  en se basant sur le modèle atomique. La formule de Moss est exprimée comme suit [86]:

$$n^4 E_g = k \quad (3-15)$$

Où la constante  $k=108$  eV est établie par Ravindra et Srivastava [87]. La forme linéaire de Ravindra [88] est:

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (3-16)$$

avec  $\alpha = 4.16$  eV et  $\beta = -0.85$  eV<sup>-1</sup>

La forme linéaire de Gupta et Ravindra [89] :

$$n = \alpha + b E_g \quad (3-17)$$

Où  $\alpha = 4.084$  et  $b = -0.62$  eV<sup>-1</sup>

La relation empirique de Hervé et Vandamme donnée par [90]:

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \quad (3-18)$$

Avec  $A=13.6$  eV et  $B=3.4$  eV

La relation de Reddy et Anjaneyulu [91] :

$$E_g e^n = 36.3 \quad (3-19)$$

La relation empirique de Reddy et Ahammed [92] :

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154 \quad (3-20)$$

Une attention particulière a été accordée au changement de l'indice de réfraction sur une plage de 1 nm à 10 nm du rayon du point quantique, afin d'observer de près cette variation et d'obtenir ses valeurs. Les relations empiriques citées ci-dessus, sont utilisées dans notre étude pour calculer et analyser cette variation des composés binaires GaAs, InAs, InP, AlAs, AlSb et GaP, par rapport au rayon du point quantique ( $a$ ). Cette analyse nous a permis d'observer le comportement de ce paramètre physique. Les valeurs obtenues sont présentés dans les figures suivantes:

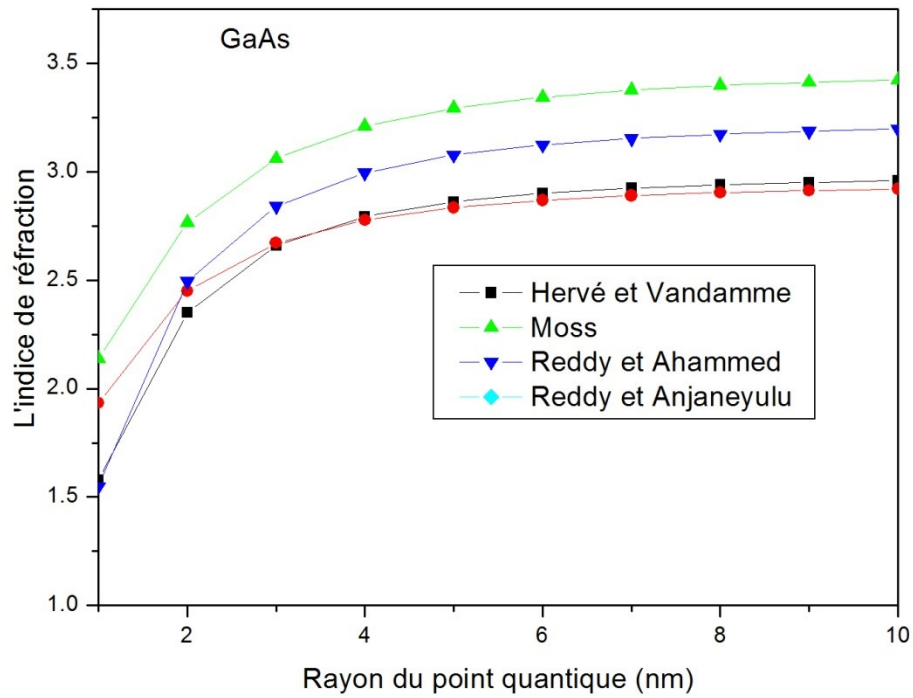


Figure 3-15: Changement d'indice de réfraction du GaAs en fonction du rayon a

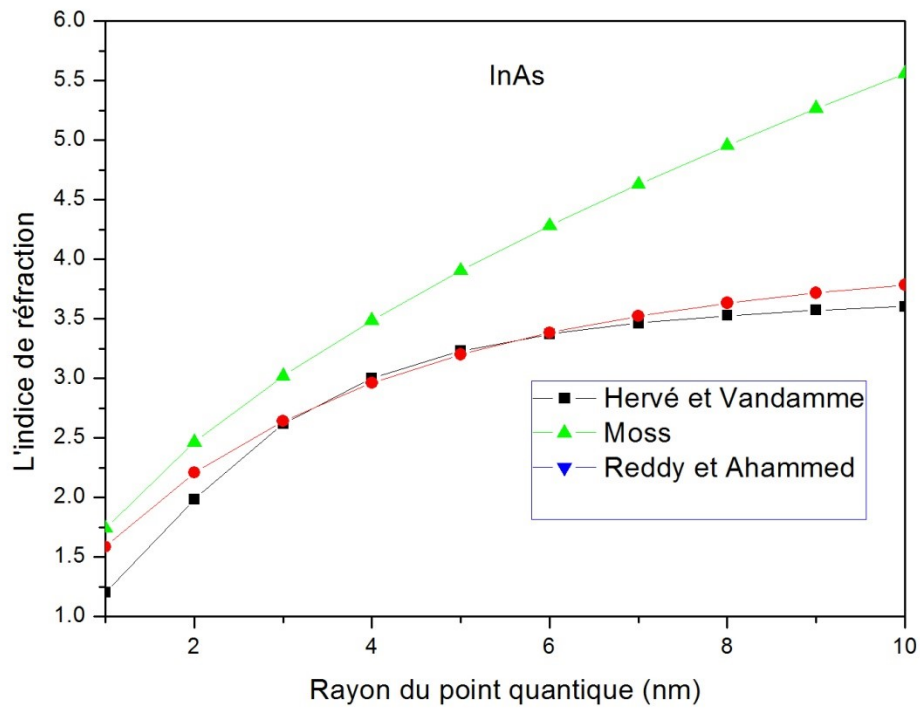


Figure 3-16: Changement d'indice de réfraction de l'InAs en fonction du rayon a

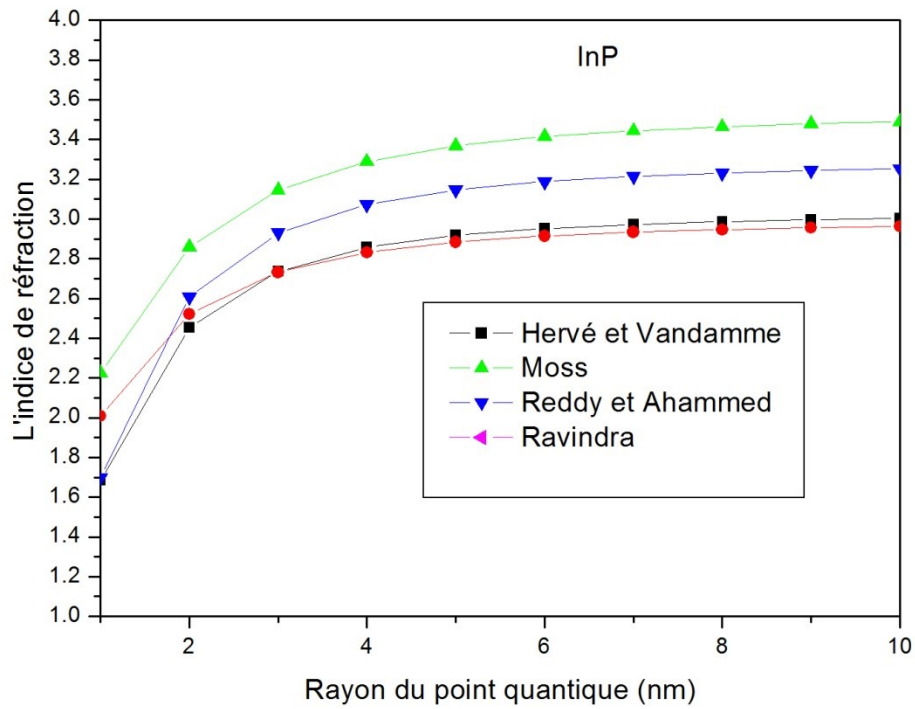


Figure 3-17: Changement d'indice de réfraction de l'InP en fonction du rayon a

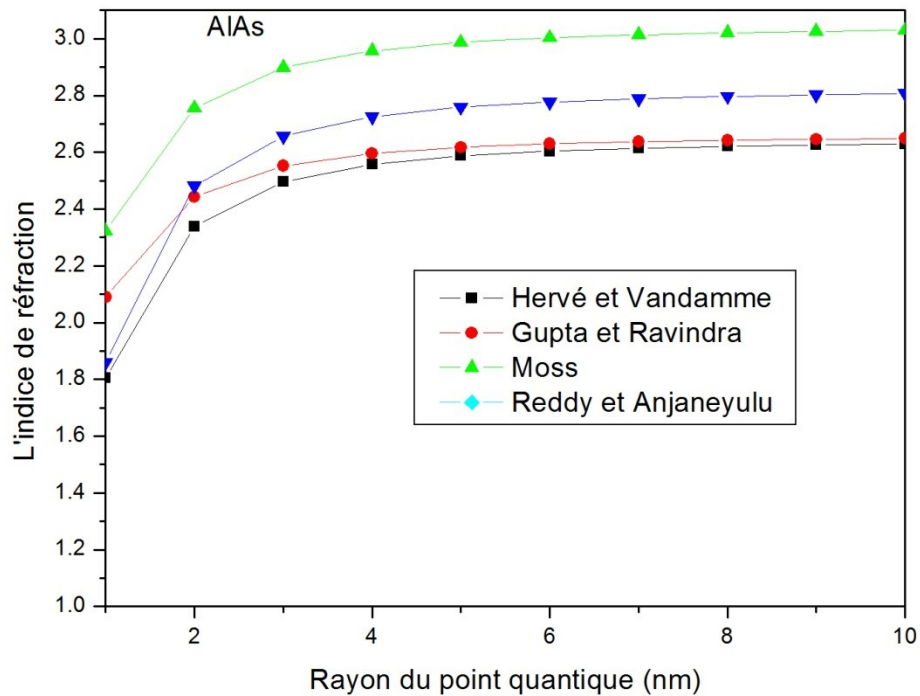


Figure 3-18: Changement d'indice de réfraction de l'AlSb en fonction du rayon a

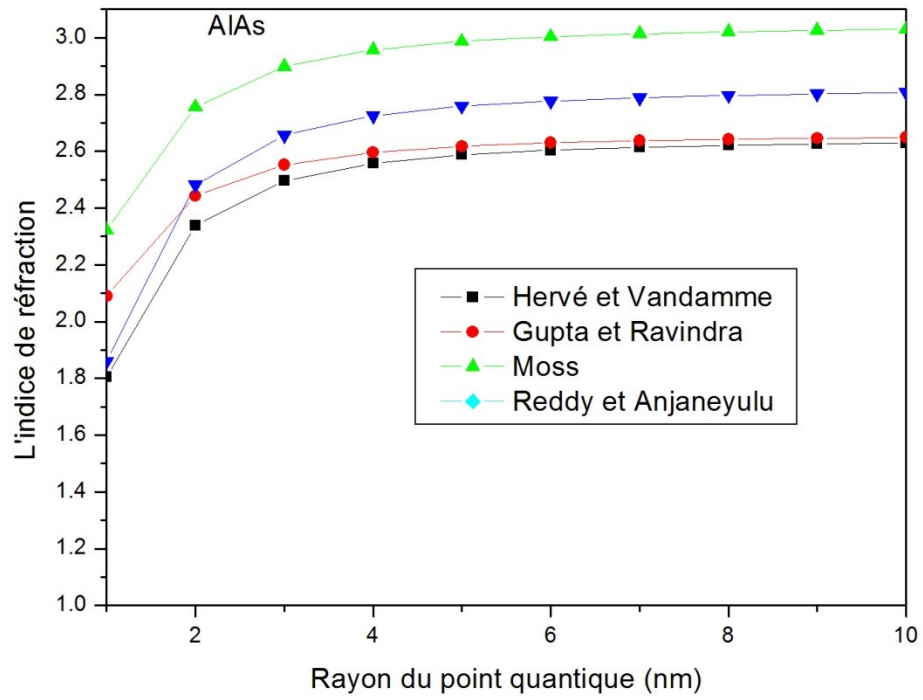


Figure 3-19: Changement d'indice de réfraction du AlAs en fonction du rayon a

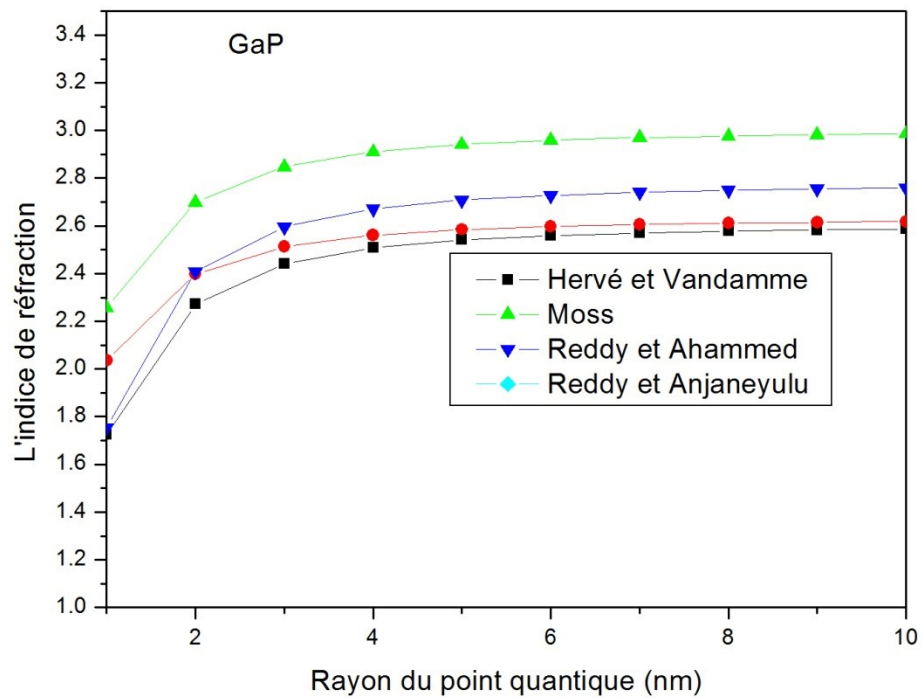


Figure 3-20: Changement d'indice de réfraction du GaP en fonction du rayon a

Notant que pour tous les composés semiconducteurs nanostructurés, l'indice de réfraction présente un comportement similaire, comme le montrent les figures précédentes. Toutefois, il existe des situations où il n'est pas possible de calculer l'indice de réfraction de certains composés semiconducteurs pour certains modèles. Dans de tels cas, il est possible que l'indice de réfraction prenne une valeur négative ou inférieure à 1. Il est important de noter que l'indice de réfraction est inversement proportionnel au gap d'énergie, ce qui signifie qu'il diminue lorsque le rayon du point quantique diminue, tandis qu'il augmente de manière non linéaire avec l'augmentation du rayon ( $a$ ). Cependant, une fois que le rayon du point quantique dépasse une valeur de 6 nm, nous observons une stabilisation de l'indice de réfraction. Le Tableau 3-11 présente les valeurs calculées de l'indice de réfraction, comparées aux valeurs théoriques, pour un rayon de point quantique  $a = 100$  nm. Cette valeur correspond au cas du matériau massif.

**Tableau 3-11:** L'indice de réfraction des semiconducteurs nanostructurés pour un rayon  $a=100$  nm, comparés aux valeurs théoriques.

Composés	n calculé à partir :						valeurs théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vadamme	Reddy et Anjneyulu	Reddy et Ahammed	
GaAs	2.95	2.94	3.20	2.99	3.23	3.47	3.3 <sup>a)</sup>
InAs	4.16	3.85	3.86	3.75	4.61		3.51 <sup>a)</sup>
InP	2.99	3.01	3.25	3.03	3.25	3.54	3.1 <sup>a)</sup>
AlAs	2.66	2.33	2.75	2.65	2.03	3.05	2.86 <sup>a)</sup>
AlSb	2.86	2.79	3.08	2.89	3.11	3.33	3.3289 <sup>c)</sup>
GaP	2.63	2.24	2.68	2.60	2.28	3.00	3.02 <sup>a)</sup>
GaSb	3	3.56	3.64	3.45	3.52	4.56	3.79 <sup>b)</sup>

<sup>a)</sup> [93], <sup>b)</sup> [94], <sup>c)</sup> [95]

Pour comparer les résultats obtenus aux données théoriques de l'indice de réfraction, nous avons vu nécessaire d'effectuer le calcul de l'erreur relative  $\Delta x/x$ . Ceci nous a permis de déterminer le modèle le plus proche pour le calcul de l'indice de réfraction ( $n$ ), par conséquent, les valeurs de l'erreur relative sont répertoriées dans le tableau 3-12, et le modèle affichant la plus faible erreur relative est considéré comme le plus précis.

**Tableau 3-12 :** Validation du modèle empirique et calcul d'erreur relative de l'indice de réfraction  $n$  des composés binaires semiconducteurs nanostructurés III-V.

Composé	Modèle de calcul validé	L'erreur relative
GaAs	Reddy et Anjaneyulu	2.12%
InAs	Hervé et Vandamme	6.84%
InP	Hervé et Vandamme	2.26%
AlAs	Reddy et Anjaneyulu	1.05%
AlSb	Reddy et Ahammed	0.03%
GaP	Reddy et Ahammed	0.66%

Les équations ci-dessous représentent les ajustements quadratiques d'ordre deux pour modéliser l'indice de réfraction par rapport au rayon du point quantique.

$$\text{GaAs : } n(a) = 2.80 + 0.02a - 1.61 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy et Anjaneyulu)} \quad (3-21)$$

$$\text{InAs : } n(a) = 2.92 + 0.04a - 2.97 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Hervé et Vandamme)} \quad (3-22)$$

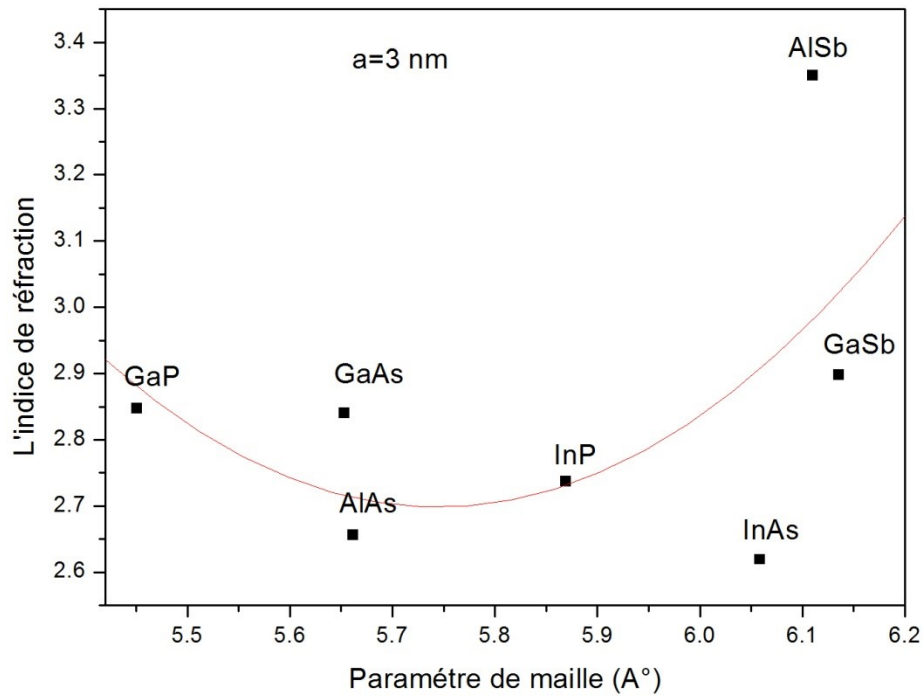
$$\text{InP : } n(a) = 2.58 + 0.02a - 1.72 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Hervé et Vandamme)} \quad (3-23)$$

$$\text{AlAs : } n(a) = 2.67 + 0.07a - 6.06 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy et Anjaneyulu)} \quad (3-24)$$

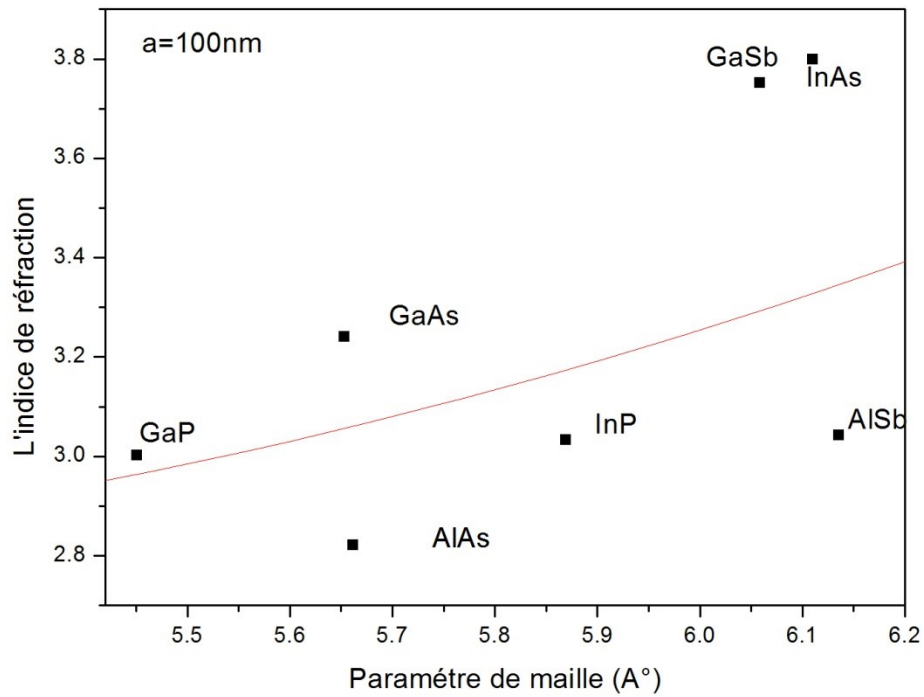
$$\text{AlSb : } n(a) = 3.167 + 0.008a - 6.837 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy et Ahammed)} \quad (3-25)$$

$$\text{GaP : } n(a) = 2.880 + 0.006a - 4.766 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy et Ahammed)} \quad (3-26)$$

Les courbes ci-dessous illustrent la variation de l'indice de réfraction des semiconducteurs (GaAs, InAs, InP, AlAs, AlSb, GaP) en fonction du paramètre de réseau, avec des valeurs de  $a$  égales à 3 nm et 100 nm.



**Figure3-21:** L'indice de réfraction par rapport au paramètre du réseau pour (a=3 nm).



**Figure3-22:** L'indice de réfraction par rapport au paramètre du réseau Pour (a=100 nm).

Il est important de souligner que parmi les composés binaires étudiés, l'InAs présente la valeur la plus élevée de l'indice de réfraction, tandis que le comportement inverse est observé pour le gap énergétique des composés étudiés. De plus, les équations d'ajustement quadratique sont utilisées pour décrire l'indice de réfraction des différents composés GaAs, InAs, InP, AlAs, AlSb et GaP en fonction du paramètre de maille pour un rayon du point quantique ( $a=3\text{nm}$ ) et ( $a=100\text{ nm}$ ) sont donc présentées ci-dessous:

$$a=3\text{ nm} : n(x) = 41.51539 - 13.3098x + 1.14098x^2 \quad (3-27)$$

$$a=100\text{ nm} : n(x) = -24.38122 - 9.80208x + -0.8746x^2 \quad (3-28)$$

(x) paramètre de maille.

### 3-4 Etude des propriétés diélectriques

#### 3 4-1 Constante diélectrique de haute fréquence ( $\epsilon_\infty$ )

En utilisant les valeurs calculées de l'indice de réfraction ( $n$ ) obtenues à partir des divers modèles utilisés, nous avons estimé la constante diélectrique de haute fréquence ( $\epsilon_\infty$ ) en utilisant l'expression suivante: [96]

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (3-29)$$

En utilisant les informations fournies dans le tableau 3-11, il est possible de procéder au calcul de la constante diélectrique de haute fréquence, ce qui nous permet ensuite de générer les graphiques suivantes:

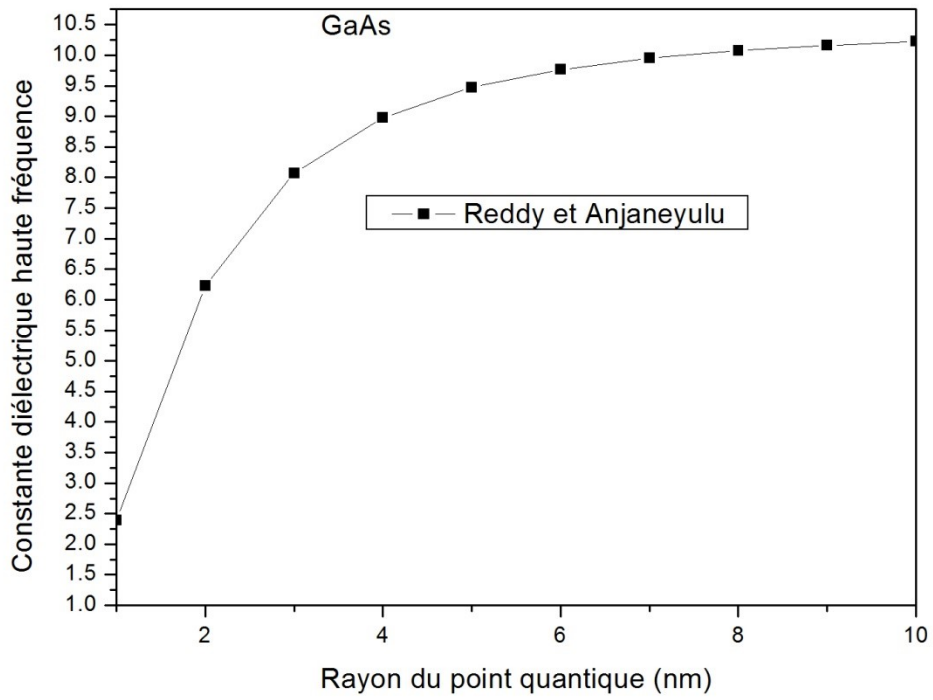


Figure 3-23: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du GaAs par rapport au rayon a.

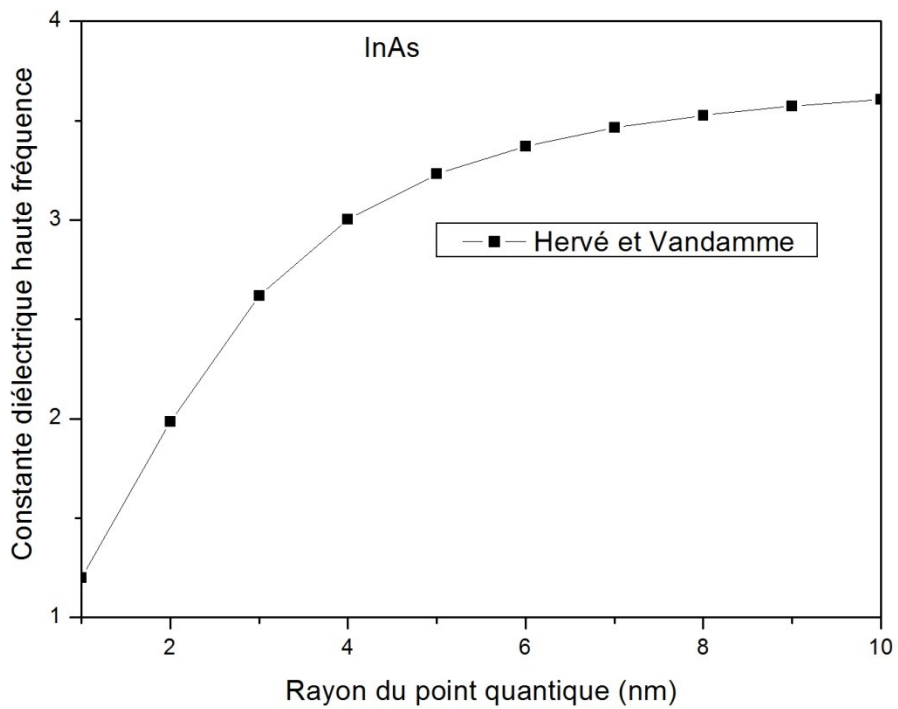


Figure 3-24: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du InAs par rapport au rayon a.

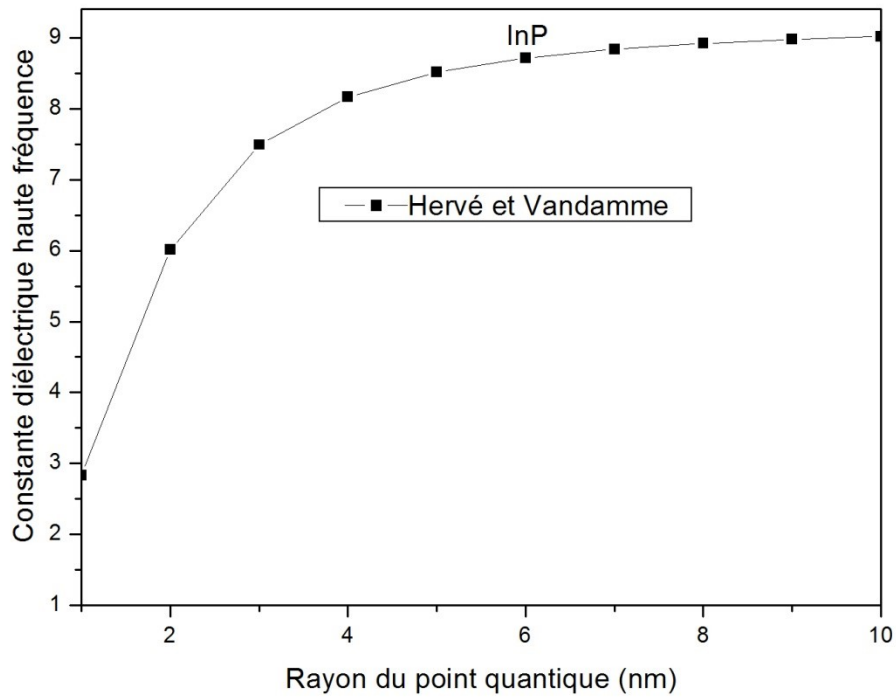


Figure 3-25: Constante  $\epsilon_{\infty}$  de l'InP par rapport au rayon a.

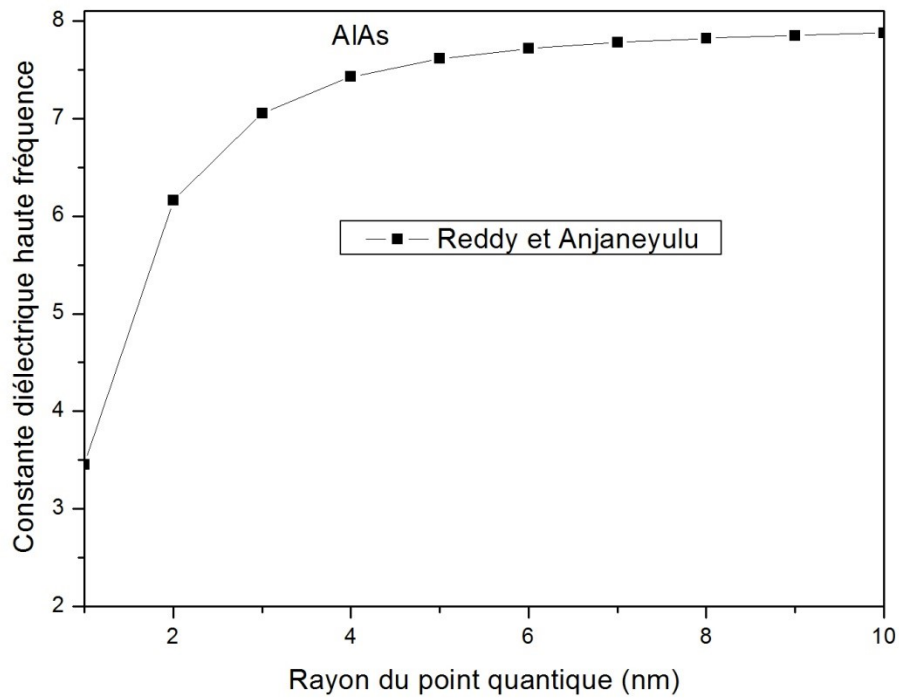


Figure 3-26: Constante  $\epsilon_{\infty}$  de l'AlAs par rapport au rayon a.

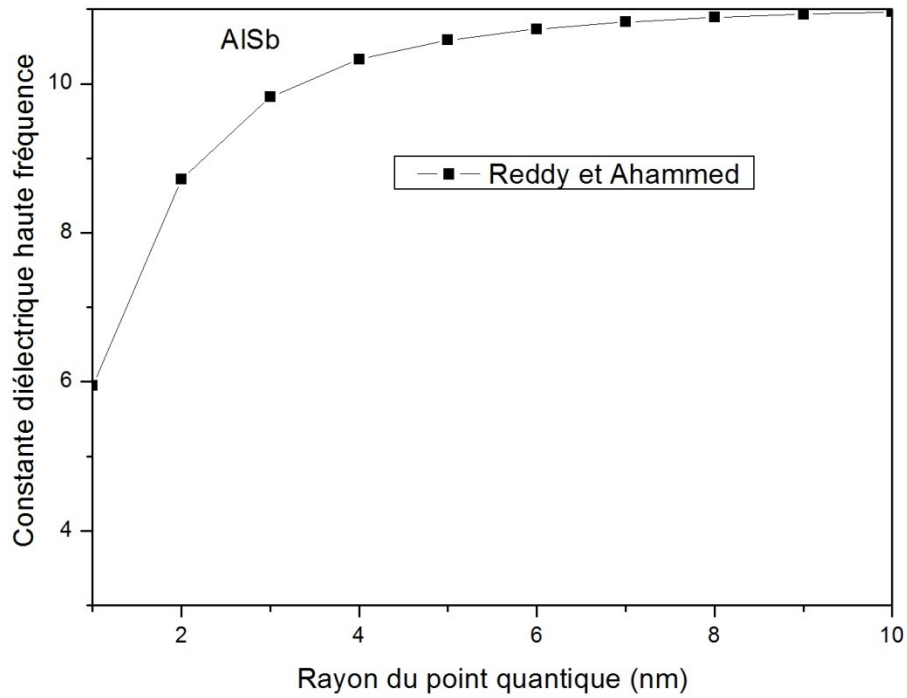


Figure 3-27: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du AlSb par rapport au rayon a.

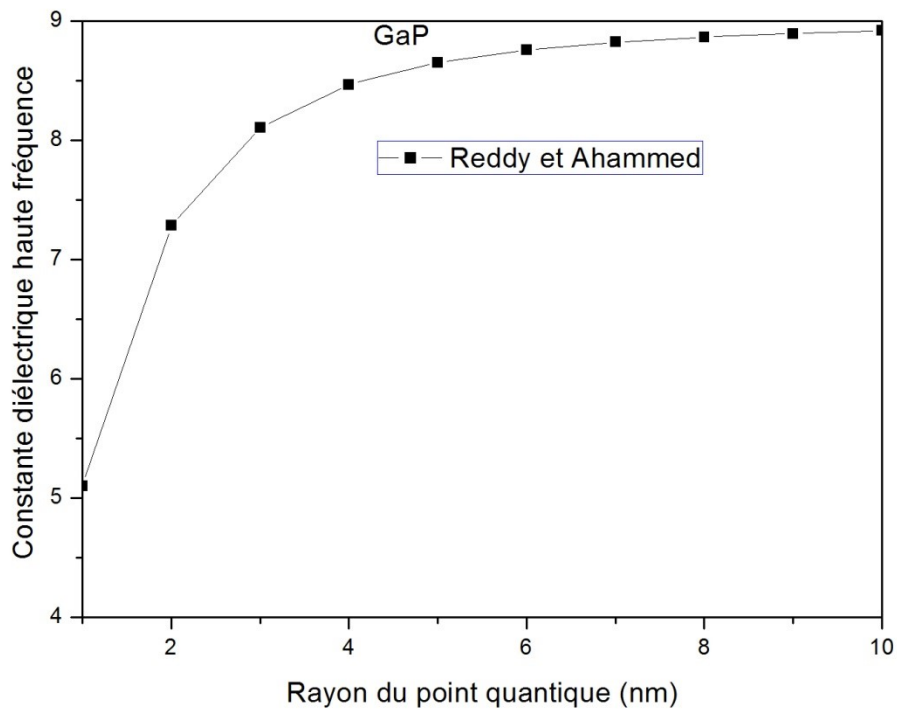


Figure 3-28: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du GaP par rapport au rayon a.

Le changement de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction du rayon ( $a$ ) est identique à la variation de l'indice de réfraction, elle augmente rapidement puis elle commence à se stabiliser une fois que le rayon ( $a$ ) dépasse une valeur de 9 nm. Cette ressemblance s'explique par la relation 3-29. Il faut dire aussi que la constante  $\epsilon_{\infty}$  est différente d'un composé à un autre.

L'analyse de la constante diélectrique à haute fréquence revêt une importance capitale pour examiner la densité de courant électrique des matériaux étudiés, car une augmentation de la valeur de la constante diélectrique entraîne une augmentation de la densité de courant. En général, les matériaux avec une constante diélectrique élevée sont couramment utilisés dans la fabrication de condensateurs à haute capacité.

Les expressions des équations de régression quadratique pour chaque modèle sont les suivantes :

$$\text{GaAs: } \epsilon_{\infty}(a) = 6.23 + 0.20a - 0.02a^2 \text{ (Reddy et Anjaneyulu)} \quad (3-30)$$

$$\text{InAs: } \epsilon_{\infty}(a) = 4.446 + 0.442a - 0.004a^2 \text{ (Hervé et Vandamme)} \quad (3-31)$$

$$\text{InP: } \epsilon_{\infty}(a) = 5.729 + 0.164a - 0.001a^2 \text{ (Hervé et Vandamme)} \quad (3-32)$$

$$\text{AlAs: } \epsilon_{\infty}(a) = 7.16 + 0.04a - 3.27a^2 \text{ (Reddy et Anjaneyulu)} \quad (3-33)$$

$$\text{AlSb: } \epsilon_{\infty}(a) = 9.98 + 0.05a - 4.36a^2 \text{ (Reddy et Ahammed)} \quad (3-34)$$

$$\text{GaP : } \epsilon_{\infty}(a) = 8.31 + 0.03a - 2.77a^2 \text{ (Reddy et Ahammed)} \quad (3-35)$$

Des graphiques ont été tracés pour observer la variation de la constante diélectrique des composés semiconducteurs binaires (GaAs, InAs, InP, AlAs, AlSb, GaP) en fonction du paramètre du réseau pour des valeurs de  $a$  égales à 3 nm et 100 nm.

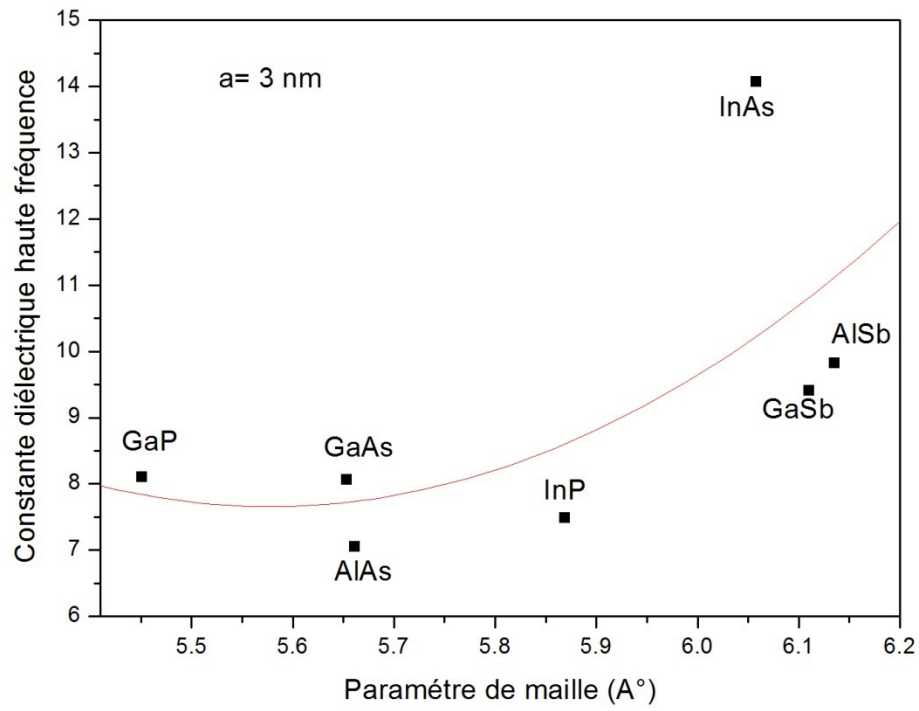


Figure 3-29: La constante  $\epsilon_{\infty}$  par rapport au paramètre du réseau pour ( $a=3$  nm).

□

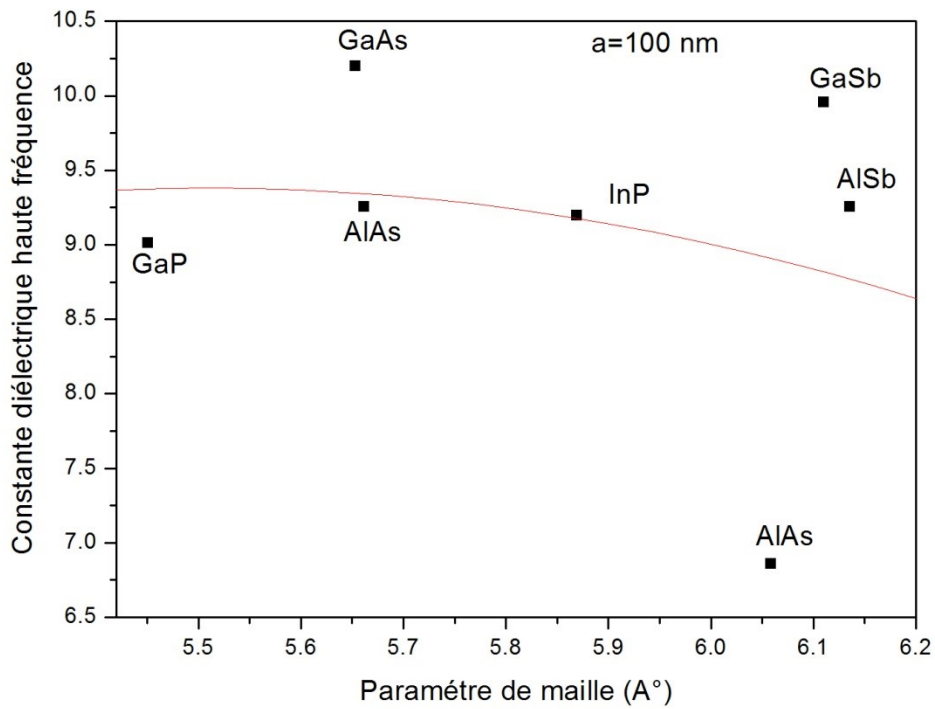


Figure 3-30: La constante  $\epsilon_{\infty}$  par rapport au paramètre du réseau pour ( $a=100$  nm).

Les équations suivantes montrent que la constante diélectrique de haute fréquence des composés semiconducteurs nanostructurés tels que le GaAs, InAs, l'InP, l'AlAs, l'AlSb et le GaP présentent un comportement similaire à l'indice de réfraction. Des équations d'ajustement quadratique ont été utilisées pour représenter la constante diélectrique de haute fréquence en fonction du paramètre de réseau pour des valeurs de  $a$  égales à 3 nm et 100 nm.

$$\text{Pour } a=3 \text{ nm: } \varepsilon_{\infty}(x) = 470.82 - 165.635x + 14.806x^2 \quad (3-36)$$

$$\text{Pour } a=100 \text{ nm: } \varepsilon_{\infty}(x) = -132.915 - 13.55x + -4.546x^2 \quad (3-37)$$

( $x$ ) est le paramètre de maille

### 3-5 Propriétés physiques du GaSb à l'échelle nanométrique

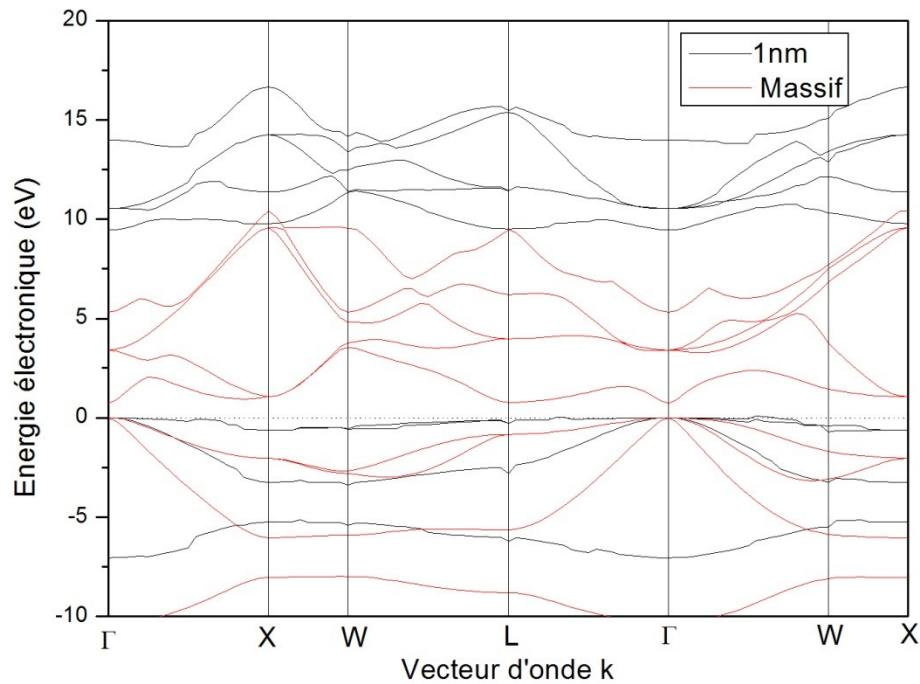
Le Gallium antimonide (GaSb) est un composé semiconducteur constitué de Gallium (Ga) et d'Antimoniure (Sb). Il est composé de matériaux semiconducteurs du groupe III-V. Il possède une constante de réseau de 0,61 nm et qu'il se cristallise dans la structure Zinc-Blende. La valeur de cette constante de réseau lui permet d'être utilisé dans des applications courantes des semiconducteurs. Ce matériau semiconducteur présente un gap directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) d'une valeur minimale de 0,72 eV. Il est utilisé dans les lasers [97], les transistors, les diodes électroluminescentes infrarouges, les détecteurs infrarouges et les matériaux thermo-photovoltaïques.

#### 3-5-1 Structure de bande du GaSb

La Figure 3-31 présente la structure électronique calculée du GaSb en forme massif (représentée par des lignes rouge) et celle du GaSb nanostructuré avec un rayon de 1 nm (représentée par des lignes noire). Les bandes de valence maximales ont été utilisées comme référence pour les deux échelles, à savoir le matériau en massif et le matériau à l'échelle nanométrique. Une analyse détaillée de la figure révèle que la bande de conduction la plus basse pour le GaSb massif se trouve au point  $\Gamma$  centre de la zone de Brillouin,  $[0, 0, 0] \pi/a_0$ . Cette observation nous permet de conclure que le GaSb massif est un matériau à gap énergétique direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ), ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux et théoriques.

En ce qui concerne le GaSb nanostructuré, le changement de taille du matériau entraîne une modification de tous les niveaux d'énergie. Toutefois, la forme générale de la structure électronique reste similaire à celle du composé massif. Les niveaux d'énergie ont été décalés selon différentes valeurs. Il est intéressant de noter que la bande de conduction la plus basse pour les points quantiques de GaSb avec un rayon de 1 nm se situe toujours au point  $\Gamma$ , centre de la zone de Brillouin. Par conséquent, la nature du composé étudié

reste inchangée lors du passage de l'échelle massive à l'échelle nanométrique. Nous pouvons donc conclure que le GaSb nanostructuré est un semiconducteur à gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ).



**Figure3-31:** Structure de bande du GaSb massif et nanostructuré.

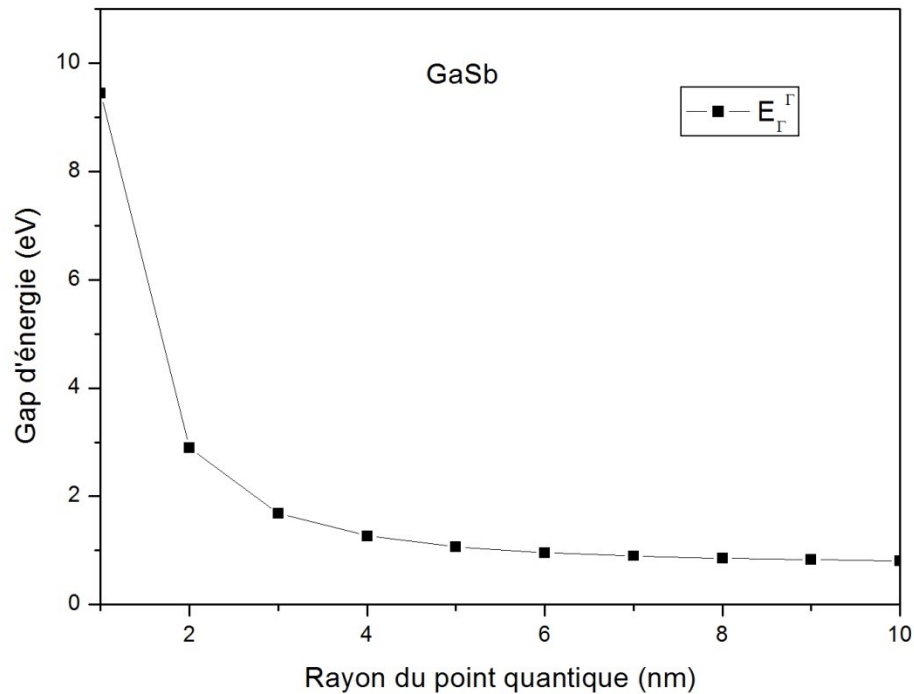
### 3-5-2 Gap d'énergie

La Figure 3-32 présente le changement du gap énergétique direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) en fonction du rayon du point quantique sphérique pour la structure du GaSb en utilisant l'équation (3-3), le rayon varie dans l'intervalle de 1 à 10 nm. Il est à noter que le gap ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) diminue à mesure que le rayon du point quantique augmente. Ce comportement qualitatif est similaire à celui des points quantiques sphériques d'InAs [98] et de GaN [99].

Nous remarquons que la diminution du gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) est plus faible, ce qui tend à se rapprocher de la valeur du matériau GaSb massif. En réalité, lorsque la taille du point quantique diminue, l'effet de confinement quantique augmente. Dans les semiconducteurs, il existe une interaction coulombienne entre les électrons et les trous, jouant un rôle essentiel dans leurs caractéristiques optiques. Les électrons et les trous peuvent se combiner pour former des excitons [63].

Dans l'atome d'hydrogène, le rayon de l'exciton est généralement plus grand que le rayon de Bohr, et cela dépend du matériau étudié. Dans le cadre de cette étude, il a été constaté que le rayon de Bohr du matériau massif GaSb est relativement élevé. En fait, si la taille du point quantique est supérieure au rayon de Bohr de l'exciton, la situation peut être

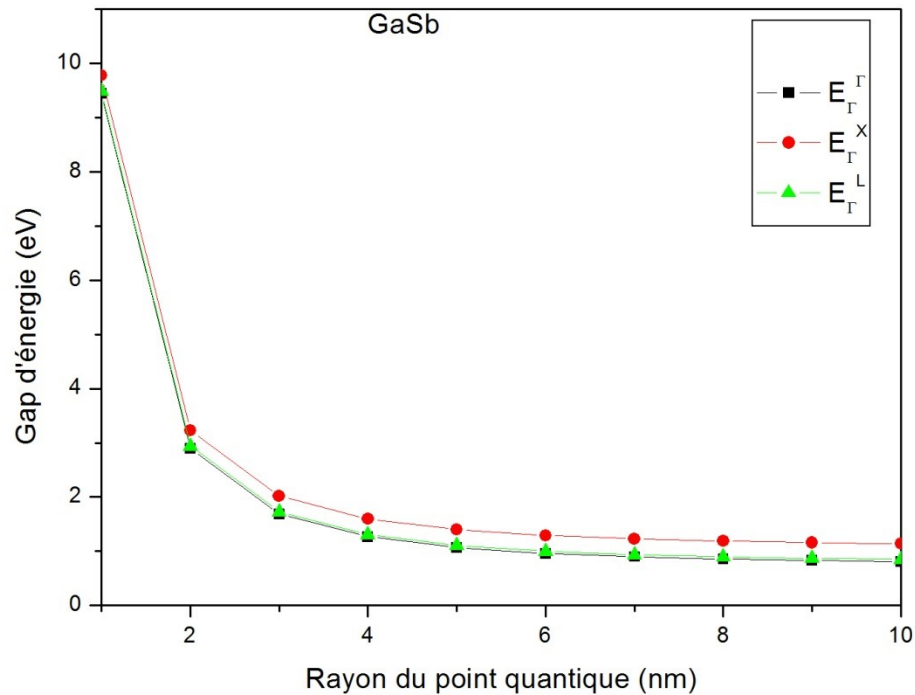
similaire à celle du matériau GaSb massif. Ces observations sont en accord avec les résultats trouvés.



**Figure3-32:** Gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  du GaSb en fonction du rayon a

Nous notons également, que dans la Figure 3-32, pour des tailles de nanocristallin situées entre 1 et 10 nm le GaSb reste un matériau à gap direct. Un comportement qualitatif similaire a été observé pour les nanostructures de GaAs [98] et de l'AlN [99]. Étant donné que les valeurs expérimentales et théoriques n'ont pas été rapportées pour ces quantités, les résultats actuels ont été prédits et peuvent servir de référence.

La Figure 3-33 présente l'évolution du gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  ainsi que les gaps indirects  $E_{\Gamma}^{\times}$  et  $E_{\Gamma}^{\text{L}}$  des points quantiques de GaSb dans la structure de type Zinc-Blende. Les gaps d'énergie  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma}^{\times}$  et  $E_{\Gamma}^{\text{L}}$  diminuent de manière non linéaire et monotone lorsque le rayon du point quantique est augmenté de 1 nm à 10 nm, après quoi ils deviennent presque constants. Par conséquent, l'effet du confinement quantique consiste à ouvrir les intervalles des gaps d'énergies pour des rayons inférieurs à 10 nm. Ces valeurs sont connues sous le nom de rayons de Bohr. Les valeurs des gaps d'énergie  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma}^{\times}$  et  $E_{\Gamma}^{\text{L}}$  dans la structure massive sont respectivement de 0,72 eV, 1,05 eV et 0,76 eV. Ces résultats concordent de manière satisfaisante avec ceux rapportés dans la référence [100].



**Figure 3-33:** Gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et gaps indirects  $E_{\Gamma}^L$  et  $E_{\Gamma}^X$  du GaSb en fonction du rayon  $a$

### 3-5-3 Masse effective

La connaissance des masses effectives des électrons et des trous lourds peut fournir des informations utiles sur les propriétés de transport dans les matériaux semiconducteurs [101]. Ces quantités peuvent être déterminées à l'aide de la structure électronique du matériau considéré. Pour une approximation simple, nous utilisons une dépendance parabolique  $E(k)$  qui est généralement utilisée dans les semiconducteurs III-V pour un vecteur d'onde unique  $k$ . Les masses effectives des électrons et des trous lourds qui sont fortement liées à la mobilité des porteurs, sont des paramètres importants décrivant la plupart des propriétés de transport des porteurs dans les semiconducteurs [102], en utilisant l'équation suivante:

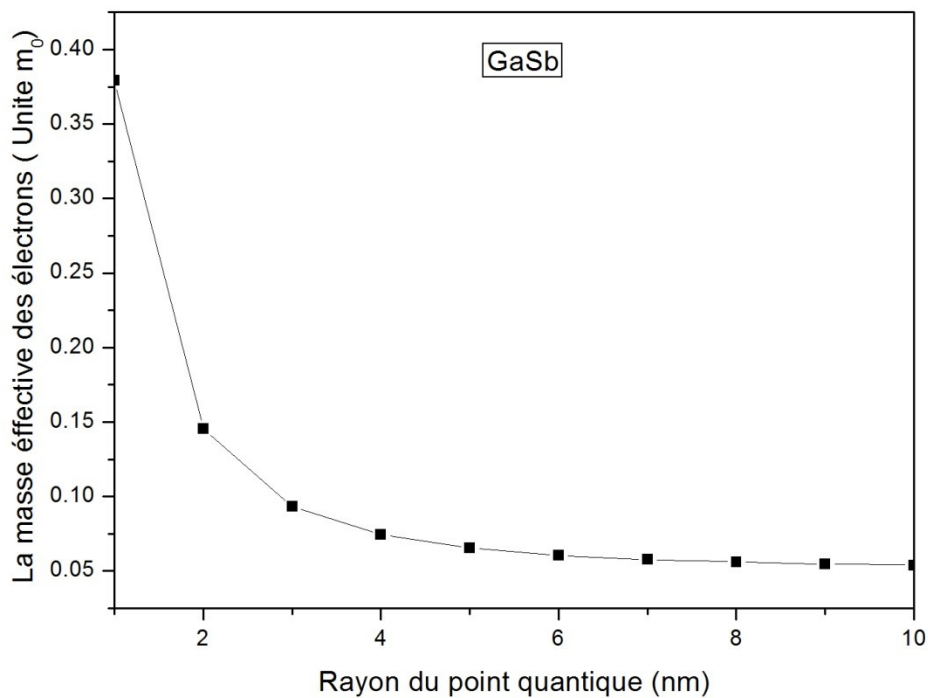
$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{4\pi^2}{h^2} \left( \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \right) \quad (3-38)$$

Ils sont obtenus par l'utilisation d'une procédure similaire à celle rapportée précédemment par Bouarissa [67].

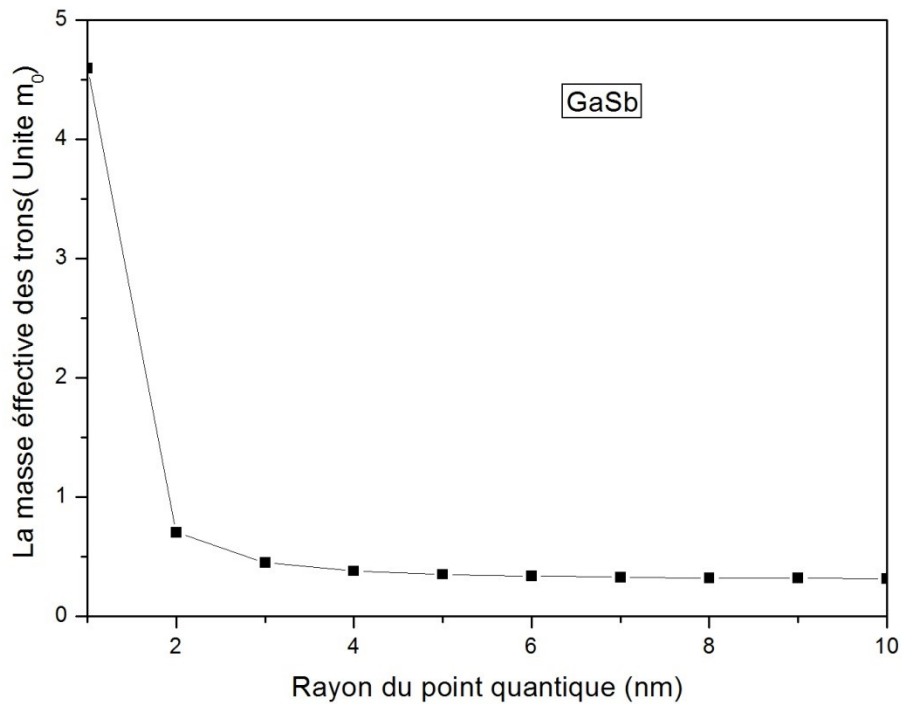
Pour le GaSb massif, nos résultats fournissent des valeurs de  $m_e^* = 0.05 m_0$  et  $m_h^* = 0.31 m_0$  (en unités de la masse de l'électron libre). Les résultats concordent assez bien

avec ceux de  $m_e^* = 0.041 m_0$  et  $m_h^* = 0.4 m_0$  au point  $\Gamma$ , publiés dans la littérature [83].

La variation concernant les masses effectives des électrons et des trous lourds au point  $\Gamma$  de la zone de Brillouin par rapport au rayon du point quantique pour le matériau nanostructuré GaSb est montrée aux figures 3-34 et 3-35 respectivement. Notant qu'en augmentant le rayon du point quantique de 1 à 10 nm,  $m_e^*$  et  $m_h^*$  diminuent. La diminution est montrée pour être rapide jusqu'à un rayon nano-cristal d'environ 5 nm puis elle devienne moins rapide jusqu'à un rayon de 10 nm. Une variation non linéaire peut être observée entre  $m_e^*$  et  $m_h^*$  par rapport au rayon nano-cristallin. Il en résulte une augmentation de la mobilité des matériaux, ce qui entraîne d'avantage de changement dans la description de la plupart des propriétés de transport.



**Figure 3-34:** La masse effective des électrons du GaSb en fonction du rayon a



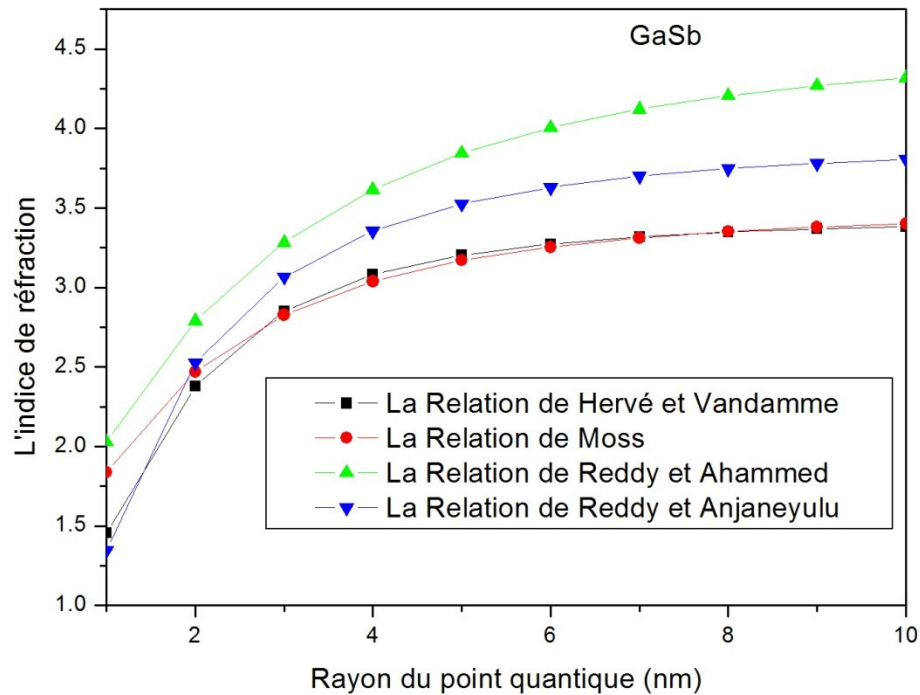
**Figure 3-35:** La masse effective des trous GaSb en fonction du rayon  $a$ .

#### 3-5-4 L'indice de réfraction

Dans le cas du GaSb nanostructuré, nous avons obtenu l'indice de réfraction ( $n$ ) en fonction du rayon du point quantique variant de 1 à 10 nm. Les modèles précédemment utilisés ont été employés pour calculer cet indice. Les résultats obtenus sont présentés dans la Figure 3-36. Nous remarquons qu'à mesure que la taille des points quantiques augmente, l'indice de réfraction ( $n$ ) augmente de manière monotone. Ce résultat est valable pour tous les modèles utilisés dans cette étude. L'expérience a confirmé que l'indice de réfraction correspond très bien à nos valeurs obtenues dans ce travail, en utilisant la relation de Reddy et Anjaneyulu [91]. Cependant, lorsque nous passons de 10 à 1 nm du rayon du point quantique l'indice semble diminuer par rapport à celui du matériau massif, en particulier lorsque la valeur de 1 nm est approchée.

En utilisant le modèle de Reddy et anjaneyulu [91] le fit quadratique a donné la relation 3-39.

$$n(a) = 0.98 + 0.76a - 0.05a^2 \quad (3-39)$$



**Figure 3-36:** Variation d'indice de réfraction du GaSb en fonction du rayon  $a$

### 3-5-5 La constante diélectrique

La constante diélectrique est obtenue pour indiquer avec quelle facilité nous pouvons polariser un matériau en imposant un champ électrique à un isolant. En général, les matériaux à faible constante diélectrique sont plus résistants aux champs électriques intenses que les matériaux à haute constante diélectrique, qui se décompose facilement en présence de tels champs. Ainsi, plus la polarisation qui développe une substance dans un champ appliqué d'une force donnée est grande, plus la constante diélectrique est grande [103-104]. Dans le présent travail, la constante diélectrique à haute fréquence ( $\epsilon_{\infty}$ ) est obtenue à partir de la formule de l'équation 3-29, En conséquence, la constante diélectrique augmente proportionnellement à la quantité de polarisation que la substance présente dans un champ d'application d'un certain dosage [104-105].

La valeur obtenue pour ( $\epsilon_{\infty}$ ) est de 14,44 pour le GaSb massif. Cette valeur est en bon accord avec celle de 14,4 citée dans la référence [83].

Dans la Figure 3-37, nous montrons la variation de ( $\epsilon_{\infty}$ ) en fonction du rayon du point quantique GaSb. Il faut noter qu'en augmentant la taille des points quantiques de GaSb, ( $\epsilon_{\infty}$ ) augmente. Cela montre un comportement monotone et non linéaire. Ainsi, les valeurs de ( $\epsilon_{\infty}$ ) pour les points quantiques de GaSb sont inférieures à celles du GaSb massif. En fait, les semiconducteurs qui ont une constante diélectrique plus élevée sont des

matériaux importants pour la fabrication des condensateurs de grande valeur qui sont devenus intéressants en particulier dans les diélectriques, des cellules de mémoire et les composants passifs. En ajustant les données concernant  $(\epsilon_\infty)$ , nous obtiendrons la relation 3-40:

$$\epsilon_\infty(a) = -0.72 + 3.78a - 0.23a^2 \quad (3-40)$$

Nous pouvons noter à partir de l'équation 3-40 que  $(\epsilon_\infty)$  varie non linéaire et présente un Paramètre de courbure de -0,23.

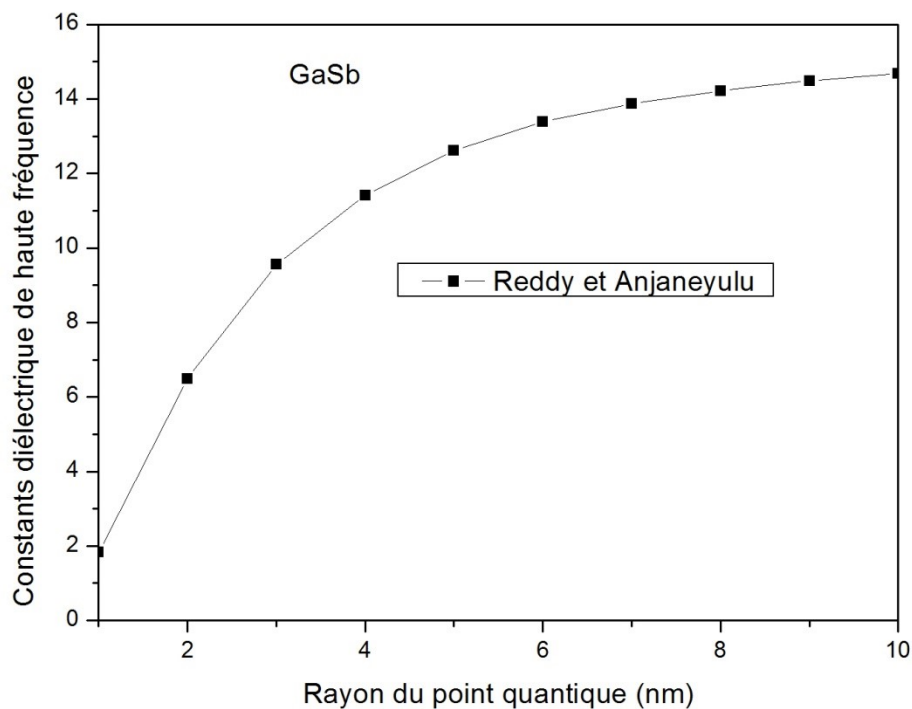


Figure 3-37: Constante  $\epsilon_\infty$  dans le GaSb en fonction du rayon a.

### 3-6 Semiconducteurs II-VI

Au cours des dernières décennies, un vif intérêt s'est manifesté à l'égard des matériaux semiconducteurs chalcogénures [67-71]. Ces composés inorganiques contiennent des éléments du groupe chalcogénure tels que le Soufre, le Sélénium et le Tellure. Ces matériaux présentent des propriétés optiques, électriques et thermiques remarquables, ce qui les rend extrêmement utiles dans les domaines de l'électronique, de l'optique et de la science des matériaux. Ils sont couramment utilisés dans la fabrication de cellules solaires, de dispositifs électroniques, de semiconducteurs et de matériaux d'affichage.

### 3-6-1 Méthode de la masse effective

Notant que, pour étudier les propriétés électroniques optiques et diélectriques de cette classe de matériaux à l'échelle nanométrique nous avons adopté les mêmes techniques qui ont été utilisés précédemment pour les matériaux III-V afin de faire une modélisation de toutes les propriétés physiques. Les calculs ont été effectués sur une large plage de rayon des points quantiques, allant de  $a = 1 \text{ nm}$  à  $a = 10 \text{ nm}$ .

Les figures ci-dessous illustrent les variations des gaps directs pour les composés CdTe, ZnS, ZnTe, ainsi que le gap indirect du MgSe. Toutefois, ces composés présentent un gap direct en massif, tandis que le MgSe présente un gap indirect. L'étude à l'échelle nanométrique révèle une décroissance non linéaire du gap fondamental, c'est-à-dire l'ouverture de la bande interdite, à mesure que la taille diminue à l'échelle nanométrique. Cela est dû à l'effet du confinement quantique sur la bande d'énergie. En revanche, cette bande interdite diminue en se rapprochant de la valeur du gap en massif. Nous remarquons également qu'autour d'une valeur de rayon de point quantique de 6 nm, le gap énergétique devient presque stable.

Ce comportement est similaire pour tous les composés semiconducteurs mentionnés, bien que les valeurs de la bande interdite diffèrent d'un matériau à un autre.

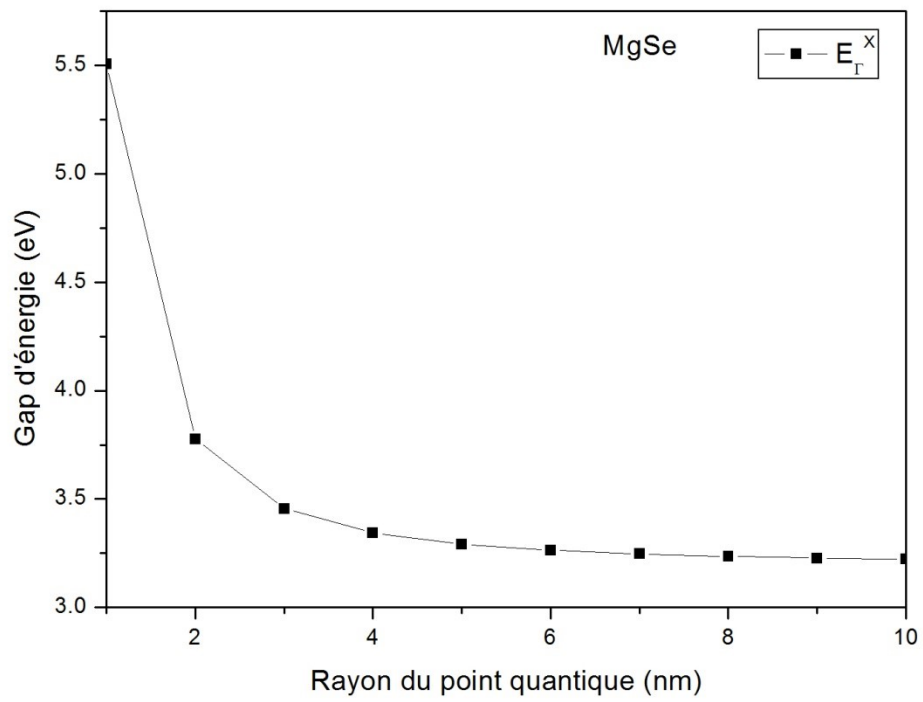


Figure 3-38: Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^X$ ) du MgSe en fonction du rayon a.

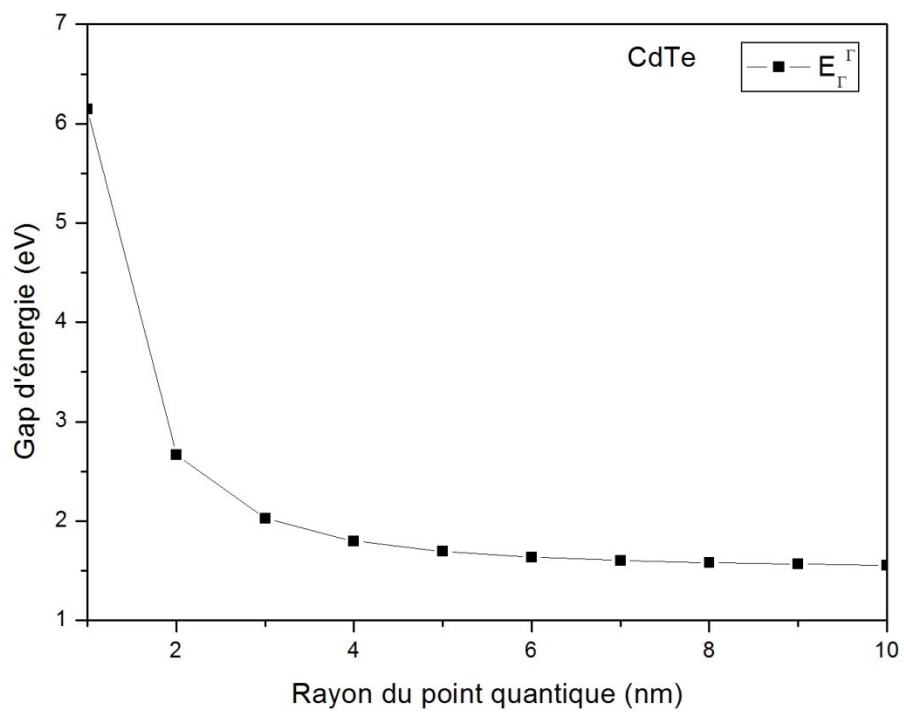


Figure 3-39: Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du CdTe en fonction du rayon a.

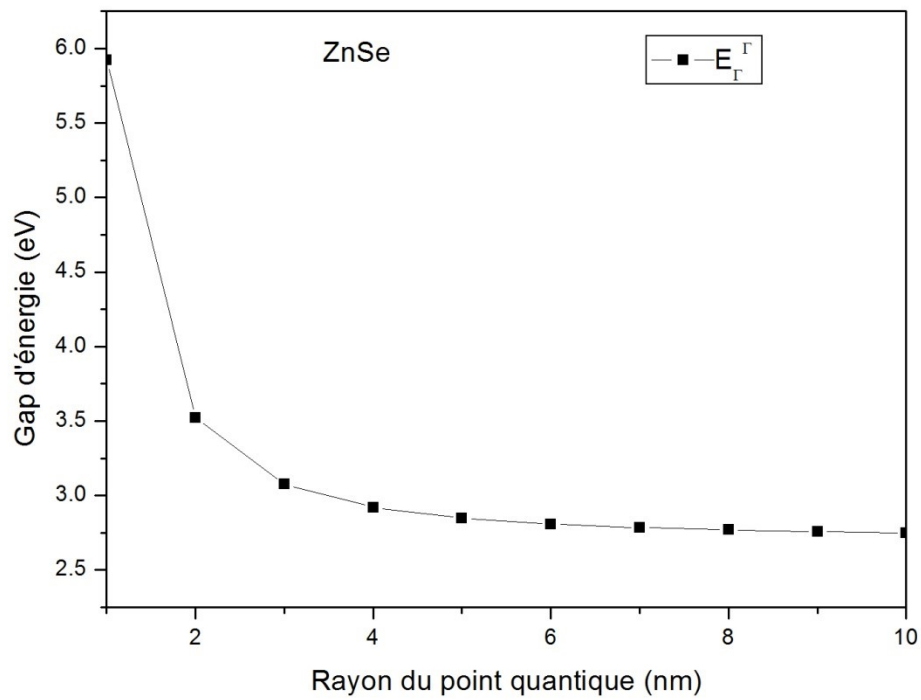


Figure 3-40: Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) dans du ZnSe en fonction du rayon a.

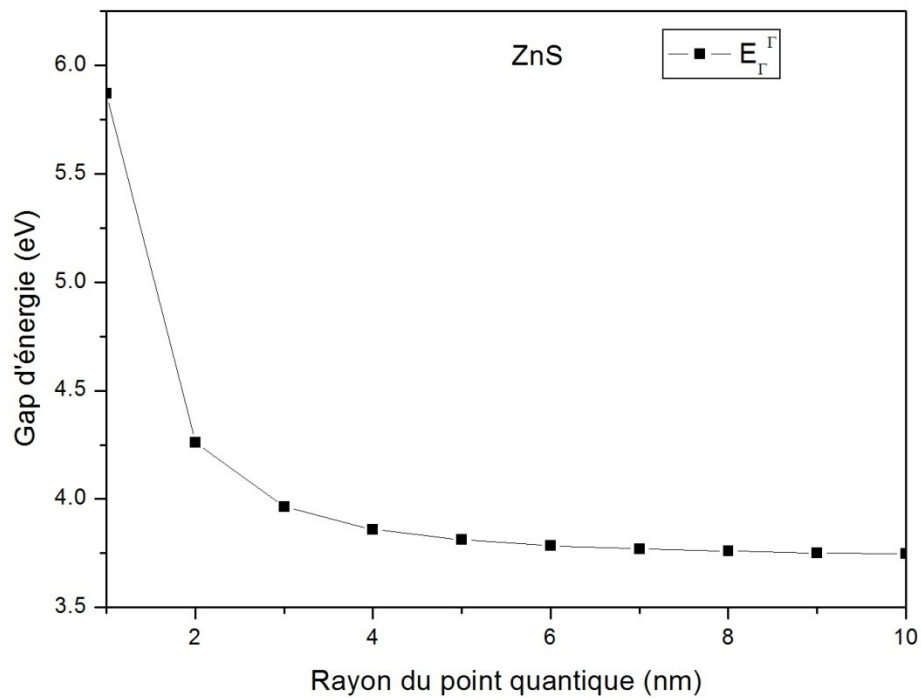
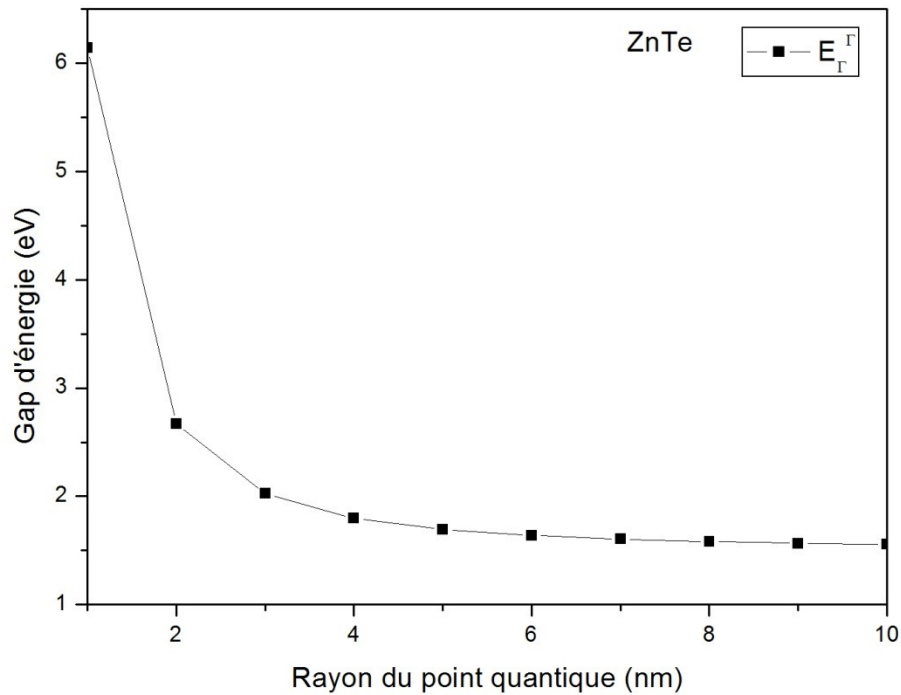


Figure 3-41: Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du ZnS en fonction du rayon a.



**Figure 3-42:** Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du ZnTe en fonction du rayon  $a$ .

Les équations des ajustements polynomiaux de deuxième ordre pour le gap fondamental de chaque composé semiconducteur nanostructuré sont les suivantes:

$$\text{MgSe: } E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 5.55975 - 0.72735 a + 0.0519 a^2 \quad (3-41)$$

$$\text{CdTe: } E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 6.25252 - 1.46175 a + 0.1043 a^2 \quad (3-42)$$

$$\text{ZnSe: } E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 6.27326 - 1.19049 a + 0.09322 a^2 \quad (3-43)$$

$$\text{ZnS: } E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 5.91867 - 0.67575 a + 0.04821 a^2 \quad (3-44)$$

$$\text{ZnTe: } E_{\Gamma}^{\Gamma}(a) = 6.25426 - 1.15049 a + 0.08322 a^2 \quad (3-45)$$

### 3-6-2 Les Transitions du gap énergétique

Les courbes présentées dans les figures ci-dessous montrent les variations des trois gaps énergétiques (gap direct et gaps indirects) du MgSe, ZnS, ZnSe et ZnTe sur une plage de 1 nm à 10 nm. Ces graphiques ont été tracés pour permettre une visualisation claire des transitions des gaps énergétiques dans chaque matériau semiconducteur nanostructuré étudié.

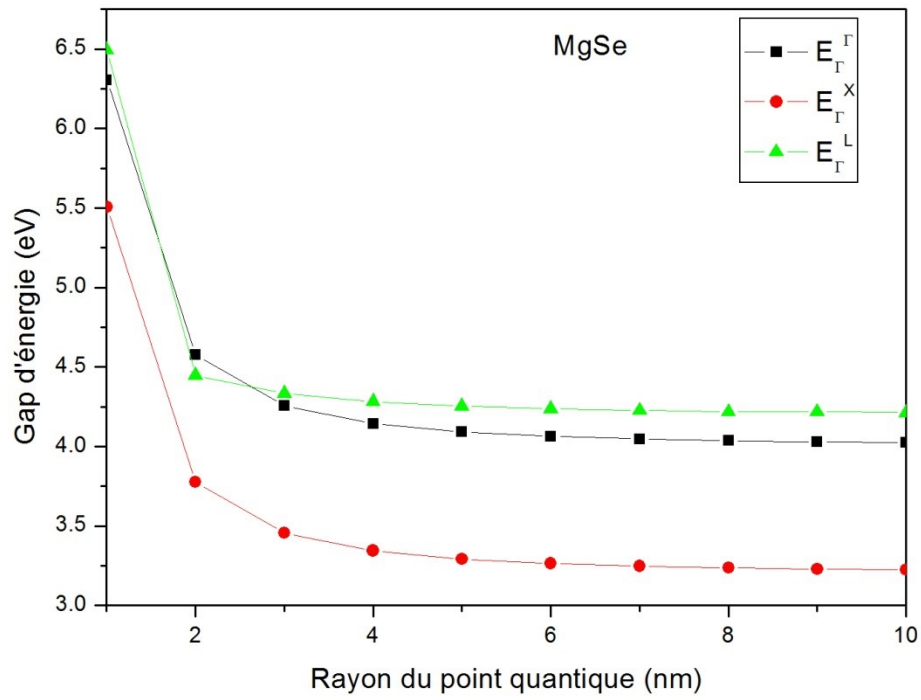


Figure 3-43: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du MgSe en fonction du rayon

a.

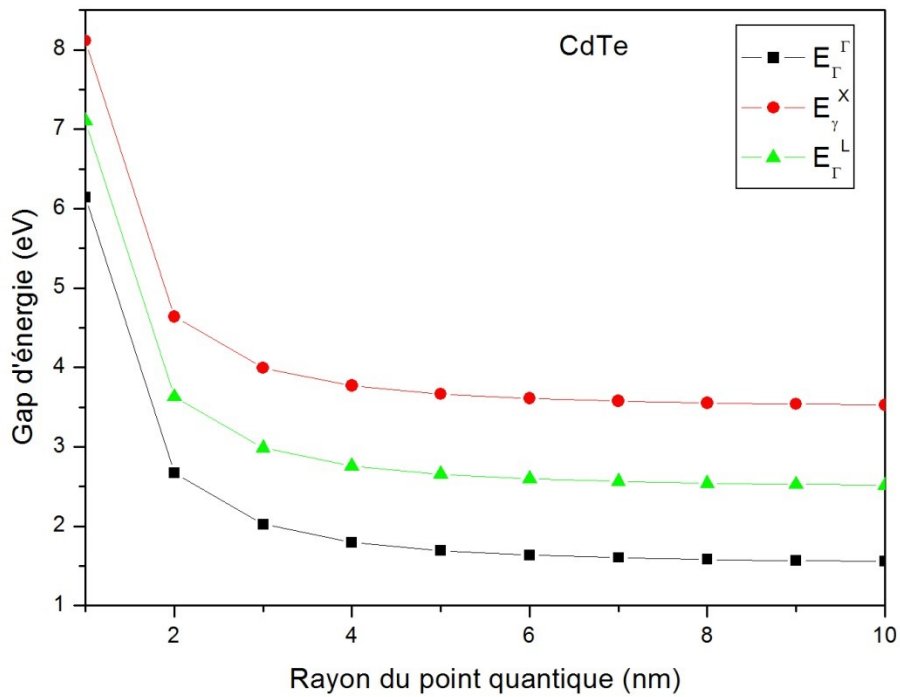


Figure 3-44: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du CdTe en fonction du rayon

a.

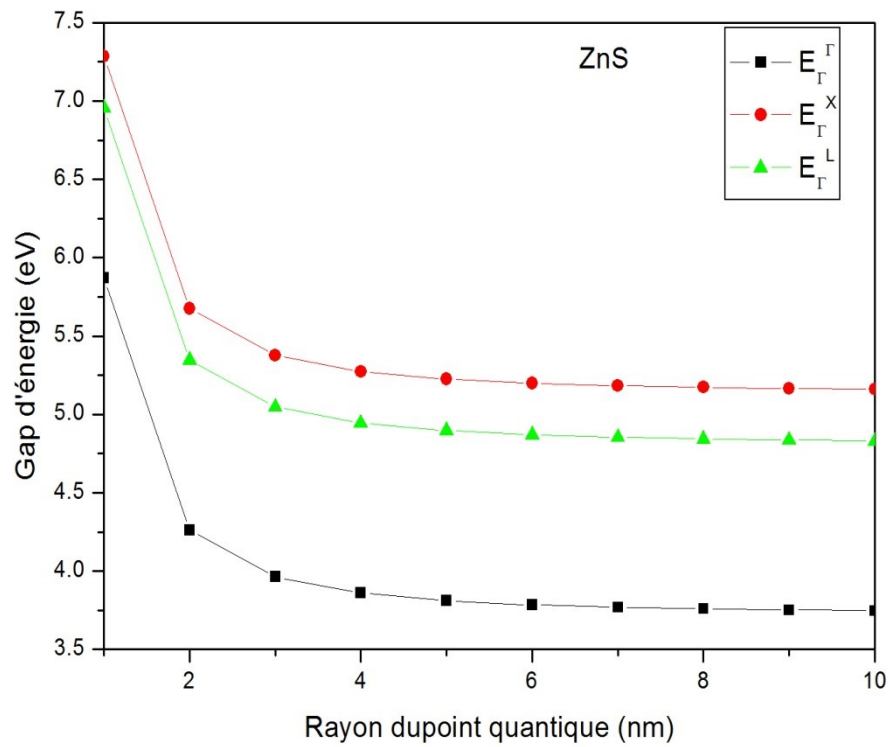


Figure 3-45: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du ZnS en fonction du rayon a.

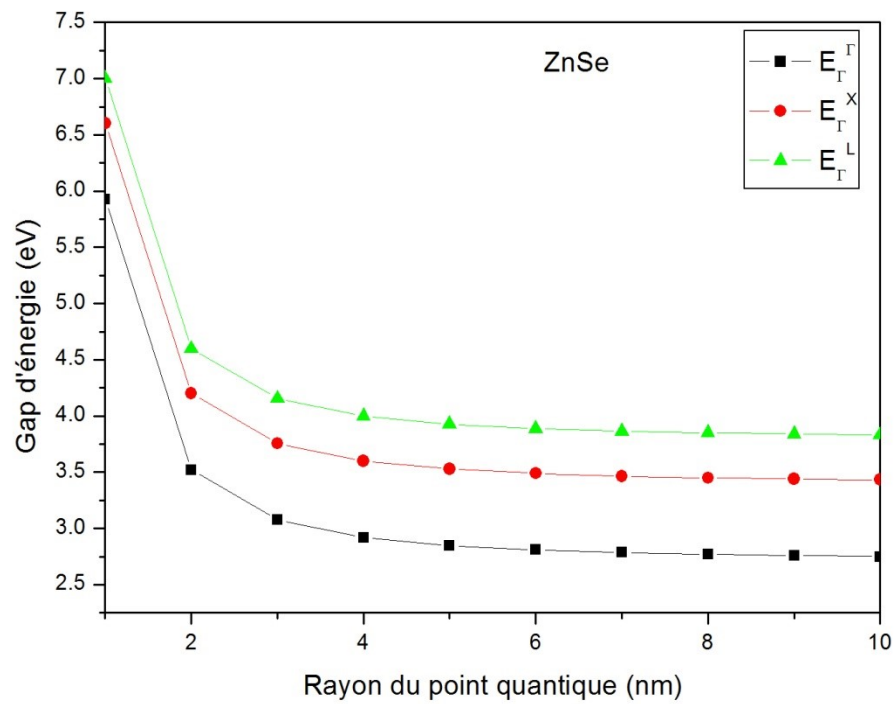
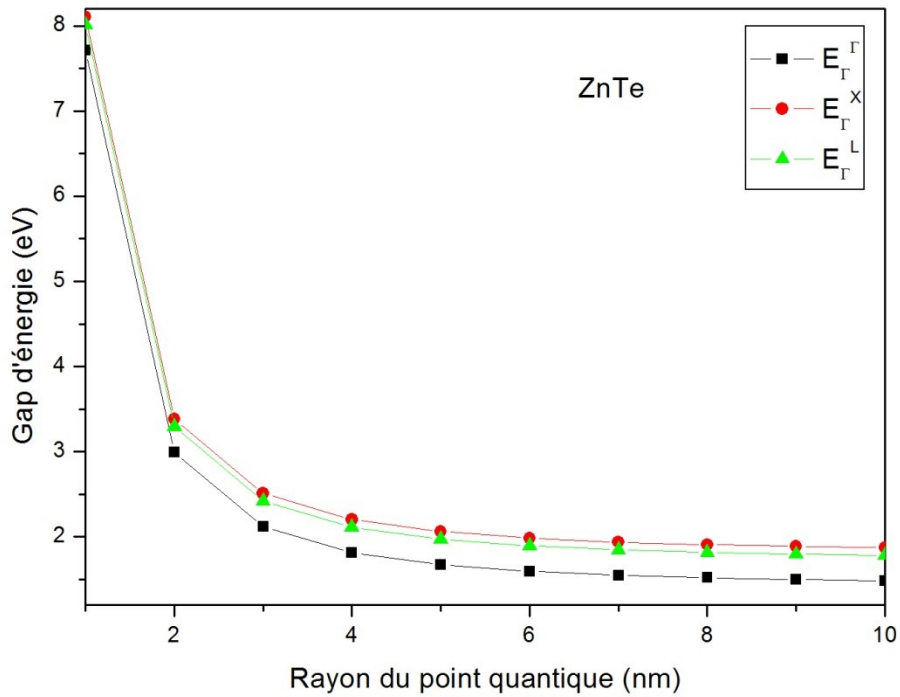


Figure 3-46: Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du ZnSe en fonction du rayon a.



**Figure 3-47:** Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du ZnTe en fonction du rayon a.

Les gaps énergétiques des composés examinés ont été calculés en utilisant la méthode de la masse effective, et les résultats sont récapitulés dans le tableau 3-13. Il convient de souligner que ces valeurs ont été déterminées pour un rayon  $a = 100$  nm.

**Tableau 3-13:** Transitions de gap des composés semiconducteurs binaires II-VI

Composés	Transition	Rayon de transition (nm)	Gap fondamental avant la transition	Gap fondamental après la transition
<b>MgSe</b>	Pas de transition	Aucune	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^X$
<b>CdTe</b>	Pas de transition	Aucune	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$
<b>ZnS</b>	Pas de transition	Aucune	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$
<b>ZnSe</b>	Pas de transition	Aucune	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$
<b>ZnTe</b>	Pas de transition	Aucune	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$

Les gaps énergétiques des semiconducteurs II-VI comparés à des données théoriques et expérimentales sont présentés dans le tableau 3-14.

**Tableau 3-14:** Les gaps énergétiques des semiconducteurs MgSe, CdTe, ZnS et ZnSe comparés à des données théoriques et expérimentales.

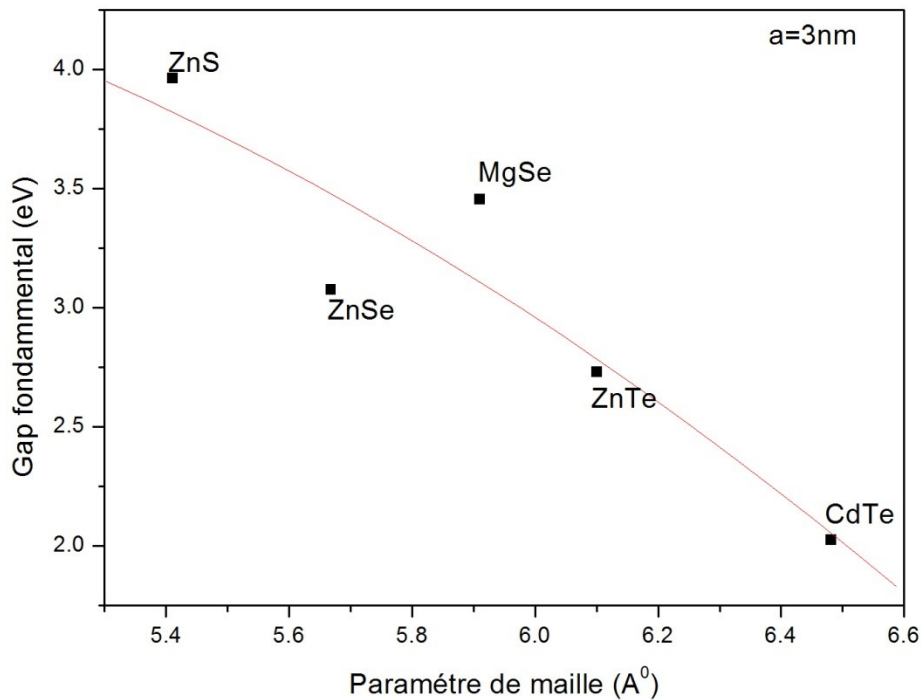
Composés	$E_{\Gamma}^F$	$E_{\Gamma}^L$	$E_{\Gamma}^X$
MgSe	4 <sup>a)</sup> 4.24 <sup>b)</sup> 4 <sup>c)</sup>	4.19 <sup>b)</sup>	3.2 <sup>a)</sup> 3.08 <sup>b)</sup> 3.2 <sup>c)</sup>
CdTe	1.5 <sup>a)</sup> 1.5 <sup>b)</sup> 1.5 <sup>c)</sup>	2.47 <sup>c)</sup>	3.48 <sup>b)</sup> 3.48 <sup>c)</sup>
ZnS	3.73 <sup>a)</sup> 3.66 <sup>b)</sup> 3.73 <sup>c)</sup>	4.84 <sup>b)</sup>	5.14 <sup>a)</sup> 3.7 <sup>b)</sup> 5.14 <sup>c)</sup>
ZnSe	2.72 <sup>a)</sup> 2.7 <sup>b)</sup> 2.72 <sup>c)</sup>	3.8 <sup>b)</sup>	3.4 <sup>a)</sup> 5.28 <sup>b)</sup> 3.8 <sup>c)</sup>
ZnTe	2.27 <sup>a)</sup> 2.32 <sup>b)</sup> 2.27 <sup>c)</sup>	2.83 <sup>c)</sup>	3.05 <sup>a)</sup> 3.89 <sup>b)</sup> 3.05 <sup>c)</sup>

<sup>a)</sup> Les résultats de nos calculs effectués à l'aide de la méthode de la masse effective

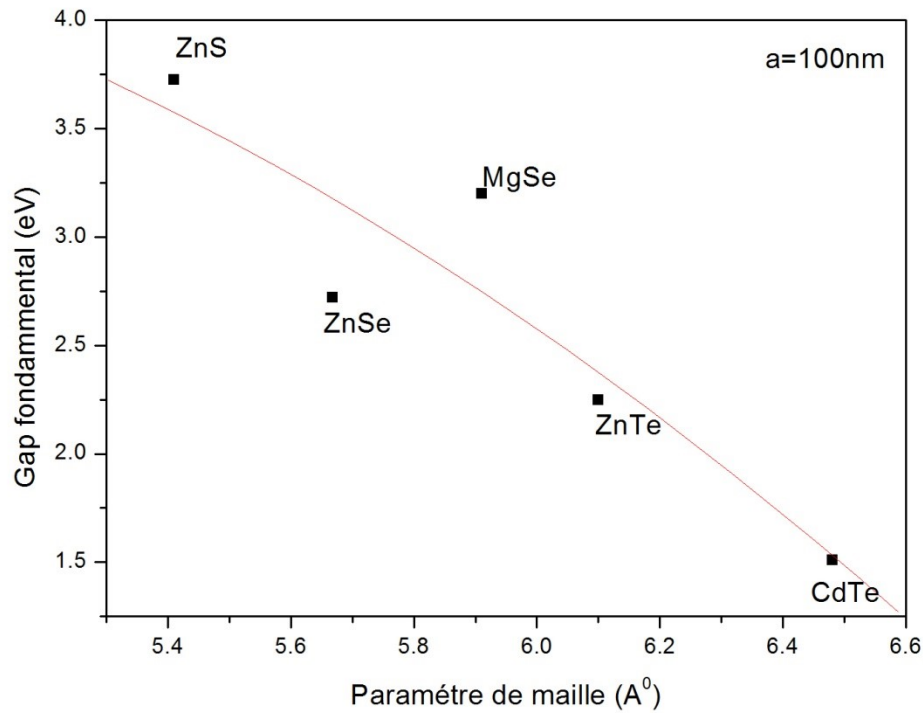
<sup>b)</sup> Les résultats de nos calculs réalisés en utilisant la méthode du pseudo-potentiel.

<sup>c)</sup> [9].

Les figures ci-dessous ont été générées pour étudier les variations des gaps fondamentaux des composés semiconducteurs binaires tels que MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe en fonction du paramètre de maille, pour des valeurs de  $a$  égales à 3 nm et 100 nm.



**Figure 3-48:** Changement du gap fondamental par rapport au paramètre de réseau ( $a=3$  nm).



**Figure 3-49:** Changement du gap fondamental par rapport au paramètre du réseau ( $a=100$  nm).

Une analyse des données montre que le composé ZnS présente un gap fondamental considérablement plus large, tandis que le CdTe a un gap fondamental relativement plus faible par rapport aux autres composés étudiés. Cette observation nous permet de conclure que le matériau ayant le paramètre de maille le plus grand présente un gap fondamental plus faible. Les équations d'ajustement quadratique pour le gap fondamental des composés semi-conducteurs nanostructurés : MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe, en fonction du paramètre de maille pour un rayon de point quantique ( $a=3$  nm) et ( $a=100$  nm), sont les suivantes :

$$a=3 \text{ nm: } E_g(x) = -0.90151 + 2.98191x - 0.38974x^2 \quad (3-46)$$

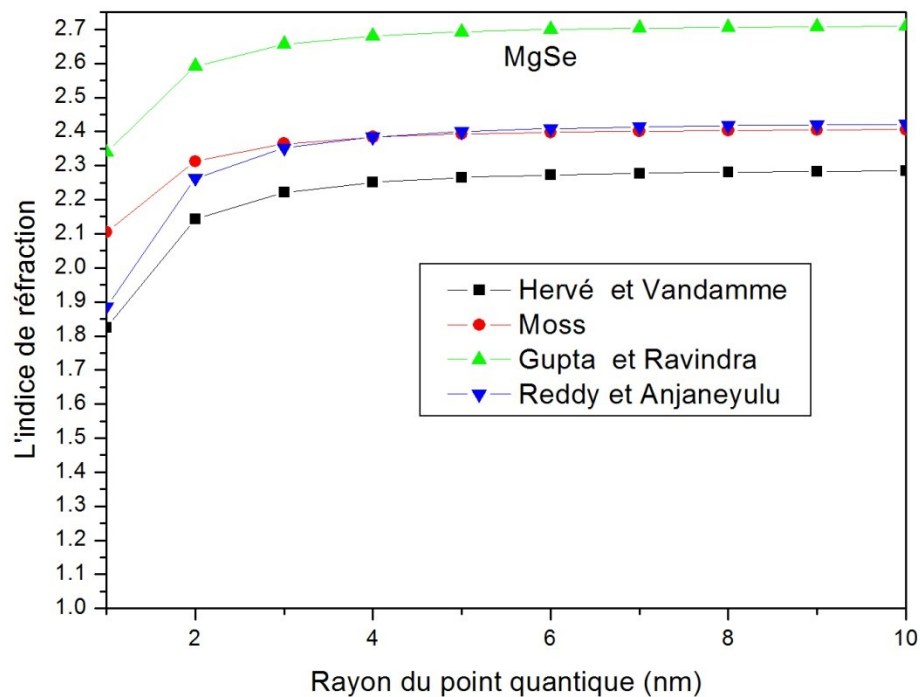
$$a=100 \text{ nm: } E_g(x) = -1.89247 + 3.44893x - 0.45069x^2 \quad (3-47)$$

( $x$ ) est le paramètre de maille.

### 3-6-3 Etude des propriétés optiques

#### 3-6-3-1 L'indice de réfraction

Au cours de cette étude, nous avons réalisé des calculs de l'indice de réfraction en utilisant les six modèles empiriques mentionnés précédemment. Ces modèles ont été employés afin d'analyser la variation de l'indice de réfraction pour les composés binaires MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe en fonction du rayon des points quantiques ( $a$ ), couvrant une plage étendue de 1 nm à 10 nm. L'objectif principal était d'acquérir une meilleure compréhension du comportement de ce paramètre physique crucial. Les résultats de ces calculs sont présentés dans les figures suivantes:



**Figure 3-50:** Changement de l'indice de réfraction du MgSe en fonction du rayon  $a$ .

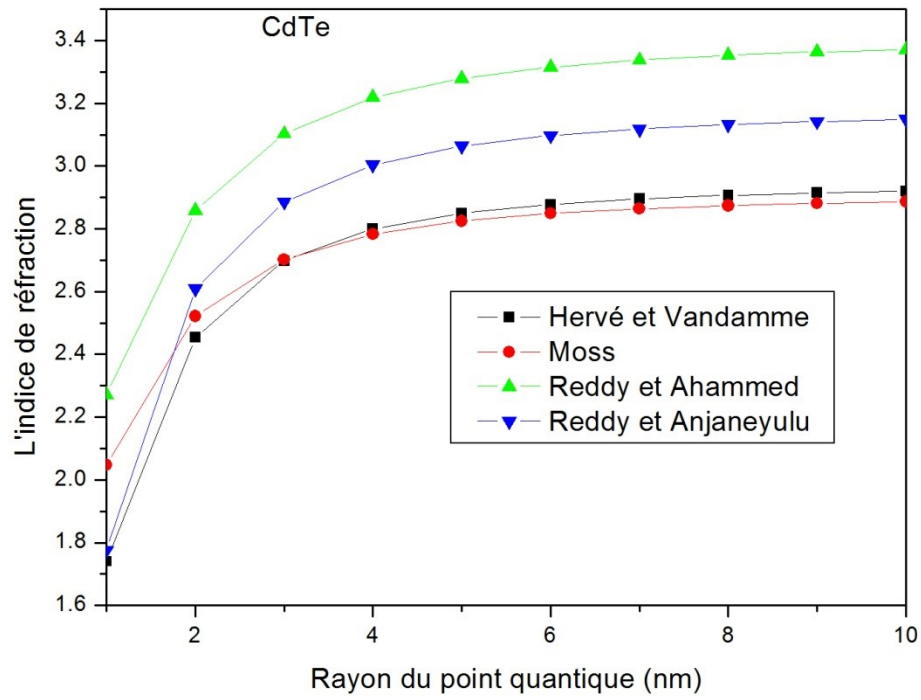


Figure 3-51: Changement de l'indice de réfraction du CdTe en fonction du rayon a

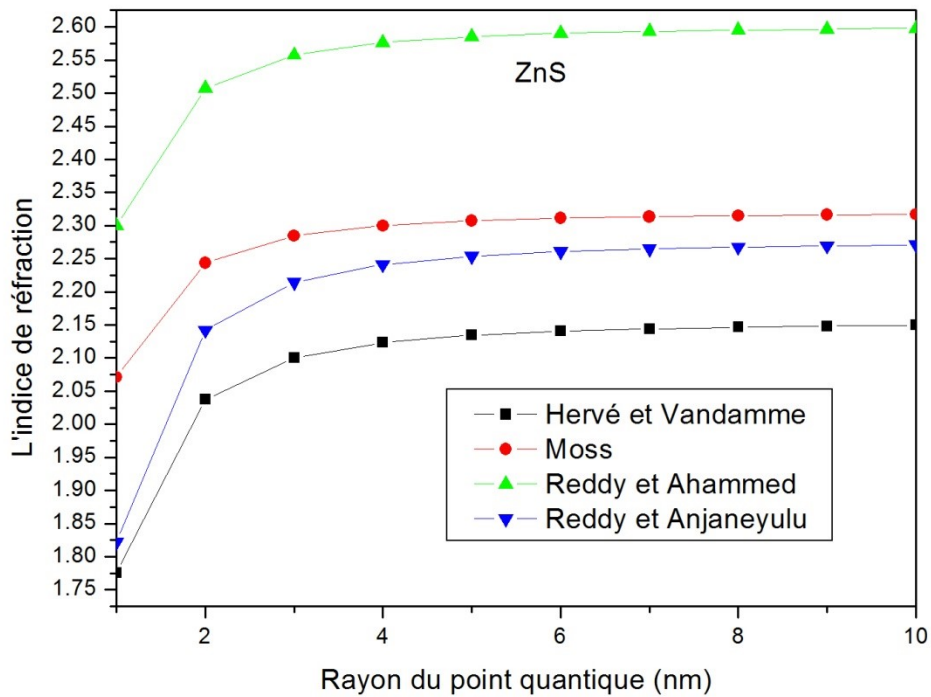


Figure 3-52: Changement de l'indice de réfraction du ZnS en fonction du rayon a.

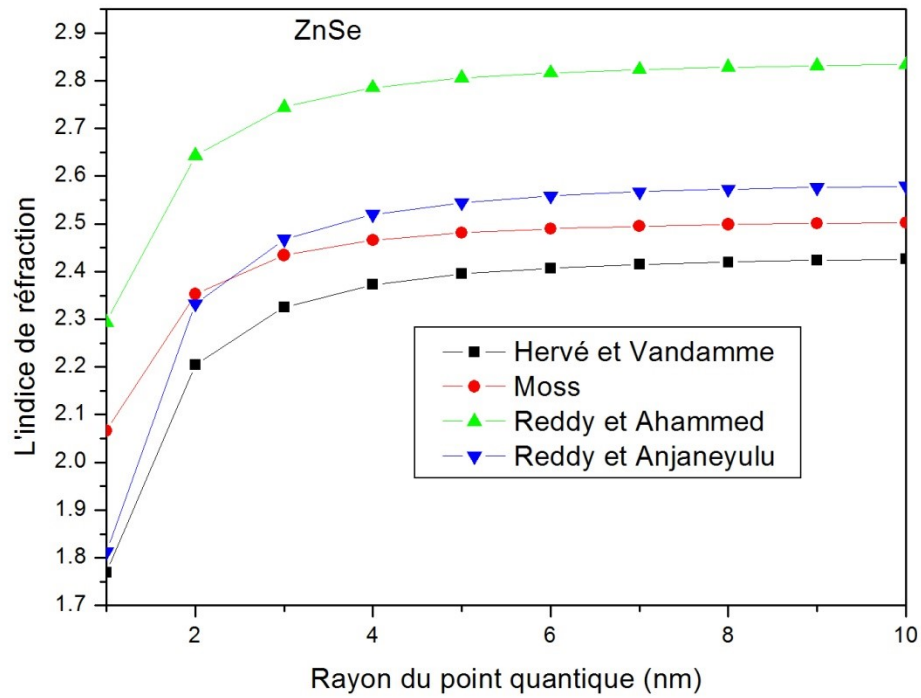


Figure 3-53: Changements de l'indice de réfraction du ZnSe en fonction du rayon a.

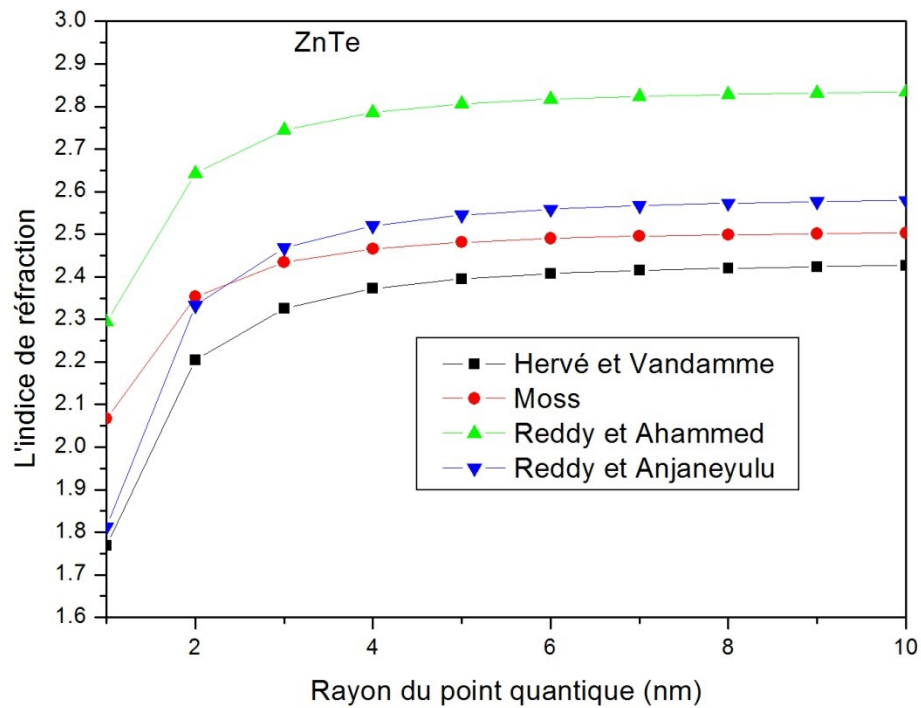


Figure 3-54: Changement de l'indice de réfraction du ZnTe en fonction du rayon a.

Les résultats présentés dans les figures précédentes mettent en évidence un comportement similaire de l'indice de réfraction pour les composés semiconducteurs nanostructurés MgSe, CdTe, ZnS et ZnSe. Toutefois, il est important de noter que certains modèles et certains composés semiconducteurs ne permettent pas le calcul de certaines valeurs d'indice, ce qui peut entraîner des résultats négatifs ou inférieurs à 1 pour l'indice de réfraction.

Nos observations montrent une diminution de l'indice de réfraction avec la réduction du rayon des points quantiques, tandis qu'il augmente de manière non linéaire avec l'augmentation du rayon ( $a$ ). Lorsque le rayon du point quantique dépasse la valeur de  $a=10$  nm, nous constatons que l'indice de réfraction commence à se stabiliser.

Dans le tableau 3-15, les valeurs calculées de l'indice de réfraction sont présentées et comparées aux valeurs théoriques pour un rayon de point quantique  $a=100$  nm, représentant le cas massif.

**Tableau 3-15:** Comparaison des indices de réfraction calculés des semiconducteurs nanostructurés pour un rayon de point quantique  $a=100$  nm avec les données théoriques.

Composé	n calculé à partir :						valeurs théoriques de l'indice de réfraction
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjneyulu	Reddy et Ahammed	
MgSe	2.410	1.440	2.10	2.290	2.430	2.710	2.14 <sup>a)</sup>
CdTe	2.910	2.890	3.150	2.950	3.190	3.410	2.92 <sup>b)</sup>
ZnS	2.320	1.0	1.770	2.150	2.280	2.600	2.25 <sup>a)</sup>
ZnSe	2.510	1.850	2.40	2.440	2.590	2.840	2.5 <sup>a)</sup>
ZnTe	2.630	2.230	2.680	2.600	2.770	3.0	2.72 <sup>c)</sup>

<sup>a)</sup> [106], <sup>b)</sup> [76], <sup>c)</sup> [107].

En analysant l'erreur relative  $\Delta x/x$  entre les résultats calculés et les données théoriques de l'indice de réfraction, il est possible de déterminer le modèle le plus précis pour le calcul de l'indice de réfraction ( $n$ ). Les valeurs d'erreur relative sont présentées dans le tableau 3-16 et le modèle ayant la plus petite valeur d'erreur relative est considéré comme étant le plus précis.

**Tableau 3-16:** Évaluation de la précision de l'indice de réfraction des composés binaires semiconducteurs nanostructurés II-VI.

Composé	Modèle de calcul de l'indice de réfraction le plus proche	Valeur de l'erreur relative
MgSe	Gupta et Ravindra	1.87 %
CdTe	Moss	0.34 %
ZnS	Reddy et Anjaneyulu	1.33 %
ZnSe	Moss	0.40 %
ZnTe	Reddy et Anjaneyul	1.40 %

Les équations suivantes ont été obtenues en appliquant un ajustement quadratique à tous les modèles d'indice de réfraction:

MgSe (Gupta et Ravindra) :

$$n(a) = 2.10193 + 0.00131a - 1.03590 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-48)$$

CdTe (Moss) :

$$n(a) = 2.77497 + 0.0059a - 4.66174 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-49)$$

ZnS (Reddy et Anjaneyulu) :

$$n(a) = 2.23703 + 0.00176a - 1.39368 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-50)$$

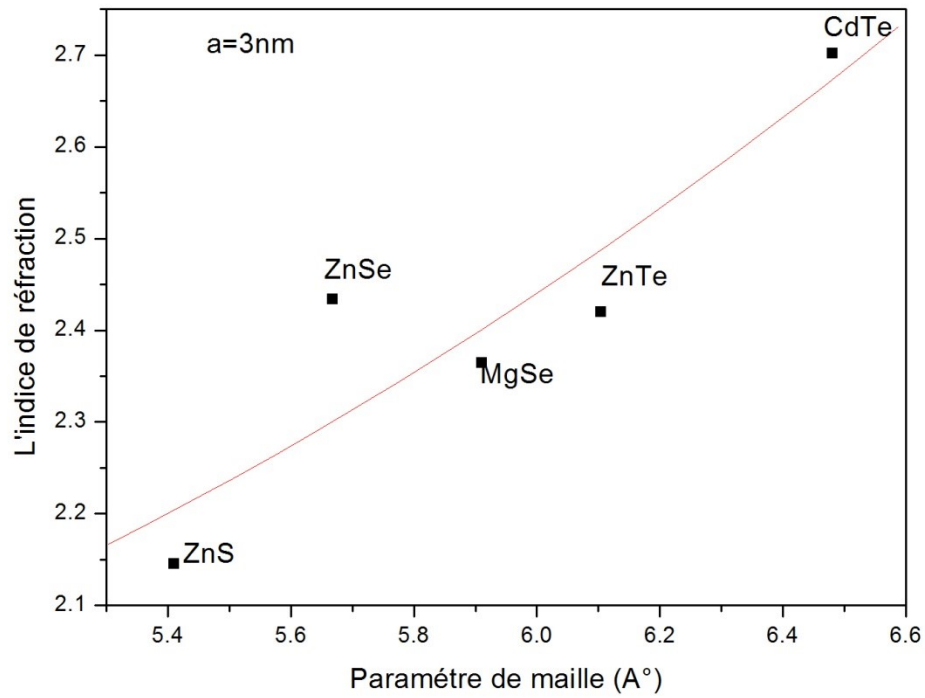
ZnSe (Moss) :

$$n(a) = 2.46132 + 0.00217a - 1.71513 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-51)$$

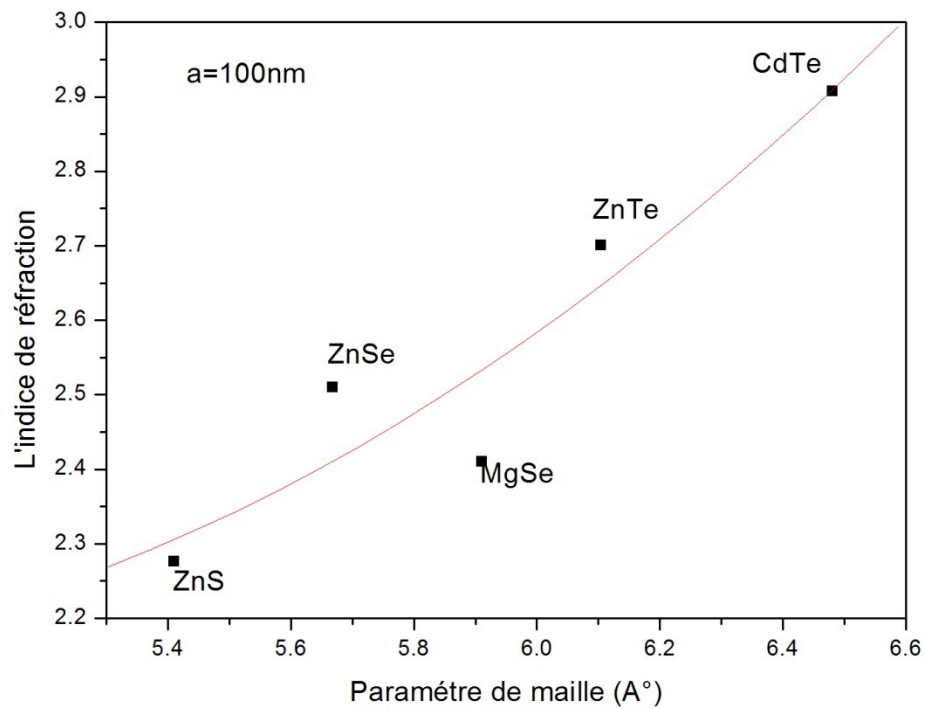
ZnTe (Reddy et Anjaneyulu) :

$$n(a) = 2.5012 + 0.00222a - 1.4556 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-52)$$

Les figures ci-dessous illustrent la variation de l'indice de réfraction des semiconducteurs binaires (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) en fonction du paramètre de maille, pour des rayons de points quantiques de  $a=3$  nm et  $a=100$  nm:



**Figure 3-55:** La variation de l'indice de réfraction par rapport au paramètre du réseau pour (a=3 nm).



**Figure 3-56:** La variation de l'indice de réfraction par rapport au paramètre de réseau pour (a=100 nm).

Il est important de noter que l'indice de réfraction du CdTe présente la valeur la plus élevée parmi les autres composés binaires étudiés, ce qui est contraire au comportement observé pour le gap énergétique. Les équations d'ajustement quadratique de l'indice de réfraction pour les composés semiconducteurs nanostructurés (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) en fonction du paramètre de maille, pour les valeurs de rayon de point quantique  $a=3$  nm et  $a=100$  nm, sont les suivantes:

$$a=3 \text{ nm: } n(x) = 2.60779 - 0.50338x - 0.07925x^2 \quad (3-53)$$

$$a=100 \text{ nm: } n(x) = 5.99982 - 1.72394x - 0.19244x^2 \quad (3-54)$$

( $x$ ) Paramètre de maille.

Ces équations peuvent être utilisées comme modèles pour calculer l'indice de réfraction à l'échelle nanométrique.

### 3-6-4 Étude des propriétés diélectriques

#### 3-6-4-1 La constante diélectrique de haute fréquence $\epsilon_\infty$

Les tableaux 3-15 et 3-16 permettent de calculer la constante diélectrique haute fréquence et d'obtenir les figures suivantes:

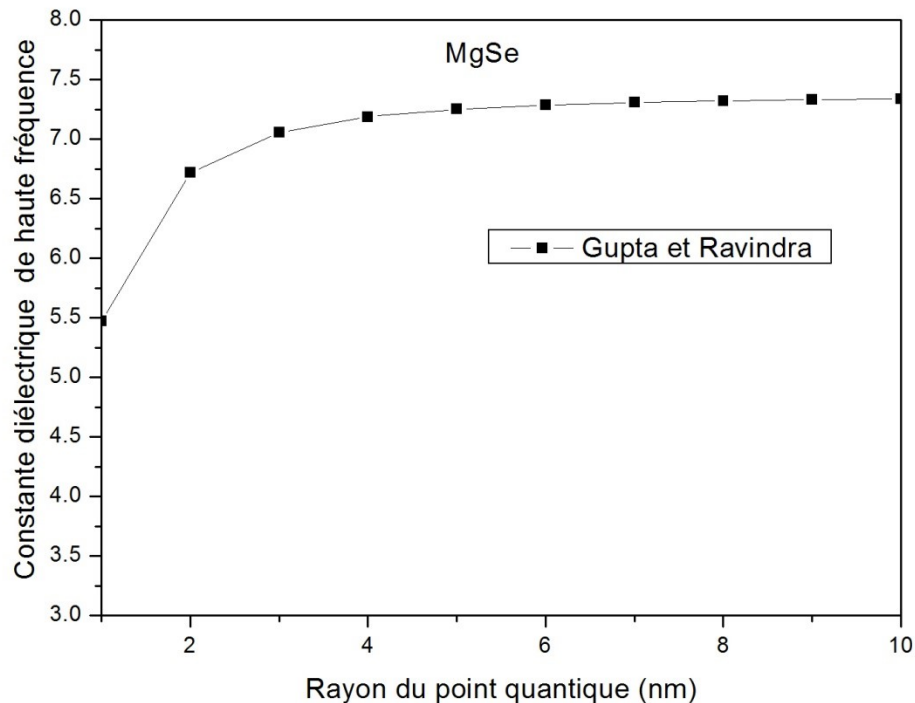


Figure 3-57: Constante  $\epsilon_\infty$  du MgSe par rapport au rayon  $a$ .

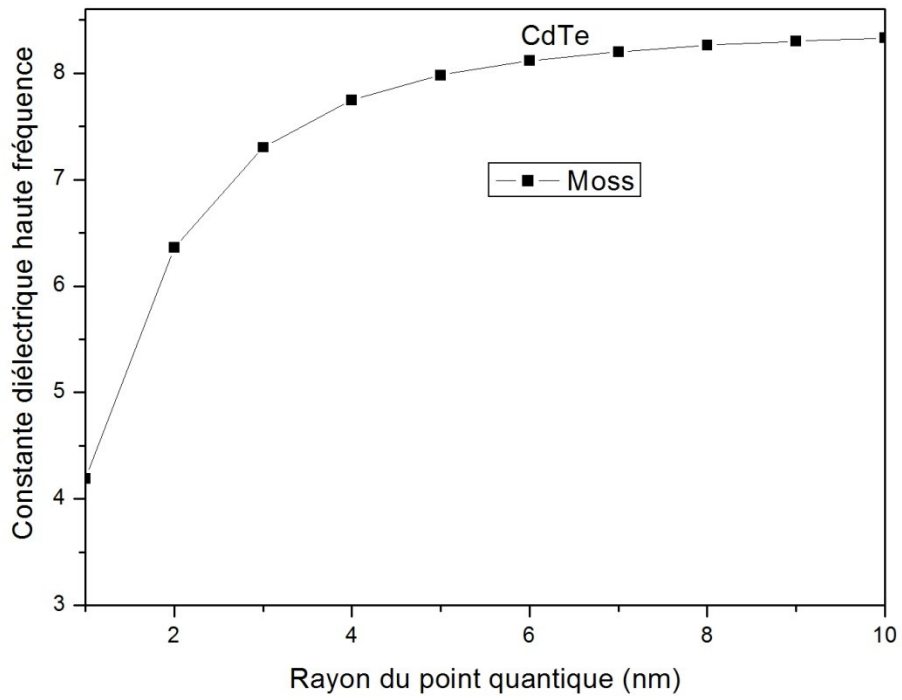


Figure 3-58: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du CdTe par rapport au rayon a.

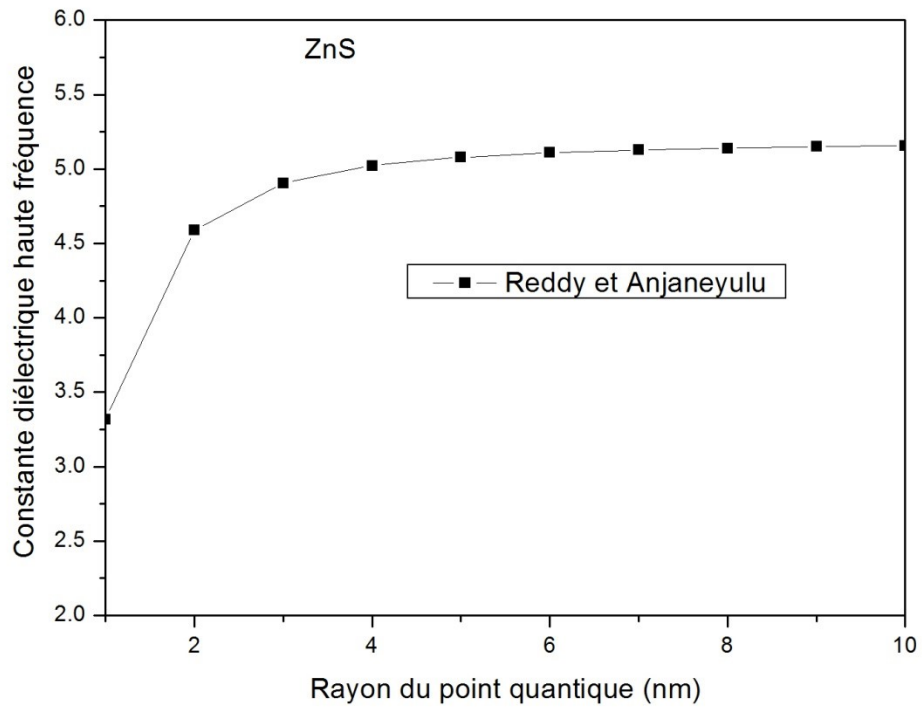


Figure 3-59: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du ZnS par rapport au rayon a.

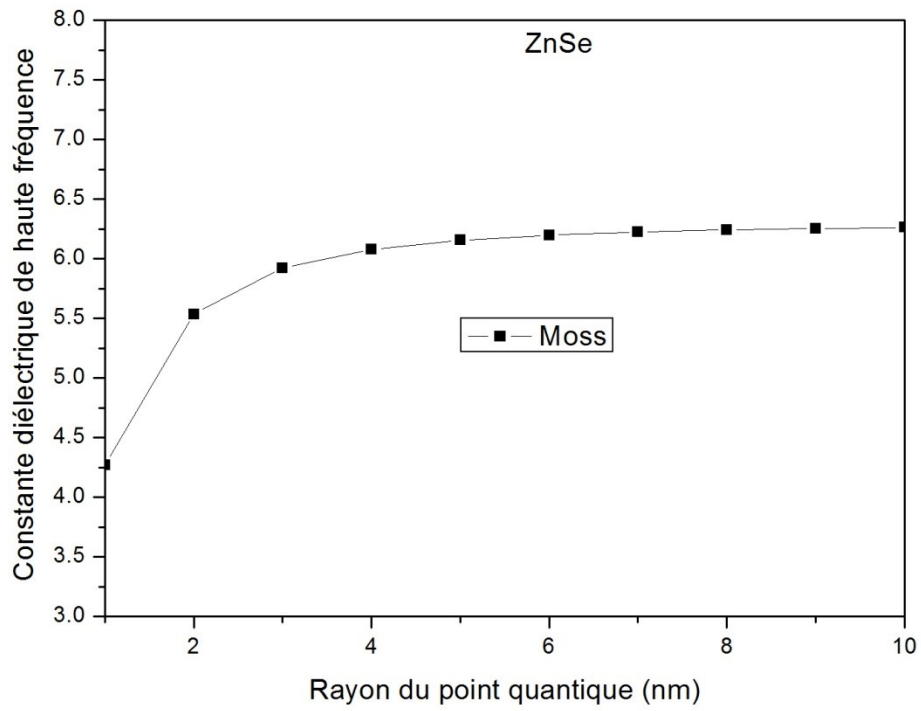


Figure 3-60: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du ZnSe par rapport au rayon a.

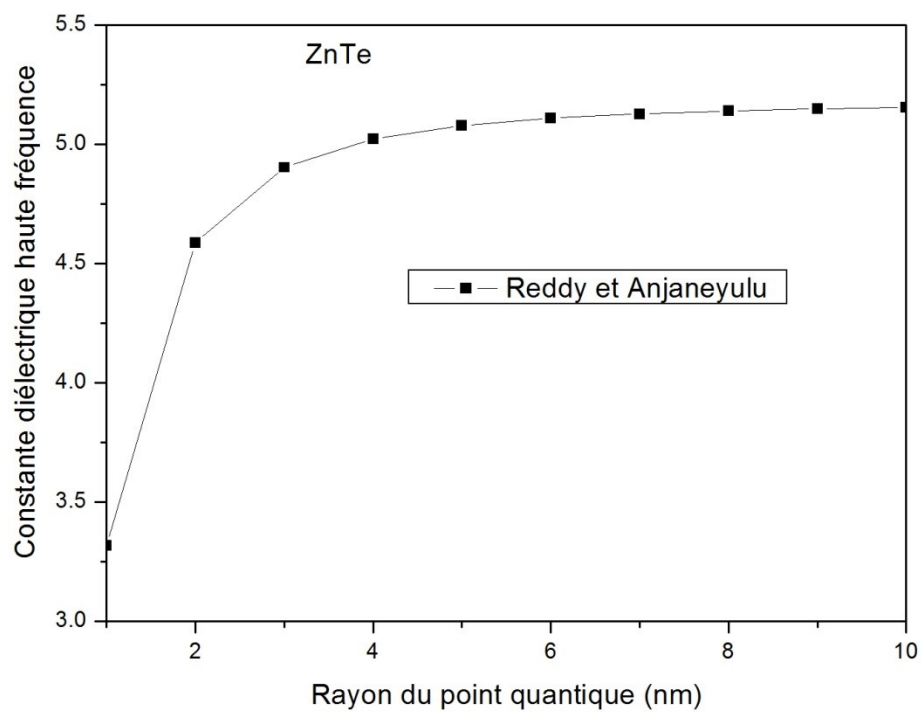


Figure 3-61: Constante  $\epsilon_{\infty}$  du ZnTe par rapport au rayon a.

Les équations d'ajustement quadratique pour chaque modèle sont les suivantes :

$$\text{MgSe: } \varepsilon_{\infty}(a) = 5.1003 + 0.27755a - 0.05292a^2 \quad (3-55)$$

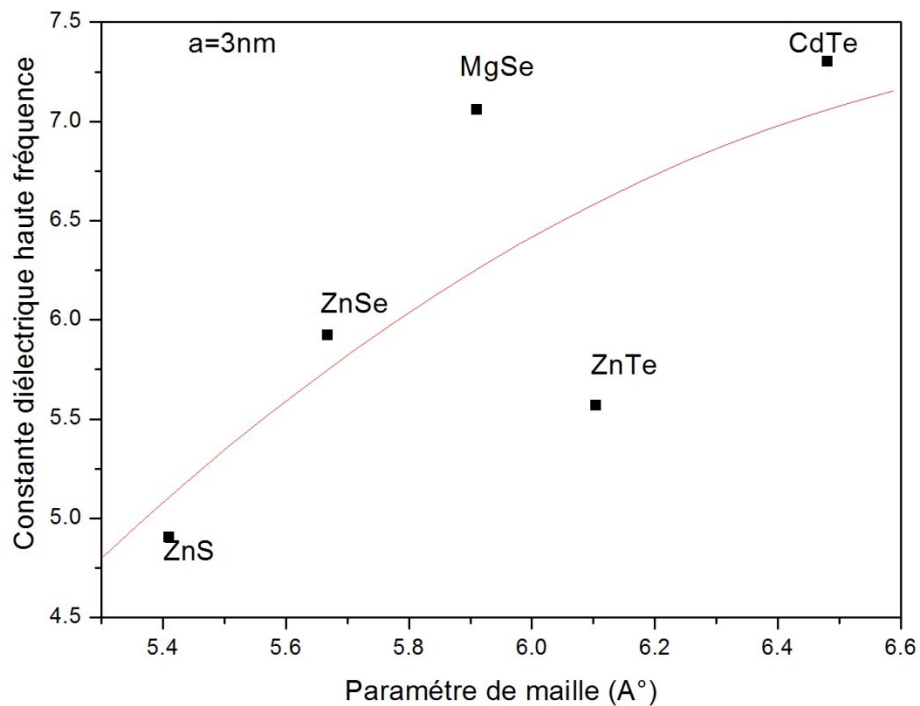
$$\text{CdTe: } \varepsilon_{\infty}(a) = 3.62936 + 1.31941a - 0.08847a^2 \quad (3-56)$$

$$\text{ZnS: } \varepsilon_{\infty}(a) = 3.21637 + 0.58856a - 0.04138a^2 \quad (3-57)$$

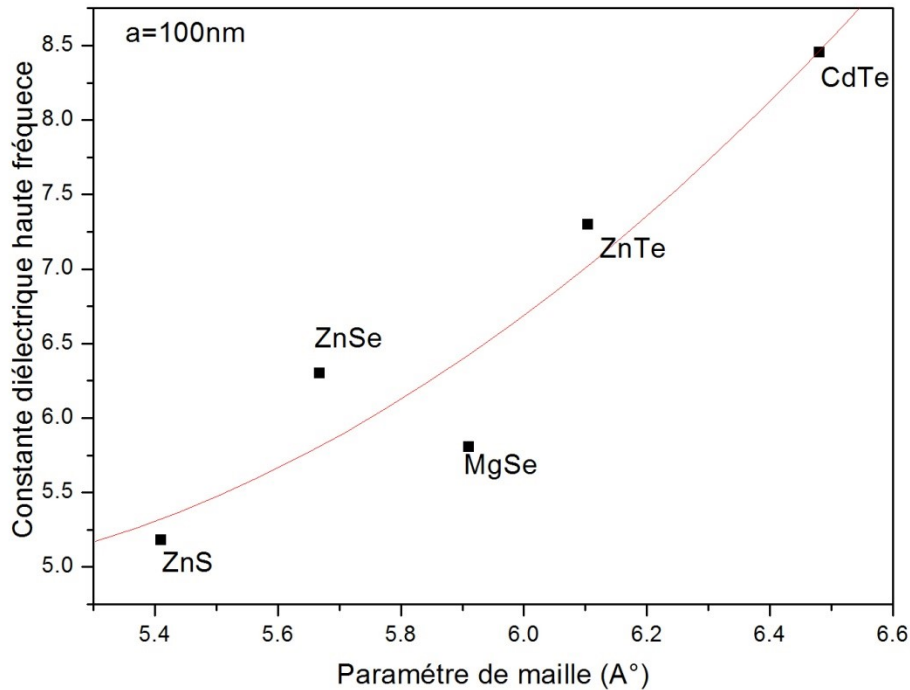
$$\text{ZnSe: } \varepsilon_{\infty}(a) = 4.1036 + 0.64047a - 0.04443a^2 \quad (3-58)$$

$$\text{ZnTe: } \varepsilon_{\infty}(a) = 5.77497 + 0.1549a - 0.03452a^2 \quad (3-59)$$

Les figures ci-dessous présentent la variation de la constante diélectrique de haute fréquence des composés binaires semiconducteurs (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) en fonction du paramètre de maille pour des valeurs de  $a$  égales à 3 nm et 100 nm:



**Figure 3-62:** La constante diélectrique  $\varepsilon_{\infty}$  en fonction de paramètre de réseau  
( $a=3$  nm)



**Figure 3-63:** La constante diélectrique  $\epsilon_{\infty}$  en fonction de paramètre de réseau ( $a=100$  nm).

Les équations d'ajustement quadratique de la constante diélectrique de haute fréquence pour les composés semiconducteurs nanostructurés (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) en fonction du paramètre de maille ( $a=3$  nm et  $a=100$  nm) sont les suivantes:

$$a=3 \text{ nm: } \epsilon_{\infty}(x) = -33.54632 + 11.58619x - 0.82095x^2 \quad (3-60)$$

$$a=100 \text{ nm: } \epsilon_{\infty}(x) = 34.75863 - 12.43286x + 1.29245x^2 \quad (3-61)$$

( $x$ ) étant le paramètre de maille.

Nous remarquons que la constante diélectrique haute fréquence présente un comportement identique à celui de l'indice de réfraction.

### 3-7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exploré les propriétés électroniques, optiques et diélectriques des composés semi-conducteurs binaires nanostructurés, à savoir GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP, MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe, dans la phase Zinc-Blende. Nous avons étudié ces propriétés en relation avec le rayon des points quantiques sphériques, en utilisant la méthode empirique du pseudopotentiel (EPM).

Les résultats obtenus révèlent que les composés GaAs, InAs, InP et GaSb, ainsi que CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe, présentent un gap d'énergie direct  $E_F^F$ . En revanche, les composés AlAs, AlSb, GaP et MgSe ont un gap d'énergie indirect  $E_F^X$ . Ces observations ont été réalisées en faisant varier le rayon des points quantiques dans une plage allant de 1 à 10 nm.

Il est important de noter que tous les gaps d'énergie des matériaux étudiés augmentent lorsque le rayon des points quantiques diminue. Par ailleurs, l'indice de réfraction présente une variation non linéaire en fonction du rayon des points quantiques, augmentant avec son augmentation.

En évaluant l'erreur relative par rapport aux valeurs théoriques, nous pouvons déterminer les modèles les plus appropriés pour le calcul de l'indice de réfraction. La constante diélectrique de haute fréquence ( $\epsilon_\infty$ ) est ensuite calculée en utilisant le modèle sélectionné pour l'indice de réfraction. Une réduction significative de la valeur de la constante diélectrique est observée lorsque la taille diminue.

Une attention particulière est accordée à la structure de bande et à la masse effective des électrons et des trous lourds dans le composé semiconducteur nanostructuré GaSb, ainsi qu'à leur dépendance en fonction du rayon du point quantique.

Conclusion générale

## Conclusion générale

Ce travail de recherche examine l'effet du confinement quantique sur les propriétés physiques des composés semiconducteurs binaires nanostructurés du type III-V (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP) et du type II-VI (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) dans la phase zinc-blende, tels que les propriétés électroniques, optiques et diélectriques et d'étudier leur dépendance vis-à-vis de la taille des points quantiques sphériques sur une plage variant de 1 à 10 nm en utilisant la méthode empirique du pseudopotentiel (EPM) ainsi que la méthode de la masse effective. Une attention particulière est donnée à la structure de bande et à la masse effective des électrons et des trous lourds du composé semiconducteur nanostructuré GaSb

Nous avons constaté que les semi-conducteurs III-V nanostructurés tels que GaAs, InAs, InP et GaSb présentent un gap direct, tandis que AlAs, AlSb et GaP ont un gap indirect, pour les semi-conducteurs II-VI tels que CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe présentent eux même un gap direct par contre le MgSe a un gap indirect. Cependant, lors de l'observation de ces matériaux à l'échelle nanométrique, nous avons remarqué que les gaps directs  $E_G^{\Gamma}$  de tous les semiconducteurs nanostructurés objet de notre étude augmentaient lorsque le rayon du point quantique ( $a$ ) diminuait. Cette augmentation est due à l'effet du confinement quantique sur les gaps d'énergie.

Cette variation est non linéaire entre 1 nm et 6 nm, ces gaps commencent à se stabiliser lorsque le rayon dépasse 10 nm. Aucune transition du gap n'est observée.

Nous avons calculé l'indice de réfraction en utilisant six modèles différents, cet indice présente une variation non linéaire en fonction du rayon du point quantique entre 1 nm et 6 nm, il augmente avec l'augmentation du rayon quantique et se stabilise au-delà de 10 nm. La diminution de la taille réduit considérablement l'indice de réfraction par rapport à sa valeur en massif, avec un comportement inverse à celui du gap énergétique.

Une approche basée sur l'erreur relative par rapport aux valeurs théoriques a été adoptée pour déterminer les modèles les plus précis de l'indice de réfraction et de la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$ . Cela nous a permis de déterminer la constante diélectrique de haute fréquence pour chaque composé semiconducteur nanostructuré étudié. Sa variation en fonction du rayon du point quantique sphérique est

similaire à celle de l'indice de réfraction. L'étude à l'échelle nanométrique a révélé une diminution de ces deux paramètres lorsque le rayon ( $a$ ) diminue.

L'étude de la variation de la masse effective des électrons et des trous lourds du semiconducteur nanostructuré GaSb présentant un gap direct nous a permis de déterminer la façon dont les électrons et les trous se comportent dans un matériau. Toutefois, comprendre la masse effective permet de prédire et d'expliquer les propriétés électroniques des matériaux.

Dans notre cas la masse effective des électrons et des trous diminue chaque fois que le rayon du point quantique augmente. Cela conduit à une augmentation de la mobilité des porteurs de charge dans le matériau, ce qui entraîne des modifications significatives dans la description de la plupart des propriétés de transport.

Ce travail de recherche ouvre des perspectives pour d'autres études théoriques utilisant d'autres méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques, comme la méthode des ondes planes augmentées (APW), afin d'explorer d'autres propriétés physiques à l'échelle nanométrique des matériaux semiconducteurs et d'évaluer par la suite leur domaine d'application.

### Références bibliographiques

- [1] Benatmane, K. (2011). Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V (Doctoral dissertation, Batna).
- [2] <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>
- [3] Canham, L. T. (1990). Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers. *Applied physics letters*, 57(10), 1046-1048.
- [4] Liu, Z., Osamura, M., Ootsuka, T., Kuroda, R., Fukuzawa, Y., Otagawa, N., ... & Tanoue, H. (2007). Effect of a Fe<sub>3</sub>Si buffer layer for the growth of semiconducting  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> thin film on stainless steel substrate. *Journal of crystal growth*, 307(1), 82-86.
- [5] MESSAOUDENE, I. (2014). Effet de confinement quantique sur la structure de bande des semi-conducteurs à puits quantiques (Doctoral dissertation, Université Mohamed BOUDIAF de M'Sila)..
- [6] [http://www.semiwafer.com/images/20170913\\_100824.jpg](http://www.semiwafer.com/images/20170913_100824.jpg).
- [7] Tararbit Abderahmane, Etude sur les différentes propriétés des semi-conducteurs (Si, Ge, SiC, GaAs, NGe), Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou
- [8] Chovet, A., & Masson, P. (2007). Cours de physique des semi-conducteurs. École Polytechnique Universitaire de Marseille, IMT, Technopole de Château-Gombert, 13451.
- [9] OUADAH, O. Etude comparative des effets de dopage et co-dopage (Al, Ga) sur les propriétés structurales, électroniques et optiques de ZnO (Doctoral dissertation, 14-01-2018).
- [10] Haacke, G. (1977). Transparent conducting coatings. *Annual Review of Materials Science*, 7(1), 73-93.
- [11] Tadjine, A. (2018). Structure électronique et propriétés de réseaux cohérents de nanocristaux semi-conducteurs.
- [12] AID, A. (2019). Etude de quelques propriétés physiques de L'alliage BxIn<sub>1-x</sub>Sb en utilisant les méthodes de premiers principes (Doctoral dissertation, Université Mohamed BOUDIAF de M'Sila).
- [13] Yousfi, C. (2020). Etude des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage semi-conducteur InAs (1-x) Px (x= 0, 0.25, 0.5 0.75, 1) par la méthode (FPLAPW).

- [14] Refice, F. Z. (2016). Etude théorique des propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Boudiaf, M'sila).
- [15] Bachari, E. M., Baud, G., Amor, S. B., & Jacquet, M. (1999). Structural and optical properties of sputtered ZnO films. *Thin solid films*, 348(1-2), 165-172.
- [16] Adachi, S. (2009). Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors. John Wiley & Sons.
- [17] Sze, S. M., Li, Y., & Ng, K. K. (2021). *Physics of semiconductor devices*. John Wiley & Sons.
- [18] Boumediene, K., & Sekoum, A. (2020). Etude AB-initio des propriétés structurales et électroniques d'un puit quantique à base SC III-V.
- [19] Abeles, F. (1972). Optical properties of solids.
- [20] MEZRAG, F. (2012). Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider-Biskra).
- [21] Ravindra, N. M., Ganapathy, P., & Choi, J. (2007). Energy gap–refractive index relations in semiconductors—An overview. *Infrared physics & technology*, 50(1), 21-29.
- [22] Mezrag, F., Bouarissa, N., Boucenna, M., & Hannachi, L. (2010). Refractive index, and dielectric constants of lattice matched and mismatched  $Cdx Zn_{1-x} Sey Te_{1-y}$  quaternary alloys. *Physica Scripta*, 82(3), 035702.
- [23] Brahmi, B. E. N., Merad, A. E., & Dergal, S. (2013). Physical bowing parameters of  $ZnS_xSe_{1-x}$  ternary semiconductor from Ab initio study. *Journal of Materials Science and Engineering A*, 3(3), 195-202.
- [24] Hernandez-Calderon, I. (2018). Optical properties and electronic structure of wide band gap II-VI semiconductors. In *II-VI semiconductor materials and their applications* (pp. 113-170). Routledge.
- [25] Hannachi, L., & Bouarissa, N. (2008). Electronic structure and optical properties of  $CdS_xTe_{1-x}$  mixed crystals. *Superlattices and Microstructures*, 44(6), 794-801.
- [26] Baars, J., & Sorger, F. (1972). Reststrahlen spectra of HgTe and  $CdxHg_{1-x}Te$ . *Solid State Communications*, 10(9), 875-878.
- [27] Cohen, M. L., & Bergstresser, T. K. (1966). Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures. *Physical Review*, 141(2), 789.

- [28] J.R. Chelikowsky and M.L. Cohen (1976), Phys. Rev, B 14,556.
- [29] M.L. Cohen, J. R. Chelikowsky (1989), Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences, Ed. Springer, New York).
- [30] MOHAMMED, M. B. (2012). Modélisation des phénomènes de vieillissement des modules Photovoltaïques. Mémoire de Magistère, Université Abou-Bakr Belkaïd-Tlemcen, Algérie.
- [31] Wolf, E. L. (2006). Looking into the Future. Nanophysics and Nanotechnology, 250.
- [32]<https://www.mediachimie.org/ressource/les-nano-objets-un-avenir-prometteur-souscontr%C3%B4le>.
- [33] Herve-Bazin, B. (2005). dossier: Nanotechnologies et risques sanitaires-Les dangers des particules ultrafines. Preventique Securite, (80), 11-16.
- [34] Etchart-Salas, R., & Bergaya, B. (2008). L'enjeu des nanomatériaux. La Lettre du pneumologue, 11(5), 178-183.
- [35] Klabunde, K. J., & Richards, R. M. (Eds.). (2009). Nanoscale materials in chemistry. John Wiley & Sons.
- [36] Siegel, R. W. (1993). Nanostructured materials-mind over matter. Nanostructured Materials, 3(1-6), 1-18.
- [37] BEN DOB, Y., & KHIDOURI, L. Biosynthèse des nanoparticules à base des dattes (Phoenic dactylfera L) (Doctoral dissertation, UNIVERSITÉ KASDI MERBAH OUARGLA).
- [38] Lepage, H. (2012). Modélisation de solides à nanocristaux de silicium (Doctoral dissertation, INSA de Lyon).
- [39] Chandran, R., & Suresh, G. (2011, December). A Simple Chemical Route for the Synthesis of Low Cost UV-sensor Using CdMgS Nanocrystalline Films. In AIP Conference Proceedings (Vol. 1415, No. 1, pp. 63-66). American Institute of Physics.
- [40] Albe, V., Jouanin, C., & Bertho, D. (1998). Influence of II–VI nanocrystal shapes on optical properties. Journal of crystal growth, 184, 388-392.
- [41] Sebais, M., & Harieche, B. (2017). Etude des propriétés optiques des nanocristaux au semi-conducteur CdS dispersés dans des films minces du polymère polystyrène et de la silice SiO<sub>2</sub>.
- [42] NANOMATERIAUX, L. (2006). Effets sur la santé de l'homme et sur l'environnement.
- [43]kagarama,Y. (1988) phys.Rev.B 38,14,9797
- [44] Harieche, B., & Boudine, B. (2017). Elaboration et caracterisation des matrices

dopées par des agrégats des semi-conducteurs.

[45] Sebais, M., & Berroual, N. (2017). Caractérisation structurale et optique des nanocristaux des semi-conducteurs Ga As et TiO<sub>2</sub> inclus dans les monocristaux de KCl et de KBr.

[46] NANOMATERIAUX, L. (2006). Effets sur la santé de l'homme et sur l'environnement.

[47] Koch, S. W., & Haug, H. (1994). Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors. (No Title).

[48] Louis, C. (2004). Synthèse et caractérisation de nanoparticules hybrides à coeur d'oxyde de gadolinium (Doctoral dissertation, Lyon 1).

[49] <http://pcml.univ-lyon.fr/raman/petites.html>.

[50] [www.inrs.fr/risques/nanomateriaux.html](http://www.inrs.fr/risques/nanomateriaux.html).

[51] Faix-Gantier, A. (2001). Phénoménologie et calculs numériques de la propagation d'une flamme prémélangée hydrogène-air pauvre dans un milieu turbulent (Doctoral dissertation, Poitiers).

[52] Butty, J., Hu, Y. Z., Peyghambarian, N., Kao, Y. H., & Mackenzie, J. D. (1995). Quasicontinuous gain in sol-gel derived CdS quantum dots. Applied physics letters, 67(18), 2672-2674.

[53] I. Wang, I. (2002). Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier Grenoble 1 .

[54] Ashoori, R. C. (1996). Electrons In Artificial Atoms (Vol 379, Pg 413, 1996). Nature, 380(6574), 559-559.

[55] Murray, C. B., Kagan, C. R., & Bawendi, M. G. (2000). Synthesis and characterization of monodisperse nanocrystals and close-packed nanocrystal assemblies. Annual review of materials science, 30(1), 545-610.

[56] H.Y. Ramirez, J. Flórez, A.S. Camacho, Phys. Chem.

[57] Adachi, S. (1987). Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2–4- $\mu$ m optoelectronic device applications. Journal of applied physics, 61(10), 4869-4876.

[58] Wang, W. Q., & Jiang, M. Z. (2018). Gas Phase Growth Techniques for Quantum Dots: An Overview. technology, 14(4), 3-12.

[59] Bouarissa, N. (2001). Optoelectronic properties of InAs<sub>1-x</sub>P<sub>x</sub> semiconducting alloys. Materials Science and Engineering: B, 86(1), 53-59.

[60] Bester, G. (2008). Electronic excitations in nanostructures: an empirical pseudopotential based approach. Journal of Physics: Condensed Matter, 21(2), 023202.

- [61] Kent, P. R. C., Bellaiche, L., & Zunger, A. (2002). Pseudopotential theory of dilute III–V nitrides. *Semiconductor science and technology*, 17(8), 851.
- [62] Bouarissa, N. (2013). Phonon confinement in nanostructured InP. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 10(5), 1284-1289.
- [63] Mezrag, F., Bouarissa, N., & Boucenna, M. (2016). The size-dependent electronic and optical properties of InAs quantum dots. *Optik*, 127(3), 1167-1170.
- [64] T. Kobayashi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ.* **2**, 7 (1993)
- [65] Kassali, K., Bouarissa, N. (2002). *Mater. Chem. Phys.* **76**,255 .
- [66] Bouarissa, N., & Boucenna, M. (2008). Band parameters for AlAs, InAs and their ternary mixed crystals. *Physica Scripta*, 79(1), 015701.
- [67] Gueddim, A., Eloud, T., Messikine, N., & Bouarissa, N. (2015). Energy levels and optical properties of GaN spherical quantum dots. *Superlattices and Microstructures*, 77, 124-133.
- [68] Ragan, R. (2002). Direct energy bandgap group IV alloys and nanostructures. California Institute of Technology.
- [69] Bouarissa, N. (2006). Effective masses of electrons, heavy holes and positrons in quasi-binary (GaSb)  $1-x$  (InAs)  $x$  crystals. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 67(7), 1440-1443.
- [70] Mezrag, F., Aouina, N. Y., & Bouarissa, N. (2006). Optoelectronic and dielectric properties of GaAs  $x$  Sb  $1-x$  ternary alloys. *Journal of materials science*, 41, 5323-5328.
- [71] Boucenna, M., Bouarissa, N., & Mezrag, F. (2014). Composition and lattice mismatch dependent dielectric constants and optical phonon modes of InAs $1-x-y$ Sb $x$ Py quaternary alloys. *Infrared Physics & Technology*, 67, 318-322.
- [72] Bouarissa, N. (2013). Phonon confinement in nanostructured InP. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 10(5), 1284-1289.
- [73] Al-Assiri, M. S., & Bouarissa, N. (2013). Electronic band structure and derived properties of AlAs $x$ Sb $1-x$  alloys. *Superlattices and Microstructures*, 59, 144-154.
- [74] Mohamed, W. K., Mezrag, F., & Bouarissa, N. (2010). Energy gaps and carrier effective masses of quasi-binary (GaP)  $1-x$  (ZnSe)  $x$  crystals. *Superlattices and Microstructures*, 47(2), 341-348.
- [75] Benyahia, E. H., & Halimi, O. (2017). Caractérisation structurale et optique de couches minces formées par des agrégats des nanocristaux de ZnO.
- [76] Hannachi, L., & Bouarissa, N. (2008). Electronic structure and optical properties of CdSexTe $1-x$  mixed crystals. *Superlattices and Microstructures*, 44(6), 794-801.

- [77] Hocini, M. (2021). Effet du confinement quantique sur les propriétés électroniques et optiques des matériaux semiconducteurs nanostructurés II-VI FACULTE DES SCIENCES DEPARTEMENT PHYSIQUE N°: Ph/APP/07/2021 DOMAINE: Sciences de la matière FILIERE: Physique OPTION: Physique Appliquée (Doctoral dissertation, UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF-M'SILA).
- [78] Adachi, S. (2009). Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors. John Wiley & Sons.
- [79] Aspnes, D. E., Olson, C. G., & Lynch, D. W. (1976). Ordering and absolute energies of the L 6 c and X 6 c conduction band minima in GaAs. *Physical Review Letters*, 37(12), 766.
- [80] Zollner, S., Garriga, M., Humlek, J., Gopalan, S., & Cardona, M. (1991). Temperature dependence of the dielectric function and the interband critical-point parameters of GaSb. *Physical Review B*, 43(5), 4349.
- [81] Alibert, C., Joullie, A., Joullie, A. M., & Ance, C. (1983). Modulation-spectroscopy study of the Ga  $1-x$  Al  $x$  Sb band structure. *Physical Review B*, 27(8), 4946.
- [82] Adachi, S. (1987). Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2–4- $\mu$ m optoelectronic device applications. *Journal of applied physics*, 61(10), 4869-4876.
- [83] Levinshstein, M. E., & Rumyantsev, S. L. (1996). Silicon (si). In *Handbook Series on Semiconductor Parameters: Volume 1: Si, Ge, C (Diamond), GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb* (pp. 1-32).
- [84] Kobayashi, A., Sankey, O. F., & Dow, J. D. (1982). Chemical trends for defect energy levels in Hg  $(1-x)$  Cd  $x$  Te. *Physical Review B*, 25(10), 6367.
- [85] Lee, G. D., Lee, M. H., & Ihm, J. (1995). Role of d electrons in the zinc-blende semiconductors ZnS, ZnSe, and ZnTe. *Physical Review B*, 52(3), 1459.
- [86] Moss, T. S. (1950). A relationship between the refractive index and the infra-red threshold of sensitivity for photoconductors. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 63(3), 167.
- [87] Ravindra, N. M, Srivastava, V. K.(1979) *Infrared Phy.* (19) 603.
- [88] Gupta, V. P, Ravindra, N. M. (1980) *Phys. Stat. Sol. (b)* (100) 715.
- [89] Herve, P., & Vandamme, L. K. J. (1994). General relation between refractive index and energy gap in semiconductors. *Infrared physics & technology*, 35(4), 609-615.
- [90] Reddy, R. R. , Anjaneyulu, S. (1992) *Phys. Stat. Sol. (b)* 174 K 91.

- [91] Ravindra, N. M., Ganapathy, P., & Choi, J. (2007). Energy gap–refractive index relations in semiconductors–An overview. *Infrared physics & technology*, 50(1), 21-29.
- [92] Reddy, R. R. , Ahmmmed, Y. N. , (1995) *Infrared Phys. Technol.* (36) 825.
- [93] Levinshtein, M. , Rumyantsev ,S., Shur, M., (eds) (1996) *Handbook series on semiconductor parameters*, vol 1. World Scientific, Singapore
- [94] Kittel, C., Poumellec, M., Mégy, R., & Dupas, C. (1993). *Physique de l'état solide*.Dunod.
- [95] Algarni, H., Al-Hagan, O. A., Bouarissa, N., Khan, M. A., & Alhuwaymel, T. F. (2018). Pseudopotential calculations of AlSb under pressure. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 190, 215-219.
- [96] Kara Mohamed, W. (2012). *Les Structures de bandes électroniques et les propriétés relatives aux semiconducteurs quasi binaires (GaP) 1-x (ZnSe) x* (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider-Biskra).
- [97] Vurgaftman, I., Meyer, J. Á., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11), 5815-5875.
- [98] Al Wadiy, N. H. M., Bouarissa, N., & Khan, M. A. (2011). Quantum confinement effects on the band structure and dielectric properties of nanostructured GaAs. *Physica Scripta*, 84(1), 015704.
- [99] Hafaiedh, A., & Bouarissa, N. (2011). Quantum confinement effects on energy gaps and electron and hole effective masses of quantum well AlN. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 43(9), 1638-1641.
- [100] Adachi, S. (2005). *Physical Properties of III-V Semiconducting Compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP*, Wiley-Interscience, New York, 1992; *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, John Wiley & Sons, Ltd.
- [101] Rode, D. L. (1975). Low-field electron transport. In *Semiconductors and semimetals* (Vol. 10, pp. 1-89). Elsevier.
- [102] Nakwaski, W. (1995). Effective masses of electrons and heavy holes in GaAs, InAs, AlAs and their ternary compounds. *Physica B: Condensed Matter*, 210(1), 1-25.
- [103] Gueddime, A., Zerroug, S., & Bouarissa, N. (2013). Optical characteristics of ZnTe<sub>1-x</sub>O<sub>x</sub> alloys from first-principles calculations. *Journal of luminescence*, 135, 243-247.
- [104] Ferahtia, S., Saib, S., Bouarissa, N., & Benyettou, S. (2014). Structural parameters, elastic properties and piezoelectric constants of wurtzite ZnS and ZnSe underpressure. *Superlattices and Microstructures*, 67, 88-96.

- [105] Benmakhlouf, F., Bechiri, A., & Bouarissa, N. (2003). Zinc-blende ZnS under pressure: predicted electronic properties. *Solid-State Electronics*, 47(8), 1335-1338.
- [106] Enderlein, R., & Horing, N. J. (1997). *Fundamentals of semiconductor physics and devices*. World Scientific.
- [107] Klude, M., Alexe, G., Kruse, C., Passow, T., Heinke, H., & Hommel, D. (2002). 500–560 nm Laser Emission from Quaternary CdZnSSe Quantum Wells. *physica status solidi (b)*, 229(2), 935-942.

Liste des figures

**Chapitre 1: Généralités sur les Semiconducteurs**

**Figure 1-1:** Matériaux semiconducteurs(a) silicium, (b) GaAs tranche..... 3

**Figure 1-2:** Représentation schématique de la substitution d'un atome de phosphore à un atome de silicium (exemple du dopage N) ..... 5

**Figure 1-3:** Représentation schématique de la substitution d'un atome de Bore à un atome de silicium (exemple du dopage P).....5

**Figure 1-4:** Modèle proposant une structure des semiconducteurs intrinsèques et semiconducteurs extrinsèques avec dopage type n et p, à  $T > 0K$ .....6

**Figure 1-5:** Le tableau périodique des éléments.....7

**Figure 1-6:** Structure cubique de zinc blende (sphalérite) ZnTe.....8

**Figure 1-7:** Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées.....8

**Figure 1-8:** Structures (a) wurtzite et (ZnO). (b) Structure du Rock-Salt semiconducteur IV-VI (PbSe) .....9

**Figure 1-9:** Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.....9

**Figure 1-10:** Diagrammes d'énergie pour trois types de matériaux..... 11

**Figure 1-11:** Structure de bandes d'énergie: (a) gap indirect (b) gap direct.....12

**Figure 1-12:** L'onde électromagnétique.....12

**Figure 1-13:** L'Algorithme du calcul de l'EPM.....15

**Figure 1-14:** Cellule photoconductrice.....18

**Chapitre 2: Nanomatériaux et effet du confinement quantique**

**Figure 2-1:** Des nanotechnologies aux nanomatériaux et aux nanodispositifs .....19

**Figure 2-2:** Proportion d'atomes en surface en fonction de la taille d'une particule.....20

**Figure 2-3:** Classification des nanomatériaux selon R.W. Siegel .....21

**Figure 2-4:** Exemples de nano-objets: nano TiO<sub>2</sub>, nano CeO<sub>2</sub>, nano SiO<sub>2</sub>, nanotube de carbone .....22

**Figure 2-5:** Schéma des nanoparticules de CdSe et ZnS.....23

**Figure 2-6:** Evolution de la structure électronique d'un atome jusqu'au solide massif en passant par un nanocristal .....23

**Figure 2-7:** Marché mondial des nanotechnologies entre 2010 et 2020.....24

**Figure 2-8:** Divers types de confinements.....27

**Figure 2-9:** Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des nanocristaux.....30

<b>Figure 2-10:</b> Illustration représentant les approches pour atteindre des nanostructures .....	31
<b>Chapitre 3: Résultats et discussion</b>	
<b>Figure 3-1:</b> Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du GaAs en fonction du rayon du point quantique.....	40
<b>Figure 3-2:</b> Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du InAs en fonction du rayon du point quantique.....	41
<b>Figure 3-3:</b> Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) du InP en fonction du rayon du point quantique.....	41
<b>Figure 3-4:</b> Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^X$ ) du AlAs en fonction du rayon du point quantique.....	42
<b>Figure 3-5:</b> Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^X$ ) du AlSb en fonction du rayon du point quantique.....	43
<b>Figure 3-6:</b> Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^X$ ) du GaP en fonction du rayon du point quantique.....	43
<b>Figure 3-7:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du GaAs en fonction du rayon a...	45
<b>Figure 3-8:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du InAs en fonction du rayon a...	45
<b>Figure 3-9:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du InP en fonction du rayon a.....	46
<b>Figure 3-10:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du AlAs en fonction du rayon a..	46
<b>Figure 3-11:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du AlSb en fonction du rayon a..	47
<b>Figure 3-12:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du GaP en fonction du rayon a...	47
<b>Figure 3-13:</b> Gap fondamental en fonction de paramètre du réseau (a=3nm) .....	49
<b>Figure 3-14:</b> Gap fondamental en fonction de paramètre du réseau (a=100 nm) .....	50
<b>Figure 3-15:</b> Changement d'Indice de réfraction de l'GaAs en fonction du rayon a.....	52
<b>Figure 3-16:</b> Changement d'Indice de réfraction de l'InAs en fonction du rayon a.....	52
<b>Figure 3-17:</b> Changement d'Indice de réfraction de l'InP en fonction du rayon a.....	53
<b>Figure 3-18:</b> Changement d'Indice de réfraction de l'AlSb en fonction du rayon .....	53
<b>Figure 3-19:</b> Changement d'Indice de réfraction de l'AlAs en fonction du rayon a.....	54
<b>Figure 3-20:</b> Changement d'Indice de réfraction de l'GaP en fonction du rayon a.....	54
<b>Figure 3-21:</b> L'indice de réfraction par rapport de paramètre du réseau (a=3nm) .....	57
<b>Figure 3-22:</b> L'indice de réfraction par rapport au paramètre du réseau (a=100 nm) .....	57
<b>Figure 3-23:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ de l' GaAs par rapport au rayon a.....	59
<b>Figure 3-24:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ de l' InAs par rapport au rayon a.....	59
<b>Figure 3-25:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ de l' InP par rapport au rayon a.....	60
<b>Figure 3-26:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ de l' AlAs par rapport au rayon a.....	60
<b>Figure 3-27:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ de l' AlSb par rapport au rayon a.....	61
<b>Figure 3-28:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ de l' GaP par rapport au rayon a.....	61
<b>Figure 3-29:</b> La constante $\epsilon_{\infty}$ par rapport de paramètre du réseau (a=3 nm).....	63
<b>Figure 3-30:</b> La constante $\epsilon_{\infty}$ par rapport de paramètre du réseau (a=100 nm).....	63
<b>Figure 3-31:</b> Structure de bande du GaSb massif et nanostructuré.....	65
<b>Figure 3-32:</b> Gap direct $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ du GaSb en fonction du rayon a.....	66

<b>Figure 3-33:</b> Gap direct $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ et gaps indirects $E_{\Gamma}^L$ et $E_{\Gamma}^X$ du GaSb en fonction du rayon a.....	67
<b>Figure 3-34:</b> La masse effective des électron du GaSb en fonctoin du rayon a.....	68
<b>Figure 3-35:</b> La masse effective des trou GaSb en fonction du rayon a.....	69
<b>Figure 3-36:</b> Variation d'indice de réfraction du GaSb en fonction du rayon a.....	70
<b>Figure 3-37:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ dans le GaSb en fonction du rayon a.....	71
<b>Figure 3-38:</b> Bande indirecte ( $E_{\Gamma}^X$ ) dans du MgSe en fonction du rayon a .....	73
<b>Figure 3-39:</b> Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) dans du CdTe en fonction du rayon a.....	73
<b>Figure 3-40:</b> Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) dans du ZnSe en fonction du rayon a.....	74
<b>Figure 3-41:</b> Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) dans du ZnS en fonction du rayon a .....	74
<b>Figure 3-42:</b> Bande directe ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) dans du ZnTe en fonction du rayon a.....	75
<b>Figure3-43:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du MgSe en fonction du rayon a.	76
<b>Figure 3-44:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du CdTe en fonction du rayon a.	76
<b>Figure 3-45:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du ZnS en fonction du rayon a....	77
<b>Figure 3-46:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du ZnSe en fonction du rayon a..	77
<b>Figure 3-47:</b> Gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ) et ( $E_{\Gamma}^L$ ) du ZnTe en foction du rayon a...	78
<b>Figure 3-48:</b> Changements de gap fondamental par rapport au paramètre de réseau (a=3nm) .....	79
<b>Figure 3-49:</b> Changements degap fondamental par rapport au paramètre de réseau (a=100nm) .....	80
<b>Figure 3-50:</b> Changements de l'indice de réfraction du MgSe en fonction du rayon a.....	81
<b>Figure 3-51:</b> Changements de l'indice de réfraction du CdTe en fonction du rayon a.....	82
<b>Figure 3-52:</b> Changements de l'indice de réfraction du ZnS en fonction du rayon a .....	82
<b>Figure 3-53:</b> Changements de l'indice de réfraction du ZnSe en fonction du rayon a.....	83
<b>Figure 3-54:</b> Changements de l'indice de réfraction du ZnTe en foction du rayon a.....	83
<b>Figure 3-55:</b> La variation l'indice de réfraction par rapport au paramètre de réseau pour a=3nm.....	86
<b>Figure 3-56:</b> La variation l'indice de réfraction par rapport au paramètre de réseau pour (a=100 nm) .....	86
<b>Figure 3-57:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ du MgSe par rapport au rayon a.....	87
<b>Figure 3-58:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ du CdTe par rapport au rayon a.....	88
<b>Figure 3-59:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ du ZnS par rapport au rayon a.....	88
<b>Figure 3-60:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ du ZnSe par rapport au rayon a.....	89
<b>Figure 3-61:</b> Constante $\epsilon_{\infty}$ du ZnTe par rapport au rayon a.....	89
<b>Figure3-62:</b> La constante diélectrique $\epsilon_{\infty}$ en fonction de paramètre de maille (a=3nm) ...	90

**Figure 3-63:** La constante diélectrique  $\epsilon_{\infty}$  fonction de paramètre de maille ( $a=100\text{nm}$ )....91

**Liste des tableaux**

**Chapitre 1: Généralités sur les Semiconducteurs**

**Tableau 1-1:** Paramètres de réseau et la structure cristalline des semiconducteurs III-V.....10

**Tableau 1-2:** Le paramètre de réseau et la structure cristalline des semiconducteurs II-VI...10

**Tableau 1-3:** Les valeurs expérimentales et théoriques des constantes diélectriques statique et de haute fréquence de quelques matériaux semiconducteurs II-VI..... 13

**Tableau 1-4:** Les valeurs expérimentales et théoriques des constantes diélectriques statique et de haute fréquence de quelques matériaux semiconducteurs III-V. ....14

**Chapitre 3: Résultats et discussion**

**Tableau 3-1:** Les paramètres de pseudopotential utilisés pour les composés GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP en massif.....36

**Tableau 3-2:** Les paramètres de pseudopotential des composés MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe en massif.....36

**Tableau 3-3:** Les paramètres du réseau des composés semiconducteurs III-V.....37

**Tableau 3-4:** Les paramètres du réseau des composés semiconducteurs II-VI.....37

**Tableau 3-5:** Les gaps d'énergie calculés en massif pour les composés semiconducteurs GaAs, InAs, InP GaSb, AlAs, AlSb et GaP comparés à des valeurs expérimentales et théoriques.....37

**Tableau 3-6:** Les gaps d'énergie calculés en massif des composés semiconducteurs CdTe, MgSe, ZnS, ZnSe, ZnTe comparés à des valeurs expérimentales et théoriques.....38

**Tableau 3-7:** Masses effectives  $m_e^*$  et  $m_h^*$  pour les matériaux de type III-V.....39

**Tableau 3-8:** Masses effectives  $m_e^*$  et  $m_h^*$  pour les matériaux de type II-IV.....39

**Tableau 3-9:** Transitions des gaps énergétiques des composés semiconducteurs III-V.....48

**Tableau 3-10:** Gaps d'énergie des composés III-V obtenues par la méthode de la masse effective, comparées à des données théoriques.....48

**Tableau 3-11:** L'indice de réfraction des semiconducteurs nanostructurés pour un rayon de point quantique  $a=100\text{ nm}$ , comparés à des valeurs théoriques .....55

**Tableau 3-12:** Validation du modèle empirique et calcul d'erreur relative de l'indice de réfraction  $n$  des composés binaires semiconducteurs nanostructurés III-V.....56

**Tableau 3-13:** Transitions de gap des composés semiconducteurs binaires II-V.....78

**Tableau 3-14:** Les gaps énergétiques des semiconducteurs MgSe, CdTe, ZnS et ZnSe comparés à des données théoriques et expérimentales.....79

<b>Tableau 3-15:</b> Comparaison des indices de réfraction calculés des semiconducteurs nanostructurés pour un rayon de point quantique $a=100$ nm avec les données théoriques.....	84
<b>Tableau 3-16:</b> Évaluation de la précision des composés binaires semiconducteurs nanostructurés II-VI.....	85

**Abstract**

This study focuses on the effects of quantum confinement on the physical properties of spherical II-VI and III-V semiconductor quantum dots in the zinc-blende phase (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP, MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, and ZnTe), using the empirical pseudopotential method. Variations as a function of size have been analyzed and discussed for all physical characteristics such as energy levels, direct and indirect energy gaps, refractive index, and high-frequency dielectric constant. The results show that due to the effect of quantum confinement, the fundamental energy gap is significantly increased compared to its bulk value, while the obtained refractive index and high-frequency dielectric constant are significantly reduced.

**المخلص**

تركز هذه الدراسة على تأثير الحجز الكمي على الخصائص الفيزيائية لنقاط الكروية الشبه موصلة II-VI و III-V في مرحلة خليط الزنك مثل ، (GaAs ، InAs ، InP ، GaSb ، AlAs ، AlSb ، GaP ، MgSe ، CdTe ، ZnS ، ZnSe و ZnTe) باستخدام طريقة الاحتمالية الزائفة التجريبية. تم تحليل ومناقشة التغيرات في الخصائص الفيزيائية مع التغير في الحجم، مثل مستويات الطاقة وفجوات الطاقة المباشرة وغير المباشرة ومعامل الانكسار وثابت العزل عالي التردد. تشير النتائج إلى أنه نتيجة لتأثير الحجز الكمي، تتزايد الفجوة الأساسية للطاقة بشكل كبير مقارنة بقيمتها في الكتلة، بينما ينخفض معامل الانكسار وثابت العزل عالي التردد المحصل عليه بشكل كبير.

**Résumé**

Cette étude se concentre sur les effets du confinement quantique sur les propriétés physiques des points quantiques sphériques semiconducteurs II-VI et III-V dans la phase zinc-blende tels que (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP et MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe), en utilisant la méthode empirique du pseudo-potentiel. Les variations en fonction de la taille ont été analysées et discutées pour toutes les caractéristiques physiques telles que les niveaux d'énergie, les gaps d'énergie directs et indirects, l'indice de réfraction et la constante diélectrique haute fréquence. Les résultats montrent qu'en raison de l'effet du confinement quantique, le gap d'énergie fondamental est considérablement augmenté par rapport à sa valeur en massif, tandis que l'indice de réfraction obtenu et la constante diélectrique haute fréquence sont significativement réduits.