

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre:/2017



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : Sciences des Matériaux

**Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique**

Par: Maouche Assia

Intitulé

**Les propriétés physiques des plasmons dans
les semi-conducteurs**

Soutenu le: 07/06/2017 devant le jury composé de :

N.Bouarissa

Prof Université de M'sila

Président

M. Boucenna

prof Université de M'sila

Rapporteur

F. Mezrague

MCA Université de M'sila

Examineur

Année universitaire : 2016/2017

Remerciements

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

{فَابْتَغُوا عِنْدَ اللّٰهِ الرِّزْقَ وَاعْبُدُوهُ وَاشْكُرُوا لَهٗ وَ اِلَيْهِ تُرْجَعُونَ}

{وَ اِذْ تَاَذِّنْ رَبُّكُمْ لَنْ اَسْكَرْتُمْ لَّا زَيْدُنَّكُمْ}

Je remercie Dieu Tout-Puissant qui m'a donné le courage et volonté de mener à terme ce présent travail et la chance de réussite dans toutes les étapes de mon chemin.

Je remercie mon encadrant M.Boucenna Qu'il mon encadré pendant toute ma période de stage.

A mon membre de jury : N.Bouarissa, et F. Mezrag.





Dédicace

*A cœur vaillant rien d'impossible
A conscience tranquille tout est accessible
Quand il y a la soif d'apprendre
Tout vient à point à qui sait attendre
Quand il y a le souci de réaliser un dessein
Tout devient facile pour arriver à nos fins*

Je dédie ce mémoire à :

*A mon Père Cher Kamel
Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour,
L'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour vous. Ce
travail est le fruit de tes sacrifices que tu as consentis pour mon éducation et
mon succès.*

*A ma chère mère
Tu représentes pour moi le symbole de la bonté par excellence, la source de
tendresse.
Ta prière et ta bénédiction m'ont été d'un grand secours
Pour mener à bien mes études.*

A mon mari Lahcene et sa chère famille Ali Zeghlache.

A ma très chère sœur Aya

*A ma très chère sœur Adila, et son mari Walid
Et leur petit enfant Abd el Kader.*

A mon grand frère Sofienne, et son épouse, et leurs fils Abd el Djalil.

A mes frères Abd El Moneam ; Aala Eddine ; Hamlaoui.



Tables des matières

TABLE DE MATIERES

Table de matière	i
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	ix
Introduction générale	1

Chapitre I

Rappel Théorique sur les propriétés physiques des semi-conducteurs

I-1 Introduction.....	3
I-2 Définition des semi-conducteurs.....	3
I-3 Éléments simples des semi-conducteurs.....	4
I-4 Composé III-V et II-VI (Semi-conducteurs binaires).....	5
I-6 Différents types de semi-conducteurs	5
I-6-1 semi conducteur intrinsèque	5
I-6-2 semi conducteur extrinsèque	6
I-7 Propriétés structurales.....	7
I-7-1 Structure cristalline	7
I-7-1-a Structure Zinc Blend.....	7
I-7-1-b Structure Wurtzite (hexagonale).....	8

I-7-2 le paramètre cristalline	9
I-7-3 La zone de Brillouin	10
I-7-3-1 La première zone de Brillouin	10
I-7-4-1 Les points de haute symétrie.....	11
I-7-4-2 Les lignes de haute symétrie	12
I-7-5 Le réseau réciproque.....	13
I-8 Propriétés électroniques.....	13
I-8-1 Bandes d'énergie	13
I-8- 2 gap énergétique	13
I-8-2-2 gap direct et indirect.....	13
I-8-3 La masse effective.....	15
I-8-3-1 Notion de masse effective.....	15
I-8-3-2 Cas des électrons	15

Chapitre II :

Méthodes de calculs de la structure de bande des semi-conducteurs

II-1 Méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des semi-conducteurs	17
II-1 L' hamiltonien total du cristal.....	17
II-2 L'approximation adiabatique.....	18
II-3 L'approximation de Hartree et Hartree-Fock.....	19

II-4 La méthode des liaisons fortes (T.B.M)	20
II-5 La méthode des ondes planes.....	21
II-6 La méthode A.P.W	21
II-7 La méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W).....	21
II-4 La méthode des pseudo-potentiels.....	22
II-4-1 La théorie de pseudo-potential.....	22
II-4-1 La méthode pseudopotential	22
II -4-2 La méthode empirique locale du pseudopotential (EPM).....	23

Chaoitre III :

Les Plasmons

III-1 Définition du plasma	26
III-2 Types du plasma.....	26
III-3Fréquence plasma.....	24
III-5 Plasmons	27
. III-5-1 Définition du Plasmon.....	27
III-5-2 Energie du plasmon	28
III-4 propriétés diélectrique	29
III -4-1 Constants diélectriques	29
III-4-2 Quelques milieux diélectriques solides usuels.....	30

III-4-3 Création d'une polarisation	31
III-4-4 Susceptibilité électrique.....	32
III-4-5 Interprétation physique.....	32
III-4-6 Définition de la fonction diélectrique.....	32
III-4-7 Interaction onde radiofréquence-semi-conducteur	33
III-4-7-1 Equation de Maxwell.....	33
III-5 Fréquence plasma	33
III-6 Fonction diélectrique dans les plasmas	34

Chapitre VI :

Résultats et discussions

IV-1. Introduction	37
IV-2 propriétés électroniques	38
VI-3 La masse effective.....	43
VI-4 Propriétés de plasmon	45
IV-4-1 Fréquence de plasmon	45
IV-4-2 Propriétés diélectriques	51
Conclusion générale.....	59

Bibliographie

LISTE DES TABLEAUX

Tableau I-1. Extrait de la classification périodique des éléments.....	5
Tableau I-2 : représente les lignes de haute symétrie	12
Tableau III-1 : Energie des Plasmons de volume (en ev).....	29
Tableau IV-1 : Les facteurs de forme symétriques et anti symétriques et les paramètres du réseau des semi-conducteurs étudiés dans la phase zinc-blende.....	38
Tableau IV-2 : Les valeurs des gaps d'énergies des éléments semi-conducteurs.....	43
Tableau IV-3 : Les masses effectives des semi-conducteurs.....	45
Tableau IV-4 : les fréquences et longueur d'onde du plasma en fonction de la Concentration des électrons.....	46
Tableau IV-6 : Energie de plasmon des semi-conducteurs dans les différentes concentrations.....	48

LISTE DES FIGURES

Figure I-1 : Représentation des bandes d'énergie.....	4
Figure I-2 : Dopages N (avec l'électron en trop) et P (avec le déficit d'électron).....	6
Figure I-3 : la structure de zinc blende.....	8
Figure I-4 : structure Wurtzite(w).....	9
Figure I-5 : la constante de réseau.....	9
Figure I-6 : la zone de Brillouin.....	10
Figure I-7 : la première zone de Brillouin.....	10
Figure I-8 : la première zone de Brillouin de la structure zinc blende.....	13
Figure I.9: Représentation des bandes de conduction et de valence et la définition du gap du matériau.....	14
Figure I-10 : a) gap énergétique Direct	15
Figure I-10 : b) Indirect.....	15
Figure II-1 Organigramme de la méthode E.P.M.....	25
Figure III-1 : Création d'un plasmon dans un film métallique par diffusion inélastique D'un électron incident.....	28
Figure III- 2 : Illustration de la polarisation d'un diélectrique	31
Figure III-3 : fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ d'un gaz d'électron libres en fonction de La fonction de fréquence exprimée par rapport à la fréquence de plasma ω_p	36
IV-1 : Structure de bande électronique de Ge.....	39
Figure IV-2 : la structure de bande électronique de AlSb.....	40

Figure IV-3 : Structure de bande électronique de ZnSe.....	41
Figure IV-4 : le fit quadratique entre l'énergie d'électron et le vecteur d'onde.....	44
Figure IV-5 : Etude de fréquence de plasma des semi-conducteurs en fonction Energie de gap à concentration 10^{20} e/cm ³	49
Figure IV-6 : Etude de fréquence de plasma des semi-conducteurs en fonction Energie de gap A concentration 10^{18} e/cm ³	49
Figure IV-7: Etude de fréquence de plasma des semi-conducteurs en fonction Energie de gap à concentration 10^{14} e/cm ³	50
Figure IV-8 : Etude de fréquence de plasma des semi-conducteurs en fonction Energie de gap à concentration 10^{10} e/cm ³	50
Figure IV-9 : La variation de la fonction diélectrique de Ge en fonction de ω pour fortes concentrations.....	52
Figure IV-10 : La variation de la fonction diélectrique de Ge en fonction de ω pour faibles concentrations.....	53
Figure IV-6 : La variation de la fonction diélectrique de AlSb en fonction de ω pour fortes concentrations.....	54
Figure IV-7 : La variation de la fonction diélectrique de AlSb en fonction de ω pour faibles concentrations.....	55
Figure IV-8: La variation de la fonction diélectrique de ZnSe en fonction de ω pour fortes concentrations.....	56
Figure IV-9: La variation de la fonction diélectrique de ZnSe en fonction de ω pour faibles concentrations.....	57



Introduction Générale

Introduction Générale :

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19^{ème} siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Parmi les plus célèbres, nous trouvons le silicium Si et le germanium Ge de la colonne IV du tableau périodique

Pour avoir plus de liberté dans les propriétés, l'emploi des alliages semi-conducteurs s'avère une solution miracle. En mélangeant les éléments entre eux, on peut fabriquer tout type d'alliages, des binaires, des ternaires, des quaternaires, des pentaires et même des quasi binaires, tout dépend des propriétés que l'on veut obtenir. [1]

Les composants fabriqués à partir de ces semi-conducteurs, surtout les composées binaires come GaAs qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications dans le domaine de l'optoélectronique et microélectronique. [2]

Les alliages des composés III-V et II-VI, ont attiré beaucoup d'attention à cause de leurs immenses applications technologiques.et considérés comme des classes importantes des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leurs paramètres du réseau, le gap énergétique, l'indice de réfraction, constantes optiques st d'autres paramètres physiques qui peuvent être ajustés et contrôlés pour l'obtention d'un composant optoélectroniques bien désirés. [3]

Un des en jeux technologiques et économiques du début de xxi^e siècle réside dans la transition de la microélectronique et de ces nombreuses applications vers les nanotechnologies. Un des buts des nanotechnologies est de tenter d'apporter des solutions alternatives aux différents problèmes rencontrés. En proposant notamment de nouvelles techniques de stockage de manipulation et de transmission de l'information. Une suggestion récurrente concerne le développement d'un ordinateur tout optique. Capable de manipuler les photons comme on sait déjà le faire avec les électrons dans les solides. [4]

Leur développent impose donc le contrôle des processus optiques par une nouvelle génération de composante optiques de tailles nettement inférieures à celles des composants.

L'optique traditionnelle se révèle en effet inadaptée pour créer des fonctionnalités dans des volumes sur longueur d'onde en raison de la nature ondulatoire de la lumière. Cette constitue un des verrous majeurs de la miniaturisation.

Dans ce contexte, les plasmons suscitent un intérêt croissant depuis une dizaine d'années, car ils permettent justement la concentration et le contrôle de la lumière dans des volumes très faibles. [5]

L'expérimentation avait toujours un pas en avant par rapport à la simulation, mais ces derniers temps, avec la poussé géante de l'outil informatique Les progrès réalisés dans les méthodes de calculs de la structure de bandes, ainsi que le développement des appareils de mesure ont permet la compréhension de différents propriétés physiques des alliages semi-conducteurs. [6]

Parmi plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées la méthode de pseudo-potentiel empirique (E.P.M) pour calculer la structure de bande rapidement est simplement, ainsi donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience.

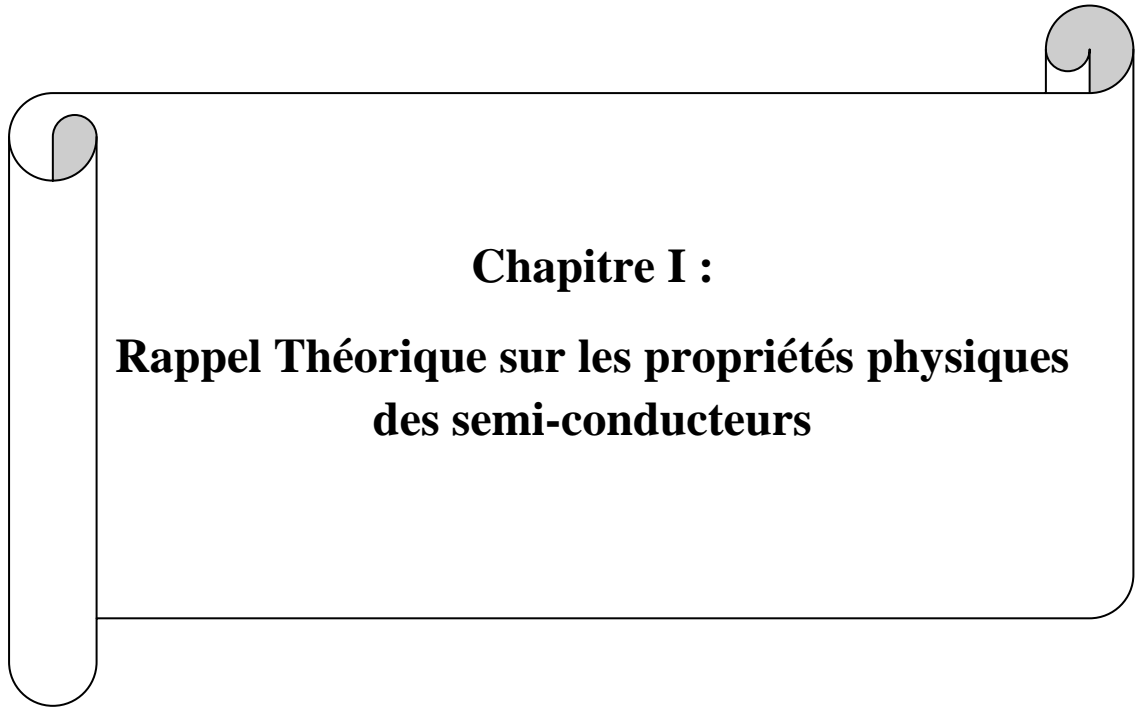
Notre travaille est basé sur l'étude des propriétés physiques des semi-conducteurs dans les plasmons (propriétés optique, électroniques et structurales), l'objectif de cette étude est le calcul des valeurs des longueurs d'ondes de plasma λ_p et leurs fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$ avec la fréquence ω_p et l'énergie E_p pour obtenir des résultats pour des relations entre les semi-conducteurs et les plasmons.

Ce manuscrit est organisé autour de 4 chapitres, Après une introduction générale, la contribution commence par le chapitre 1 qui présente un rappel théorique sur la physique des semi-conducteurs.

Le chapitre 2 traite les différentes méthodes de calcul de la structure de bande ou la méthode pseudo potentiel empirique (E.P.M) à été largement détaillée.

Le chapitre 3 représente les plasmons, et nous représentons dans le dernier chapitre les résultats obtenus dans cette étude et leurs discussions.

Enfin, notre travaille à été achevé par une conclusion générale.



Chapitre I :
Rappel Théorique sur les propriétés physiques
des semi-conducteurs

I-1 Introduction

L'importante croissance des semi-conducteurs au niveau mondial est liée au fait que ces matériaux forment la base de la révolution technologique de ces quarante dernières années dans le domaine de l'électronique.

Les semi-conducteurs désignent les matériaux capables de relayer du courant électrique en ayant des propriétés physiques à mi-chemin entre le métal et l'isolant. Ce sont des éléments essentiels de l'électronique et de l'informatique modernes puisqu'ils permettent de contrôler à la fois la direction du courant et son intensité .La résistivité ρ des semi-conducteurs varie de 10^{-3} à 10^{+9} $\Omega.cm$. les électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique. Un semi-conducteur peut être soit intrinsèque (pur) ou extrinsèque (dopé) par des impuretés.

Les propriétés des matériaux sont souvent les limites de performances des systèmes conçus. La connaissance de ces propriétés s'avère primordiale mais il faut nécessairement savoir que ces propriétés macroscopiques sont très liées aux structures élémentaires de ces matériaux, c.à.d. descendre jusqu'à l'échelle atomique. [7]

I-2 Définition des semi-conducteurs :

Les semi-conducteurs sont des Corps cristallins dont les propriétés de conductibilité électrique sont intermédiaires entre celle des métaux et celle des isolants.

Cependant ce type de matériau ayant une énergie de gap plus faible que l'isolant et aura par l'agitation thermique ($T=300K$), des électrons puissent passer de la bande de valence à la bande de conduction. La conductivité croit donc avec la température et elle est sensible aux impuretés ou aux différents types de défauts. [8]

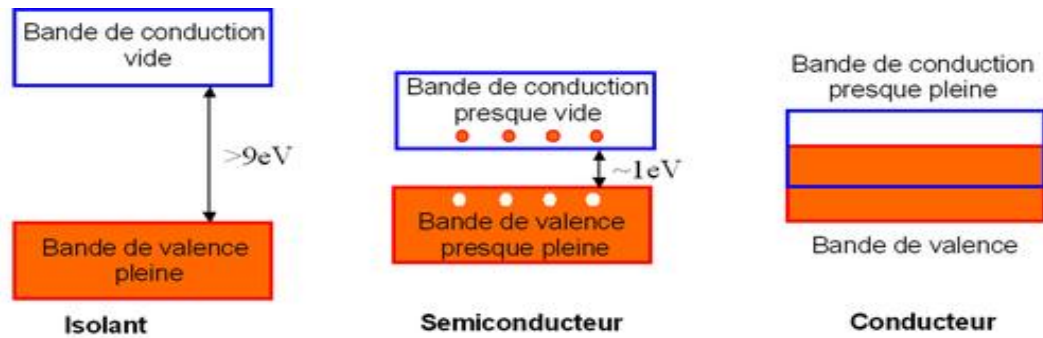


Figure I-1 : Représentation des bandes d'énergie

I-3 Éléments simples des semi-conducteurs :

Les semi-conducteurs simples sont les éléments de la colonne IV du tableau périodique, on particulier le Silicium et le Germanium font l'exemple.

Le caractère conducteur ou isolant prend sa source dans la structure même des atomes : chaque élément du tableau périodique comme le Silicium (Si) et le Germanium (Ge) possède un certain nombre d'électrons qui sont agencés autour d'un noyau. C'est cet agencement sous la forme de couches d'électrons, différent selon les éléments, qui est responsable de la conductivité électrique.

Les électrons d'un atome peuvent avoir plusieurs rôles au sein d'une structure d'atomes :

- électrons de cœur : ceux-ci sont proches du noyau et n'interagissent pas vraiment avec les autres atomes.
- électrons de valence : ceux-ci sont sur les couches externes de l'atome et permettent de créer des liaisons interatomiques et de former les molécules.
- électrons de conduction : ceux-ci sont responsables de la circulation du courant électrique.

I-4 Composé III-V et II-VI (Semi-conducteurs binaires):

Ce sont des alliages qui vont associer des éléments des colonnes III et V ou II et VI avec une hybridation sp^3 .

Ils présentent généralement une haute mobilité électronique et une bande interdite directe, et sont utilisés dans de applications optoélectroniques (diodes lasers, cellules solaires, etc.) ainsi qu'en électronique(transistors...).

Après le Silicium, ce sont les deuxièmes matériaux semi-conducteurs les plus utilisés dans l'industrie.

Le tableau (I-1) regroupe un extrait de cette classification des colonnes III et IV et V du tableau périodique (les chiffres en haut représentent le nombre atomique et en bas la masse atomique). [9,10]

Tableau I-1. Extrait de la classification périodique des éléments.

III	IV	V
$_{10.81}^5B$	$_{12.01}^6C$	$_{14.01}^7N$
$_{26.98}^{13}Al$	$_{28.09}^{14}Si$	$_{30.97}^{15}P$
$_{26.98}^{13}Ga$	$_{72.59}^{32}Ge$	$_{74.92}^{33}As$
$_{114.82}^{49}In$	$_{118.69}^{50}Sn$	$_{121.51}^{51}Sb$

I-6 Différents types de semi-conducteurs :

I-6-1 semi conducteur intrinsèque :

Les semi-conducteurs **intrinsèques** ont cette propriété caractéristique : l'agitation thermique suffit à fournir l'énergie nécessaire au passage d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction. La conductivité intrinsèque qui en résulte augmente avec la température, contrairement à ce qui se passe pour un conducteur métallique. Un

rayonnement électromagnétique peut également provoquer le passage d'un électron dans la bande de conduction (photoconduction).

I-6-2 semi conducteur extrinsèque :

La semi-conduction extrinsèque est obtenue grâce à l'introduction d'impuretés (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semi conducteur), par dopage n (pour négatif) ou p (pour positif), ce qui augmente de beaucoup la conductivité des semi-conducteurs intrinsèques.

Les porteurs libres introduisent une bande d'énergie supplémentaire dans la bande interdite du semi-conducteur (à un niveau accepteur ou donneur selon le type de dopage p ou n).

Le dopage : c'est une technique qui vise à modifier l'énergie nécessaire pour rendre le semi-conducteur plus ou moins conducteur. Il consiste à injecter dans les cristaux de silicium des atomes bien choisis pour le rendre soit un peu plus conducteurs, soit un peu moins.

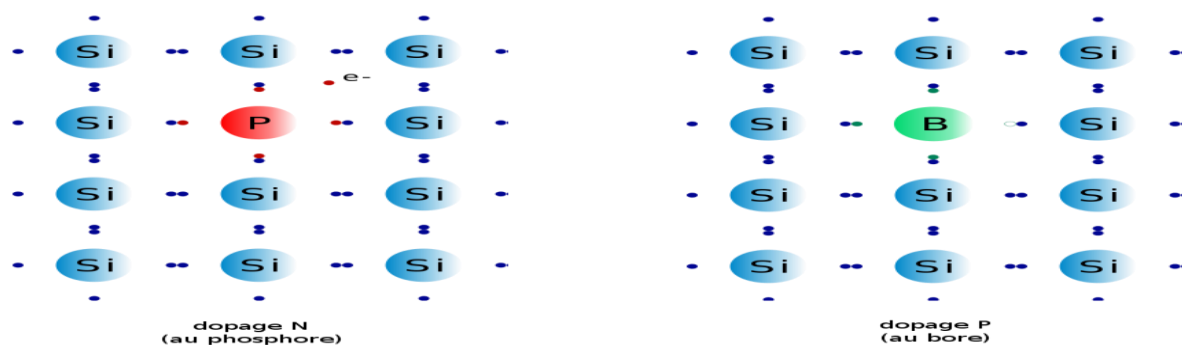


Figure I-2 : Dopages N (avec l'électron en trop) et P (avec le déficit d'électron)

-Type n : Pour augmenter le nombre d'électrons de la bande de conduction dans un silicium intrinsèque, on ajoute des atomes d'impureté pentavalents .Ce sont des atomes avec cinq électrons de valence, tels l'arsenic(As), le Phosphore(P), le bismuth (Bi) et l'antimoine (Sb).

Dans un semi-conducteur de type N, les électrons libres sont majoritaires alors que les trous sont minoritaires.

-Type p : le dopage de type p consiste à augmenter la densité en trous dans les semi-conducteur. Pour le faire, on inclut un certain nombre d'atomes pauvres on électrons dans le semi conducteur

afin de créer un excès des trous. Dans l'exemple de silicium, généralement un atome de bore. Cet atome n'ayant que trois électrons de valence, il ne peut créer que trois liaisons covalentes avec ses quatre voisins créant ainsi un trou dans la structure, trou qui pourra être rempli par un électron donné par un atome de silicium voisin, déplaçant ainsi le trou. Quand le dopage est suffisant, le nombre de trous dépasse de loin le nombre d'électrons. Les trous sont alors des porteurs majoritaires et les électrons des porteurs minoritaires. [11,12]

I-7 Propriétés structurales :

Les semi-conducteurs III-V et certains composés II-VI forment un cristal avec arrangement Zinc-blende, qui est une structure d'origine cubique. La maille élémentaire de cette structure est identique à celle du diamant avec la seule différence est que chaque atome d'un élément est entouré tétraédriquement par quatre atomes de l'espèce opposée. De ce fait, les alliages cristallisant dans la structure Zinc-blende sont des cristaux simples manquant d'un centre de symétrie. On note que cette structure présente un taux de compacité d'ordre 0.35 (taux de remplissage).

Elle est donc considérée comme étant une structure ouverte, d'où la possibilité d'insertion d'atomes légers [13].

Certains composés semi-conducteurs II-VI (comme ZnSe) cristallisent en deux Structures l'un cubique zinc blende, la plus stable et la plus utilisée, et l'autre hexagonale (wurtzite). Les alliages cristallisant dans la structure Zinc-blende sont des cristaux simples.

Un grand nombre de solides se cristallisent dans une structure périodique. L'immense majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si, Ge) ou optoélectroniques (composés III-V comme le GaAs ou GaP) sont basés sur la même structure cristallographique formant un cristal avec arrangement Zinc blende dite aussi sphalérite, comme le montre le figure ci-dessous. [14]

I-7-1 Structure cristalline:

I-7-1-a Structure Zinc Blende:

La plupart des matériaux semi-conducteurs binaire III-V et quelques matériaux II-VI ont une structure Zinc-Blende (ZB) (groupe d'espace no 216, $\bar{4} 3m$) (Figure I-3). Dans le cas de ZnS (semi conducteurs de la classe (II-VI) les quatre atomes de soufre S(en vert) occupent les sites de coordonnées $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ et $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$. Les atomes du zinc occupent les nœuds du réseau cfc (en rouge).

La première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre tronqué (Figure I -8).

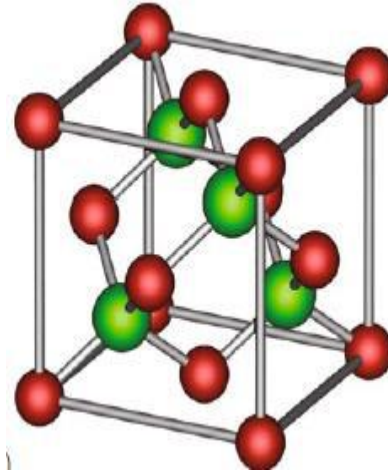


Figure I-3 : la structure de zinc blende

I-1-7-b Structure Wurtzite (hexagonale)

Quelques composés binaires semi-conducteurs II-VI tels que le ZnS se cristallisent Wurtzite (Figure I.3). La structure Wurtzite est hexagonale (groupe d'espace $P6_3mc$; n° 186), Dans cette structure, le motif est constitué de 2 atomes Zn (zinc) et 2 atomes S (soufre).

Les deux atomes de Zn occupent les deux positions $(0, 0,0)$ et $(1/3, 2/3, 1/2)$. [15]

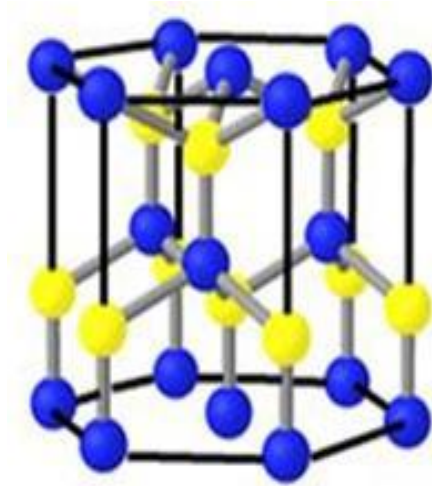


Figure I-4: structure Wurtzite(w)

I-7-2 le paramètre cristalline :

La constante de réseau joue un rôle important dans l'étude des structures cristallines des propriétés des matériaux et pour déterminer la structure d'un cristal, Permet de calculer le potentiel moyen du cristal ainsi la densité électronique.

C'est une grandeur utilisée pour d'écrire la maille d'un cristal, la maille cristalline est définie par trois paramètre a , b , c et par trois angle α , β , γ qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (I- 8) Suivant les valeurs relatives de ces six grandeurs on définit les différentes structures cristallines. [16]

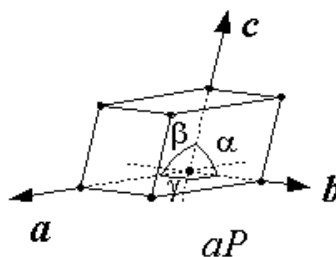


Figure I-5 : la constante de réseau.

I-7-3 La zone de Brillouin :

Les zones de Brillouin sont équivalents de la maille élémentaire dans le réseau réciproque, sont une caractéristique nécessaire pour décrire les structures cristallines et définit comme sous ensemble l'espace réciproque de volume minimale permettant de décrire entièrement les fonctions périodiques (par exemple l'énergie des électrons) dans cet espace. [17,18]

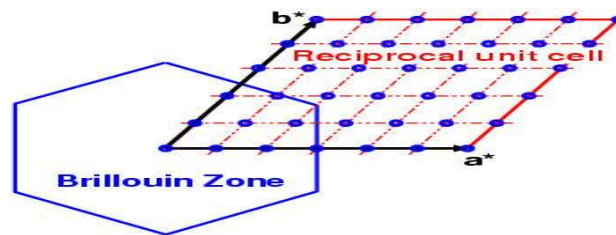


Figure I-6 : la zone de Brillouin

I-7-3-1 La première zone de Brillouin :

Le plus petit volume ainsi défini entourant l'origine est appelé première zone de Brillouin, entièrement compris entre les plans médiateurs des vecteurs du réseau réciproque à partir de l'origine.

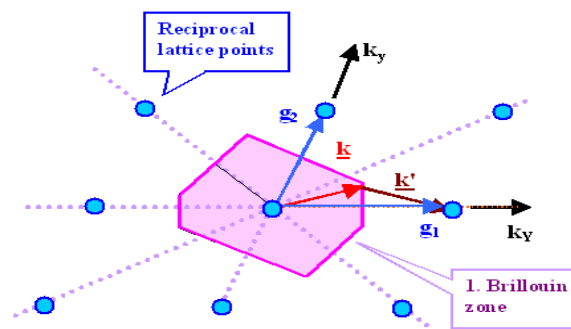


Figure I-7 : la première zone de Brillouin

I-7-4-1 Les points de haute symétrie :

Γ : Ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $K_{\Gamma}(0, 0, 0)$.

X : Ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'un des axes k_x, k_y ou k_z avec l'une des faces carrées. Nous avons donc :

$$k_x = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, 0, 0)$$

$$k_y = \frac{2\pi}{a}(0, \pm 1, 0)$$

$$k_z = \frac{2\pi}{a}(0, 0, \pm 1)$$

L : Ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont les coordonnées sont :

$$k_L = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1)$$

W : ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées les coordonnées sont :

$$k_w = \frac{2\pi}{a}\left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$$

Z : Ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre avec les coordonnées sont :

$$k_z = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{1}{2}, 1\right)$$

I-7-4-2 Les lignes de haute symétrie :

Tableau I-2 : représentation des lignes de haute symétrie

Les lignes de haute symétrie	Directions	Remarque
Δ	$\langle 100 \rangle$	lignierelie le centre Γ au point X
Σ		Point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$ Milieu de bord partagé par deux hexagones et un carré
A	$\langle 100 \rangle$	Ligne relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre

Plusieurs opérations de symétrie peuvent être effectuées sur la structure du diamant qui laisse la structure inchangée. Outre la traduction, de telles opérations peuvent être classées en rotation ou en inversion, ou en combinaison, et sont collectivement appelées opérations de symétrie.

La nouvelle structure en treillis formée présente des propriétés de symétrie différentes qui peuvent avoir des conséquences prononcées sur la structure de la bande. Les méthodes numériques pour calculer la structure de la bande permettent de prédire plusieurs propriétés électroniques et optiques importantes. (BZ: La zone de Brillouin). [19]

I-7-5 Le réseau réciproque :

Dans l'espace on définit le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire correspond à la première zone dite de Brillouin. Rappelons que la zone de Brillouin des réseaux cfc a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube [20], comme cela est illustré sur la figure (I-8). Elle présente un centre de symétrie à l'origine (Γ) et des axes de symétrie ($k=0$), et un certain nombre d'axes de symétries. Trois axes équivalents $\langle 100 \rangle$ coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X, et quatre axes équivalents $\langle 111 \rangle$ avec les points correspondants L d'où la possibilité d'insérer autres atomes légers. [21]

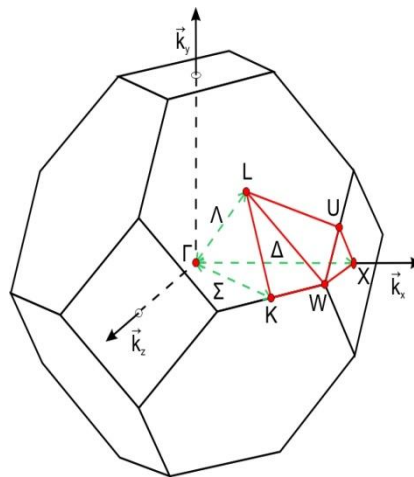


Figure I-8: la première zone de Brillouin de la structure zinc blende

I-8 Propriétés électroniques :

I-8-1 Bandes d'énergie :

En cristallographie, la description la plus significative des surfaces d'énergie offertes aux électrons s'effectue dans l'espace des vecteurs d'onde k . cette description est souvent simplifiée en considérant les variations de E en fonction de k selon les directions de plus haute symétrie de cet espace déjà décrite.

Les bandes d'énergies sont particulièrement importantes pour la compréhension des phénomènes de conduction. Il existe deux bandes :

La bande de conduction(BC) et bande de valence(BV). La bande de conduction représente les énergies des électrons libres, dans la bande de valence se situent les électrons liés avec le réseau cristallin.

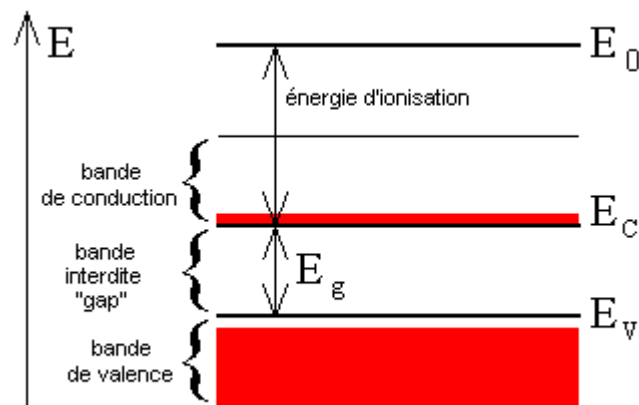


Figure I.9: Représentation des bandes de conduction et de valence et le gap énergétique du matériau

I-8- 2 gap énergétique :

Les bandes sont séparées par une zone énergétique interdite s'appelle « gap énergétique »: c'est la plage des énergies que les électrons ne peuvent pas posséder. Cette zone C'est un paramètre propre du matériau qui détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur.

Pour simplifier La description la plus significative des surfaces d'énergie offertes aux électrons s'effectue dans l'espace réciproque ou espace des vecteurs d'onde k . En considérant les variations de l'énergie E en fonction de k selon les directions de plus haute symétrie de cet espace. [22]

I-8-2-2 gap direct et indirect :

Le gap énergétique représente la différence entre le minimum absolu de la bande de conduction (niveau E_C) et le maximum absolu de la bande de valence (niveau E_V). Les structures de bandes des semi-conducteurs font apparaître deux types de gaps.

Dans le cas où le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés pour une même valeur de k ($k = 0$); les semi-conducteurs de ce type sont dits à gap direct, tandis que l'orsque ces extrémums sont situés en deux valeurs de k différentes, ce type de semi-conducteur est dit à gap indirect [23]. La nature du gap joue un rôle déterminant dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique [24]. Les matériaux à bande interdite indirects ne conviennent pas aux dispositifs optiques.

En effet, lors de la transition d'un électron de la BV vers la BC ou de la recombinaison électron-trou, il faut conserver l'énergie et l'impulsion.

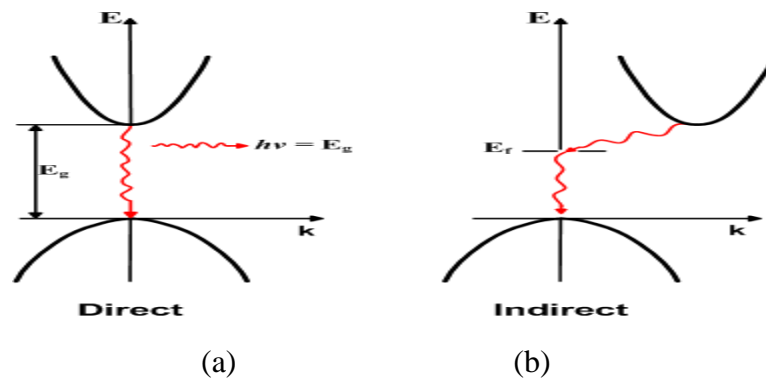


Figure I-10 :a) gap énergétique Direct et b) Indirect

I-8-3 La masse effective :

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

Un électron dans la bande de conduction est caractérisé par une fonction d'onde qui est une somme de Bloch d'orbitale anti liante. En termes corpusculaires, c'est une particule dans un potentiel cristallin.

On représente cette particule quasi-libre de charge $-e$ et de masse m_0 , par une quasi-particule libre de charge $-e$ et de masse m_e qu'on appelle masse effective de l'électron. [25]

I-8-3-1 Notion de masse effective :

Le déplacement des électrons et trous dans le semi-conducteur est différent de leur déplacement dans le vide en raison des interactions avec les différents atomes du réseau cristallin. Ces interactions sont différentes suivant les directions du déplacement à l'intérieur du cristal (périodicité des atomes différente par exemple) et par conséquent le comportement électrique sera différent. [26]

I-8-3-2 Cas des électrons :

Un électron dans un état k dans la bande de conduction est considéré comme une particule dans un potentiel cristallin. Cette particule quasi-libre de masse m_0 est représentée par une quasi-particule libre de masse m_e appelée masse effective de l'électron.

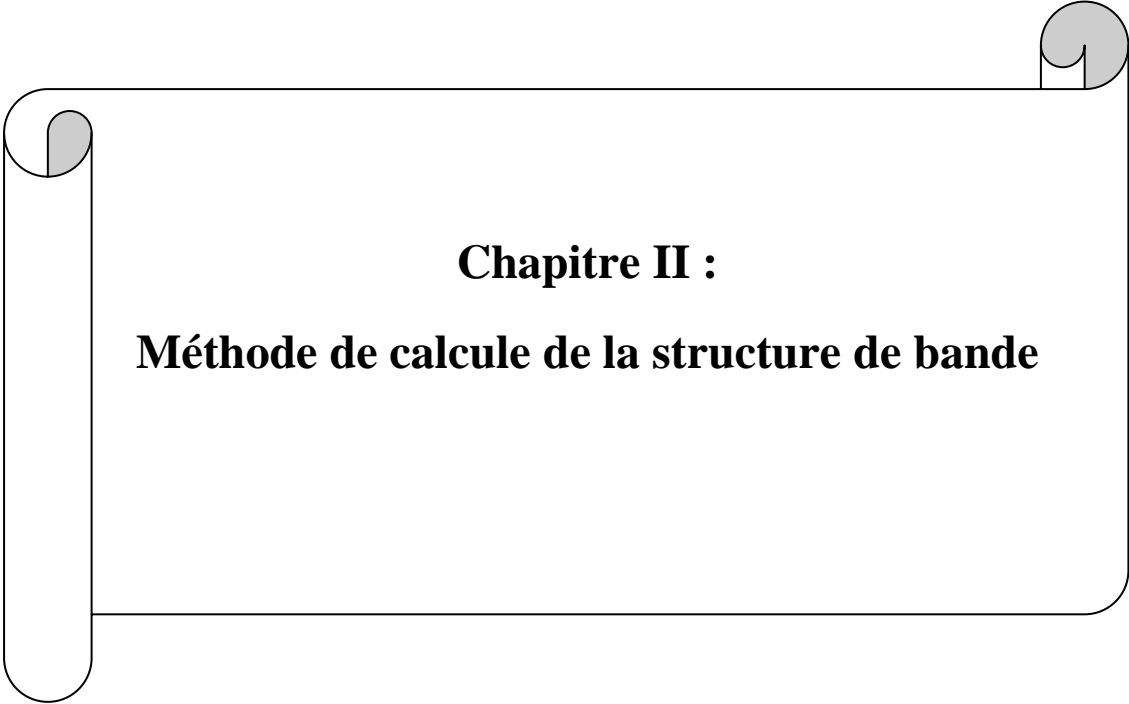
L'expression de la masse effective est donnée par (I-1) qui est reliée à la dérivée seconde de la courbe des bandes d'énergie $E(k)$ dans l'espace des k (I-2). Cette masse effective varie donc en fonction de la courbure des bandes d'énergie.[27]

$$m_e = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \varepsilon(k)}{\partial k^2}} \quad (\text{I-1})$$

Où :

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

Pour un matériau donné de permittivité ε , il est possible de définir la permittivité relative, normal.



Chapitre II :
Méthode de calcul de la structure de bande

II-Méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergie des semi-conducteurs :

Parallèlement au progrès effectué dans le domaine expérimental, les méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques basées sur le développement des concepts de base de nouveaux algorithmes, ont fait un impact crucial, afin de comprendre les propriétés et les caractéristiques des matériaux et fournir par la suite, des données complémentaires pour les expérimentateurs.[28]

La détermination des structures de bandes est indispensable pour connaître les propriétés des semi-conducteurs. Cependant elle demeure un problème crucial de la physique moderne

La solution générale de la relation de dispersion est difficile à résoudre, vu l'absence d'une expression analytique du potentiel cristallin. Pour cela plusieurs approximations ont été introduites lors du calcul des niveaux énergétiques des fonctions d'ondes.

II-1 L'hamiltonien total du cristal :

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

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (\text{II} - 1)$$

Où :

T_e : représente l'énergie cinétique des électrons

T_n : l'énergie cinétique des noyaux

V_{ee} : l'énergie d'attraction électron – électron

V_{en} : l'énergie d'attraction électron-noyau

V_{nn} : l'énergie d'attraction noyau-noyau

Les énergies propres et les fonctions d'ondes propres sont données par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (\text{II-2})$$

Avec :

\mathbf{R} : les coordonnées des noyaux

\mathbf{r} : les coordonnées des électrons

E : l'énergie totale du système

$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$: fonction d'onde de système

La résolution de l'équation (II-2) avec ce hamiltonien total du cristal ne se fait qu'avec certaines approximations. [29]

II-2 L'approximation adiabatique (Born Oppenheimer) :

L'approximation adiabatique dite de Born Oppenheimer est la première à être utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger pour les systèmes complexes et consiste dans la séparation des mouvements des électrons et des noyaux atomiques, du point de vue se basant la différence de leurs masses $M_n \gg m_e$.

L'Hamiltonien se décompose ainsi en une partie électronique et une partie nucléaire reliée aux noyaux considérés fixes par rapport aux électrons. On peut écrire l'Hamiltonien des électrons H_e comme :

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (\text{II-3})$$

$$H_e = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{I < J} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_{i,j} \frac{-Z_I e^2}{|R_I - r_i|} \quad (\text{II-4})$$

Dans ce qui suit on pose $H = H_e$ et l'équation Schrödinger devient :

$$H\Psi_e(r_i, R_I^\circ) = E\Psi_e(r_i, R_I^\circ) \quad (\text{II-5})$$

La solution recherchée de $\Psi(r, R)$ est aussi découpée et s'écrit sous la forme suivante :

$$\Psi(R, r) = \Psi_n(R) \Psi_e(R, r) \quad (\text{II-6})$$

Ceci ramène l'équation de Schrödinger à un système à deux équations indépendantes comme suit :

$$[T_e + V_{ee} + V_{en}]\Psi_e(R, r) = E_e(R)\Psi_e(R, r) \quad (\text{II-7})$$

$$[T_n + V_{nn} + E_e(R)]\Psi_n(R) = E\Psi_n(R) \quad (\text{II-8})$$

Cette nouvelle équation traduit l'évolution d'un système à N corps et reste encore difficile à résoudre, dont la solution rigoureuse ne peut être obtenue avec les outils mathématiques actuels on a ainsi recours à des approximations supplémentaires c'est l'approximation de Hartree-Fock. [30]

II-3 L'approximation de Hartree et Hartree-Fock :

L'approximation de Hartree consiste à chercher les fonctions propres de H sous la forme approchée :

$$\Psi_{\text{approchée}}(r_1, r_2, \dots) = \Psi_1(r_1) \cdot \Psi_2(r_2) \dots \dots \dots \Psi_n \quad (\text{II-9})$$

Cette approximation est basée sur l'hypothèse d'électrons libres ce qui revient à ne pas tenir compte des interactions entre les électrons et des états de spin. Ceci a deux conséquences importantes :

- La répulsion coulombienne totale v_{ee} du système électronique est surestimée.
- Le principe d'exclusion de Pauli n'est pas pris en compte.

Cette seconde conséquence étant plus grave que la première, l'approximation de « Hartree-Fock » a été introduite pour prendre en compte le spin des électrons pour la résolution de l'équation de Schrödinger.

Hartree-Fock consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment dans un champ moyen créé par les autres électrons et noyaux. Donc on ramène dans cette approximation le problème relatif à N corps ou à un seul électron.

L'hamiltonien peut être écrit comme des Hamiltoniens décrivant le comportement d'un seul électron.

$$H = \sum_i H_i \quad (\text{II-10})$$

Avec :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(r) \quad (\text{II-11})$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V(r) \quad (\text{II-12})$$

Où :

$V(r)$ est le potentiel moyen du cristal possédant la périodicité du réseau.

L'équation générale du solide s'écrit alors :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V(r) \right) \Psi(r) = E(k) \Psi(r) \quad (\text{II-13})$$

$E(k)$: Energie propre du système.

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

Parmi les problèmes dans le calcul de la structure de bande on a le majeur problème est la détermination du potentiel du cristal $V(r)$. Pour obtenir les états électroniques du cristal, il existe différentes méthodes de résolution et pour résoudre le problème de mouvement de l'électron dans un champ périodique, on peut faire appel à la théorie des électrons presque libre (N.F.E.M) et celle des électrons fortement liés.[31]

II-4 La méthode des liaisons fortes (T.B.M) :

Cette méthode porte également le nom de Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques (L.C.A.O). Elle permet de déduire les propriétés du cristal en se basant sur les états propres des atomes séparés, Conçue pour la première fois par le savant Bloch [32] qui a supposé que l'énergie d'interaction de l'électron avec le noyau est supérieure que l'énergie cinétique.

II-5 La méthode des ondes planes :

Dans cette méthode on considère que le potentiel $V(r)$ du cristal est un potentiel périodique qu'on peut l'écrire sous la forme d'une série de Fourier [33]

$$V(r) = \sum_G(G) \exp(ikr) \quad (\text{II-14})$$

II-6 La méthode A.P.W :

Cette méthode a été imaginée pour pallier au problème des conditions aux limites, inhérentes à la méthode cellulaire. Le potentiel cristallin est supposé sphérique à l'intérieur de sphère de rayon r_s entourant les atomes et constant à l'extérieur de ces sphères. Ce type de potentiel est appelé le potentiel de muffintin (nid d'abeille) [34].

Les fonctions d'ondes sont développées en ondes sphériques où le potentiel est de type atomique et en ondes planes dans les régions où le potentiel est constant.

Ces fonctions d'ondes sont appelées ondes planes augmentées, elles sont continues en $r = r_s$ et ne présentent de ce fait aucun problème de condition aux limites.

La méthode A.P.W a été utilisée dans le calcul des structures de bandes des métaux (Fe, Cu, Zn) par Mathies, ainsi que d'autres propriétés, en particulier les métaux de transitions car le potentiel utilisé dans cette méthode est une approche raisonnable de ces systèmes.

II-7 La méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W) :

La méthode OPW (orthogonalized plane method), la méthode des ondes planes orthogonalisées de Herring, découle de l'idée que les états électroniques dans le cristal sont essentiellement les états de l'électron libre, plus au moins perturbés par la nature périodique du cristal [35] Herring note que le fait approximatif des fonctions d'ondes de valence ne produit pas les oscillations rapides de la région du cœur, pour cela il considère des ondes planes orthogonales, aux niveaux du cœur, satisfaisant aux conditions de Bloc.

II-4 La méthode des pseudo-potentiels :

II-4-1 La théorie de pseudo-potential:

Le pseudo-potential a été introduit pour la première fois par Fermi (1934) pour l'étude des niveaux atomiques observés et mise au point par Herring en 1940, qui a montré que le cœur n'a aucun effet sur les électrons de valence. Il déduit ensuite que l'énergie totale de l'électron dans le cœur était presque nulle d'une part et, d'autre part, la taille du cœur avait peu d'influence sur l'énergie des électrons de valence.

Cette approximation présente un grand intérêt dans le calcul théorique introduit pour simplifier les calculs des structures électroniques sans introduire les états atomiques des cœurs et les potentiels forts qui les lient, Les fonctions d'onde de valence oscillent rapidement dans la région occupée par les électrons du cœur et ceci est dû au potentiel ionique fort dans cette région. Ces oscillations permettent de conserver l'orthogonalité entre les fonctions du cœur et celles de valence.

Les pseudo-potentiels Dans les molécules et les composés solides, les électrons de valence sont les seuls à intervenir dans les liaisons chimiques, les électrons du cœur, qui sont sur les couches les plus internes, proches du noyau, sont très peu sensibles [36] ; Dans les années qui succédèrent, Hellman a proposé une approximation du Pseudo-potential qui a pu être utilisée dans la détermination du pseudo-potential énergétique dans les métaux alcalins.

Plusieurs autres suggestions ont vu l'apparition dans la littérature, des états solides. Cependant, c'est à partir des années cinquante, que les activités commencèrent à s'accélérer, et la théorie de la matière condensée continua à se développer, à une évaluation rapide jusqu'à présent.

De nombreux schémas de génération de pseudo-potentiels existent. Ils peuvent se baser sur une approche empirique ou sur des approches variées et nombreuses se basant sur une modification mathématique de la fonction d'onde électronique en deçà d'une distance donnée au noyau de l'atome.

II-4-1 La méthode pseudo-potential :

La méthode pseudo-potentielle comme la méthode OPW utilise les propriétés d'orthogonalités des états de valence et de conduction avec les états de cœur, mais l'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudo-potential.[37]

II -4-2 La méthode empirique locale du pseudo-potentiel (EPM):

C'est une autre variante de la méthode du pseudo-potentiel, elle utilise pour déterminer les facteurs de forme, les données expérimentales telles que celles obtenues par le spectre de réflexion ou le spectre de la partie imaginaire du constant diélectrique que l'on calcule en partant du spectre de réflexion. La photoémission et la réflectivité furent largement utilisées pour les semi-conducteurs ou elle a donné de très bons résultats pour le Ge et le Si [38], et aussi pour les semi-conducteurs de structure diamant et zinc blende [39]. Les facteurs de structures peuvent être déterminés de l'analyse des expériences de diffraction des rayons X ou par les neutrons. L'étude sur ces matériaux est basée sur une approximation locale [40].

Dans cette méthode empirique des pseudo-potentiels qui s'est révélée très fructueuse, la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelques termes de $V(G)$ que l'on

obtient par des ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux [41].

La méthode empirique des pseudo-potentiels (EPM) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux $V(G)$ du pseudo-potentiel $V_P(r)$ qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques [42], avec :

$$v_p = \sum_G v_\alpha(r - R - \tau) \quad (\text{II-15})$$

R est vecteur du réseau direct,

τ est le vecteur de translation du réseau direct.

Le potentiel $V_P(r)$ prend dans le réseau réciproque la forme suivante :

$$v_p = \sum_{G \leq G_0} v(G) \exp(iG, r) \quad (\text{II-16})$$

Avec

$$V(G) = \sum_\alpha S_\alpha(G) V_\alpha(G) \quad (\text{II-17})$$

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

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

$$S_\alpha(G) = \frac{1}{N_\alpha} \sum_r \exp(iG \cdot r) \quad (\text{II-18})$$

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

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_{A(G)} + V_B(G)] \quad (\text{II-19})$$

Avec V^S et V^A sont respectivement les facteurs de forme symétriques et antisymétriques.

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

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

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

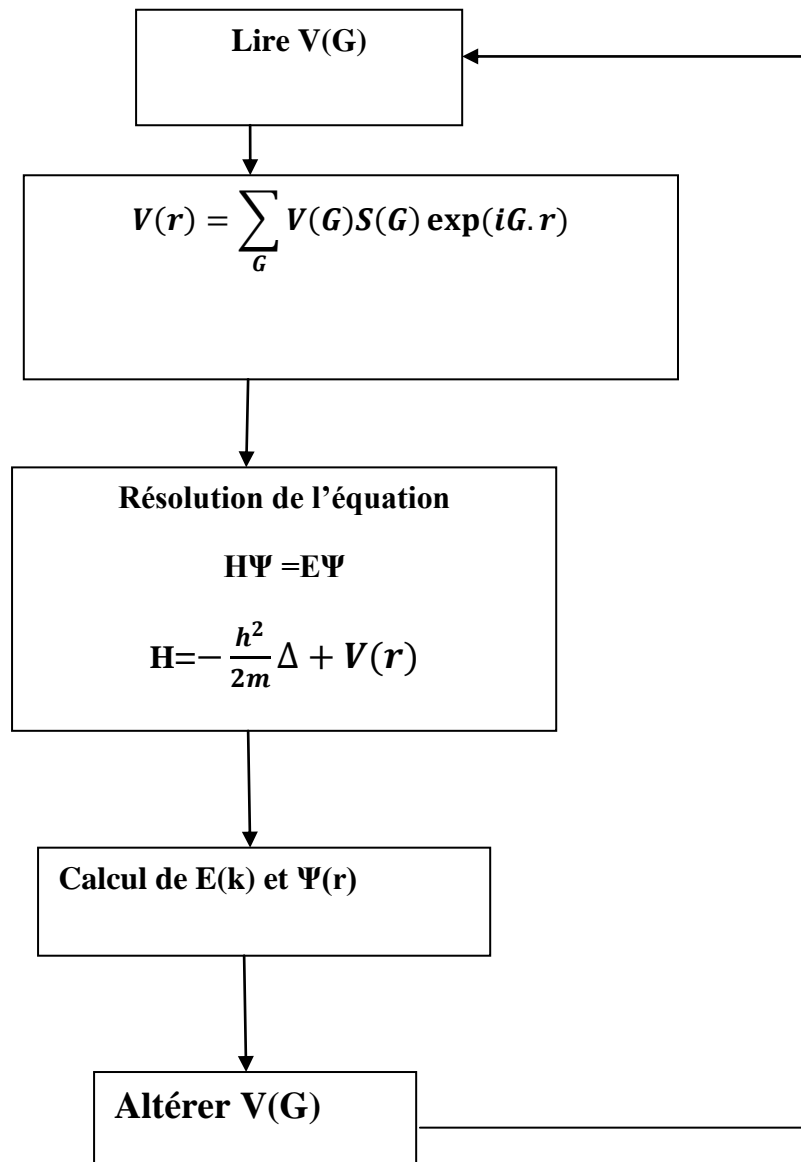
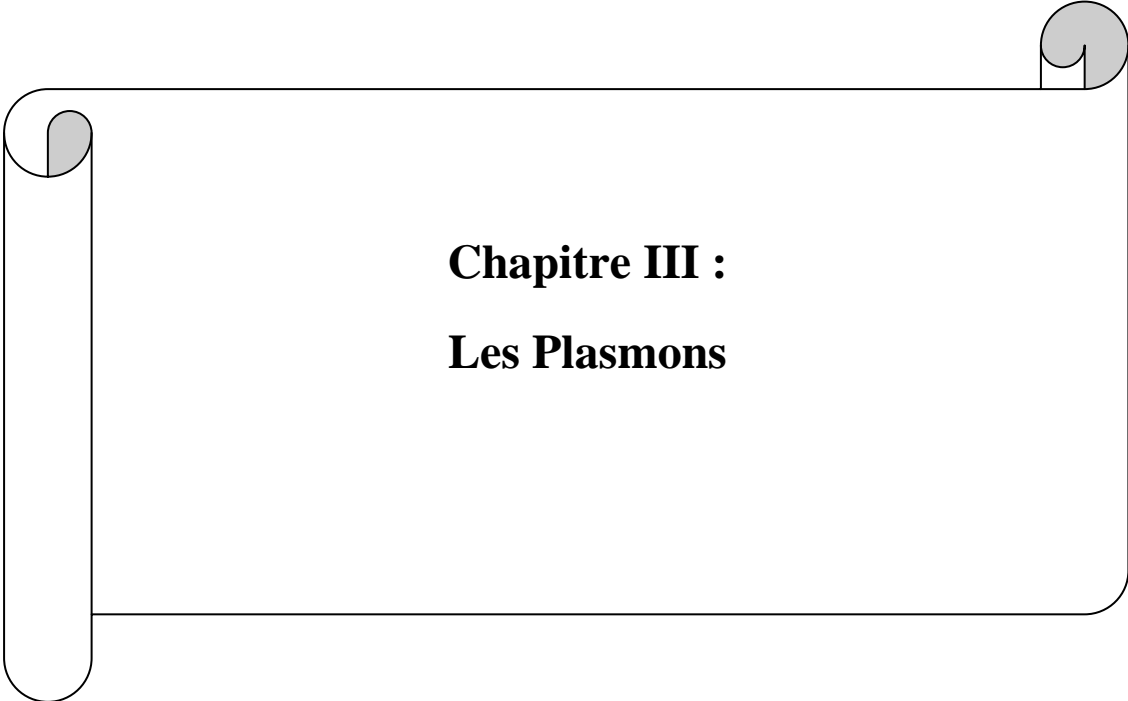


Figure II-1 Organigramme de la méthode E.P.M

On utilise les facteurs de forme $V(G)$ comme point de départ. La structure du composant est exprimée par $S(G)$, et l'équation de Schrödinger est résolue pour les énergies propres et les fonctions propres. En utilisant les valeurs propres et les fonctions propres, il est possible de calculer les fonctions de réponse "reponse function" comme les gaps ou la densité de charge. Ces fonctions seront comparées avec l'expérience et les $V(G)$ peuvent être changés si le désaccord avec l'expérience est important. Le processus est répète jusqu' a la convergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées. [43]



Chapitre III :
Les Plasmons

Les plasmas

III-1 Définition du plasma :

Les plasmas sont le quatrième état de la matière et représentent près de 99 % de l'Univers. Ils existent soit à l'état naturel (couronne solaire, Soleil, intérieur des étoiles, ionosphère, intérieur des naines blanches...), soit en laboratoire où ils sont généralement produits par des décharges électriques. Ce sont des gaz contenant des atomes, des molécules et des ions dans l'état fondamental ou dans un état excité, des électrons et des photons qui proviennent des états excités. Les électrons, particules très légères par rapport aux ions et aux neutres, sont fortement accélérés par les champs électriques et/ou magnétiques et jouent un rôle tout particulier. [44]

III-2 Types du plasma :

Il existe de très nombreuses variétés de plasmas qui dépendent de la densité des électrons et de la température (ou énergie) de ces derniers. Ils se distinguent en fait par différents critères :

-leur état d'ionisation, qui peut aller de très faible (quelques électrons dans un « océan » de neutres) à totalement ionisés (il n'y a plus que des électrons et des ions).

- **plasmas thermiques**(les collisions sont très nombreuses les collisions entre les particules les composant, avec des plasmas relevant de la cinétique classique et de l'équation de Boltzmann. Là encore, on peut les séparer, d'une part, en (pression au voisinage de la pression atmosphérique) et l'ionisation due à un effet thermique.

-**plasmas de décharges** où la distance parcourue entre deux collisions est suffisamment importante pour que l'ionisation puisse se faire par collision directe ;

-**les plasmas sans interactions** (ou pratiquement sans collisions) où les particules chargées se déplacent sous l'effet des champs électriques et magnétiques (atmosphères où les pressions sont très faibles $< 0,1$ Pa).

-**les plasmas relativistes** où les vitesses des particules se rapprochent de celle de la lumière.

-**les plasmas très denses et entièrement ionisés** qui se comportent comme des solides ou des liquides (particules submicroniques chargées).

- **les plasmas relevant des statistiques quantiques** comme celle de Fermi-

Dirac, par exemple un gaz d'électron.

La propagation des ondes dans les plasmas est également très complexe car ils contiennent des particules chargées de masses très différentes (électrons et ions) qui vont participer à l'onde. De plus, les champs magnétiques leur donnent un caractère anisotrope. On peut donc, là encore, les classer en différentes familles par rapport à la propagation des ondes. [45]

Nous nous limiterons, dans ce qui suit, au cas des plasmas gazeux.

Ces derniers sont un mélange d'électrons, d'ions et de particules neutres. Étant donné que les électrons ont une masse beaucoup plus faible que celle des autres particules :

Les électrons, du fait de leur faible masse, sont beaucoup plus rapides que les particules lourdes. Compte tenu de l'énergie importante des particules dans un plasma, les particules lourdes, ou tout du moins certaines d'entre elles, peuvent se trouver dans un état excité pendant des temps de l'ordre de 10^{-6} à 10^{-8} s. Elles se désexcitent vers un niveau d'énergie inférieur en émettant un photon. Cette émission de photons est en grande partie responsable de la luminosité du plasma et, en quelque sorte, sa « signature ».

III-3 Plasmons :

.III-3-1 Définition du Plasmon :

Une oscillation de plasma dans un métal est une excitation collective longitudinale du gaz des électrons de conduction. Un plasmon est une oscillation de plasma quantifiée ; nous pouvons exciter un plasmon en faisant traverser un film métallique fin par un électron (figure III-1) ou en faisant réfléchir un électron (ou un photon) par le film. Il y a couplage entre la charge de l'électron et les fluctuations du champ électrostatique des oscillations de plasma. L'électron réfléchi ou transmis perd une énergie à un multiple entier de l'énergie du plasmon. [46]

On conclure le plasmon est une quasi-particule résultant de la quantification de fréquence plasma, Ainsi, les Plasmons sont des oscillations collectives d'un gaz d'électrons.

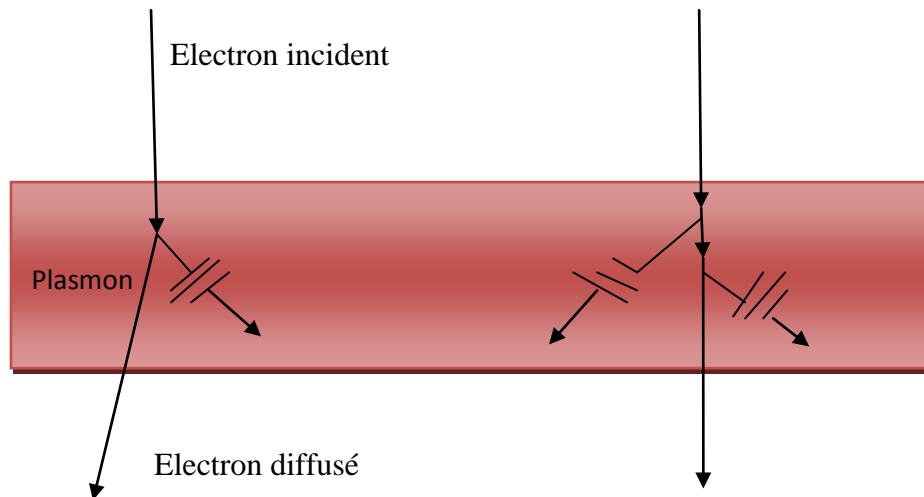


Figure III-1 : Création d'un plasmon dans un film métallique par diffusion inélastique d'un électron incident.

III-3-2 énergie du plasmon :

C'est une énergie perdue par le faisceau électron réfléchi ou transmis lorsqu'il génère un plasmon, nous exciter un plasmon en faisant traverser un film métallique fin par un électron ou en faisant réfléchir un électron par le film, [47] le couplage entre la charge d'électron et les fluctuations du champ électrostatique des oscillations de plasma et définit par :

$$E_{plasmon} = \hbar\omega_p \quad (\text{III-1})$$

Tableau III-1 : Energie des Plasmons de volume (en eV)

Eléments	énergie des plasmons(eV)
Na	5.9
Mg	10.6
Al	15.3
Ag	3.8
Au	38
Si	16.4-16.9
Ge	16.0-16.4
InSb	12.0-13.0

III-4 propriétés diélectrique :

Un isolant possède peu de charges libres, elles y sont piégées, contrairement à un matériau conducteur où les charges sont nombreuses et libres de se déplacer sous l'action d'un champ électromagnétique.

La faculté d'un matériau à être isolant peut aussi être expliquée par la notion de bandes d'énergie. L'isolation électrique est rattachée à une grandeur physique mesurable, la résistance, qui s'exprime en ohms (symbole : Ω).

Un matériau est diélectrique s'il ne contient pas de charges électriques susceptibles de se déplacer de façon macroscopique. Autrement dit, c'est un milieu qui ne peut pas conduire le courant électrique. A ce titre, on l'appelle parfois isolant électrique. On compte parmi ces milieux le verre et de nombreux plastiques [48].

III -4-1 Constants diélectriques :**Définition :**

Le constant diélectrique se définit comme le rapport entre la permittivité ε du matériau considéré et la permittivité du vide. [49]

$$\varepsilon = 1/\mu_0 c^2 \quad (\text{III-2})$$

Où :

- μ_0 est la constante magnétique
- c est la vitesse de la lumière dans le vide.

Le constant diélectrique décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle intervient dans de nombreux domaines, en particulier en optique, via l'indice de réfraction.

Les lois gérant la réfraction et la réflexion de la lumière y font appel.

Au niveau microscopique, le constant diélectrique est lié à la polarisabilité électrique des molécules ou atomes constituant le milieu.

Le constant diélectrique est une grandeur tensorielle (la réponse du matériau peut dépendre de l'orientation des axes cristallographiques du matériau), qui se réduit à un scalaire dans les milieux isotropes. Elle est très généralement complexe, la partie imaginaire étant liée au phénomène d'absorption ou d'émission du champ électromagnétique par le matériau. La constante diélectrique est également notée k dans le domaine des circuits intégrés et des semi-conducteurs. Les matériaux dits low- k sont des diélectriques à faible permittivité. Ils sont utilisés comme isolants entre les interconnexions métalliques pour diminuer le couplage entre celles-ci.

III-4-2 Quelques milieux diélectriques solides usuels :

- Le verre, utilisé pour faire des isolateurs de lignes hautes tension,
- La céramique.
- La plupart des plastiques.
- Le Polypropylène, utilisé en particulier dans les condensateurs.

Malgré l'impossibilité des milieux diélectriques de conduire le courant, ils présentent de nombreuses caractéristiques électriques. En effet les atomes qui constituent le matériau peuvent présenter des dipôles électrostatiques qui sont susceptibles d'interagir avec un champ électrique. Cette interaction se traduit par la création d'une polarisation reliée à ce champ électrique, au niveau microscopique, par une polarisabilité, et au niveau macroscopique, par la susceptibilité électrique, comme il est montré sur la figure (III-2).

[50]

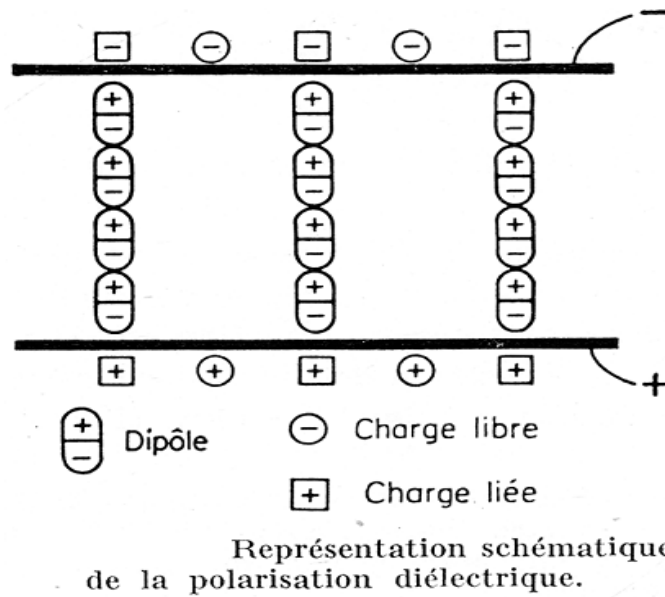


Figure III- 2 : Illustration de la polarisation d'un diélectrique.

III-4-3 Création d'une polarisation :

En soumettant le matériau à un champ électrique de tels dipôles peuvent être créés. S'ils existaient déjà, cela peut avoir comme effet de tous les aligner dans le même sens.

D'un point de vue microscopique, on peut relier l'amplitude de l'onde au dipôle créé via la notion de polarisabilité, qui est une caractéristique propre à chaque atome. Il est cependant impossible de mesurer de telles grandeurs microscopiques. On préfère utiliser une grandeur macroscopique, la polarisation, qui vaut la somme de tous les dipôles du matériau. Cette polarisation vient donc de différents effets physiques [51] :

- la polarisation électronique, toujours présente, est due au déplacement et à la déformation de

Chaque nuage électronique,

- la polarisation atomique est due aux déplacements des atomes,
- la polarisation d'orientation existe lorsque des dipôles déjà présents sont tous alignés entre

Eux.

La polarisation P est souvent proportionnelle au champ électrique E qui l'a créée (ce cas est

Dit linéaire) :

$$P = \varepsilon_0 \cdot \chi \cdot E \quad (\text{III-3})$$

Avec ϵ_0 la constante diélectrique et χ la susceptibilité électrique du matériau, qui est un nombre complexe. Dans le cas d'un diélectrique anisotrope, est χ un tenseur de rang 2.

III-4-4 Susceptibilité électrique :

En électromagnétisme, la susceptibilité électrique χ est une grandeur caractérisant la polarisation créée par un champ électrique. Ce phénomène se produit uniquement par l'intermédiaire d'un milieu matériel (souvent un matériau diélectrique), et dans de nombreux cas, l'intensité du champ électrique utilisé est suffisamment faible pour que la polarisation vérifie la relation (III-3).

Où ϵ_0 est la constante diélectrique, et où la susceptibilité électrique χ est un nombre complexe sans dimension.

Ce cas est dit linéaire car il s'agit d'une relation de proportionnalité. Il permet d'interpréter le phénomène de réfraction : en effet, la susceptibilité est reliée, d'après les équations de Maxwell, à l'indice de réfraction n par la relation :

$$n = \sqrt{1 + R_e(\chi)} \quad (\text{III-4})$$

Où $R_e(\chi)$ désigne la partie réelle de la susceptibilité électrique. [52]

III-4-5 Interprétation physique :

La permittivité d'un matériau est définie comme le rapport entre la norme du champ de déplacement électrique et celle du champ électrique appliqué au matériau. Pour des champs suffisamment grands, ce rapport n'est pas constant et tend vers ϵ_0 .

ϵ_0 peut être vue comme la permittivité intrinsèque du vide.

isée par rapport à celle du vide

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \quad (\text{III-5})$$

Cette valeur ne possède pas d'unité et est toujours supérieure à 1.

III-4-6 Définition de la fonction diélectrique :

La fonction diélectrique d'un gaz électronique $\epsilon(\omega, K)$ dépend de la fréquence et du vecteur d'onde. Cette fonction a des conséquences importants sur les propriétés physiques des solide, dans le cas où ω ou K se trouve la valeur zéro, la fonction diélectrique

fournit respectivement une description des excitations collectives de la mer de fermi (plasmons de surface et de volume) et de l'écrantage électrostatique des interactions dans les cristaux.

III-4-7 Interaction onde radiofréquence-semi-conducteur :

En générale, lorsqu'une onde électromagnétique pénètre dans un matériau, une partie de son énergie R est réfléchiée en surface, une partie T est transmise à travers le matériau et une partie A est absorbée sous forme de chaleur.

$$E_e = R + T + A \quad (\text{III-6})$$

Dans cette partie, l'interaction entre une onde radiofréquence et le matériau semi-conducteur est plus ciblé sur le phénomène de propagation dans une ligne de transmission incluant les pertes du milieu. On peut s'attendre à une variation des caractéristiques du matériau en fonction de la fréquence du signal microonde. [53]

III-4-7-1 Equation de Maxwell :

Les semi-conducteurs sont des milieux diélectriques à pertes dues à leur conductivité finie. Ces pertes sont parfois nommées pertes diélectriques. En effet, les pertes diélectriques se manifestent quand la réponse électrique n'est plus synchrone avec le champ exciteur. La permittivité relative du diélectrique est alors complexe :

$$\epsilon_r = \epsilon_1 - i\epsilon_2 \quad (\text{III-7})$$

Où :

ϵ_1 et ϵ_2 sont donnée par la relation de kramen-kroning.

III-5 Fréquence plasma :

La fréquence de plasma est la fréquence caractéristique des ondes de plasma, ou Les électrons oscillent alors à la fréquence de résonance ω_p (ou fréquence plasma) si on considère les électrons libres comme un gaz. [54]

Ce mécanisme d'émission de rayonnement résulte du comportement collectif des particules - des électrons - accélérées. En effet, si un plasma subit une perturbation, ses électrons vont spontanément et collectivement se mettre à osciller à la fréquence particulière appelée fréquence plasma.

Cette fréquence est donnée par :

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\varepsilon_0}} \quad (\text{III-8})$$

Avec :

ω_p : La fréquence plasma (en Hz)

n : est la densité d'électrons

e : La charge élémentaire

m^* : La masse effective de l'électron

ε_0 : La constante diélectrique

III-6 Fonction diélectrique dans les plasmas :

En électrostatique est définie à l'aide du champ électrique E et de la polarisation P . la densité des moments dipolaires définit par la relation : [55]

$$D = E + 4\pi P = \varepsilon E \quad (\text{III-9})$$

$$D = \varepsilon_0 E + P = \varepsilon \varepsilon_0 E \quad (\text{III-10})$$

D : Le déplacement

ε : La permittivité relative

A l'optique de plasma, à partir de l'équation de mouvement d'un électron libre soumis à un champ électrique

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -eE \quad (\text{III-11})$$

Cette équation peut s'écrire suivant la loi de $\exp(-i\omega t)$:

$$-\omega^2 mx = -eE \quad (\text{III-12})$$

La polarisation définie par l'équation :

$$P = -nex = -(ne^2/m\omega^2)E \quad (\text{III-13})$$

Avec n est la concentration en électrons.

Pour la fréquence ω la fonction diélectrique est définie par :

$$\varepsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{\varepsilon_0 E(\omega)} = 1 + \frac{P(\omega)}{\varepsilon_0 E(\omega)} \quad (\text{III-14})$$

Nous pouvons donc écrire la fonction diélectrique d'un gaz d'électrons libres :

$$\varepsilon(\omega) = 1 - ne^2/\varepsilon_0 m\omega^2 \quad (\text{III-15})$$

Dans les solides les charges négatives des électrons de conduction sont équilibrées par une concentration égale des charges positives, celles des ions, cette fonction $\varepsilon(\omega)$ peut alors s'écrire:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2 \quad (\text{III-16})$$

Les ondes électrostatiques ne se propagent que lorsque $\varepsilon(\omega)$ est positive.

Les ondes électromagnétiques sont totalement réfléchies par le milieu quand $\varepsilon(\omega)$ est négative.

La fonction d'électrique dans ce cas représentée sur la figure ci-dessous :

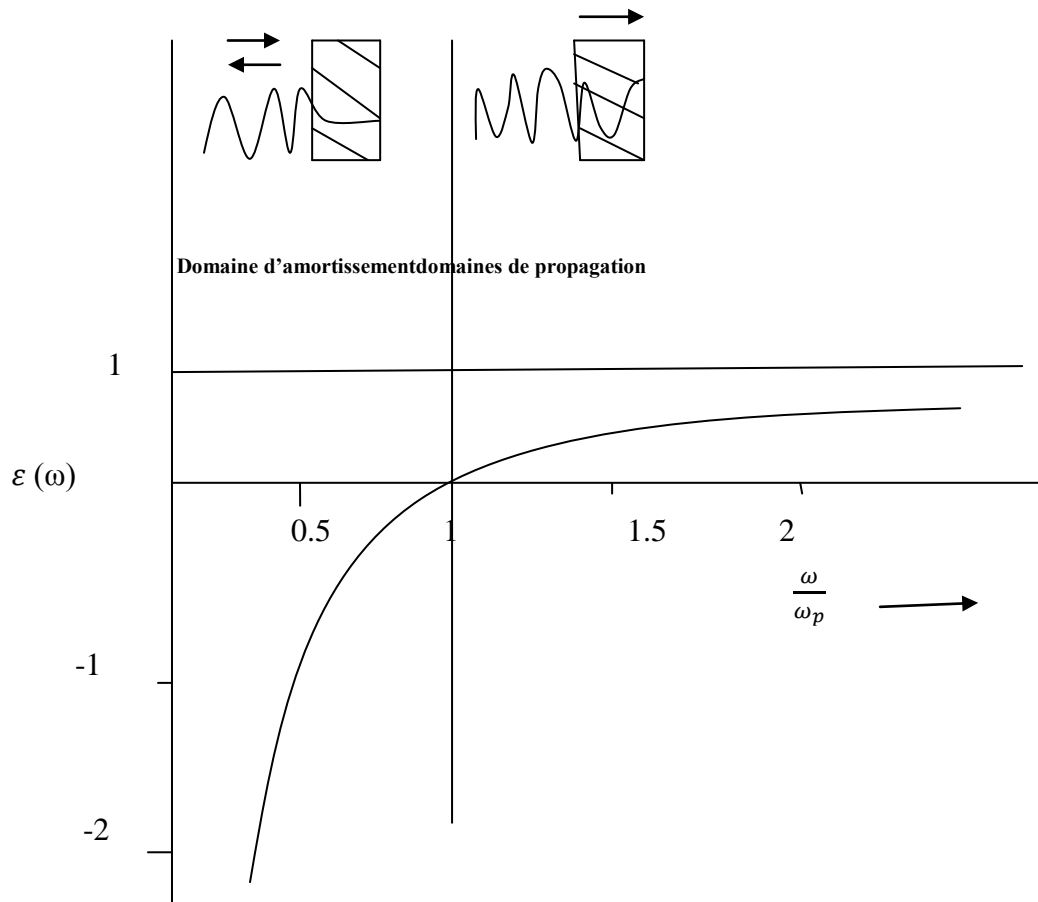


Figure III-3 : fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ d'un gaz d'électron libres en fonction de la fonction de fréquence exprimée par rapport à la fréquence de plasma ω_p .



Chapitre IV :
Résultats et discussions

IV-1. Introduction :

Plusieurs méthodes théoriques ont été développées pour l'étude des propriétés physiques et chimiques des matériaux. Cependant la méthode empirique des pseudo-potentiels reste la méthode la plus simple qui offre les résultats les plus compatibles à l'expérience.

Le pseudo-potentiel empirique est définie comme étant la superposition des pseudo-potentiels atomiques de la forme :

$$V_P(r) = V_L(r)V_{NL}(r) \quad (IV-1)$$

Où:

$V_L(r)$ et $V_{NL}(r)$ sont respectivement la partie locale du pseudo-potentiel et la partie non locale.

Dans notre travail, on a pris en considération que la partie locale de telle sorte que la relation (IV-1) devient :

$$V_P(r) = V_L(r) = \sum_G V(G) S(G) \exp(iGr) \quad (IV-2)$$

Avec :

$S(G)$ sont les facteurs de structure et $V(G)$ les facteurs de forme, ces derniers ont été au départ tirés de la littérature, ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère consistant à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie calculés par la méthode des pseudo-potentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement, définie par :

$$\Delta = \left[\sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m-N} \right]^2 \quad (IV-3)$$

Où :

$$\Delta E_{i,j} = E_{i,j}^{exp} - E_{i,j}^{cal} \quad (IV-4)$$

$E_{i,j}^{exp}$, $E_{i,i}^{cal}$ sont respectivement les énergies observées et calculées entre l' $i^{ième}$ état correspondant au vecteur d'onde ($k=k_i$) et le $j^{ième}$ état en ($k=k_j$) du $m^{ième}$ paire choisi (i, j), N est le nombre des paramètres du pseudo potentiel empirique à déterminer.

Les valeurs des paramètres induits au départ seront améliorées par itérations successives jusqu'à ce que δ soit minimale.

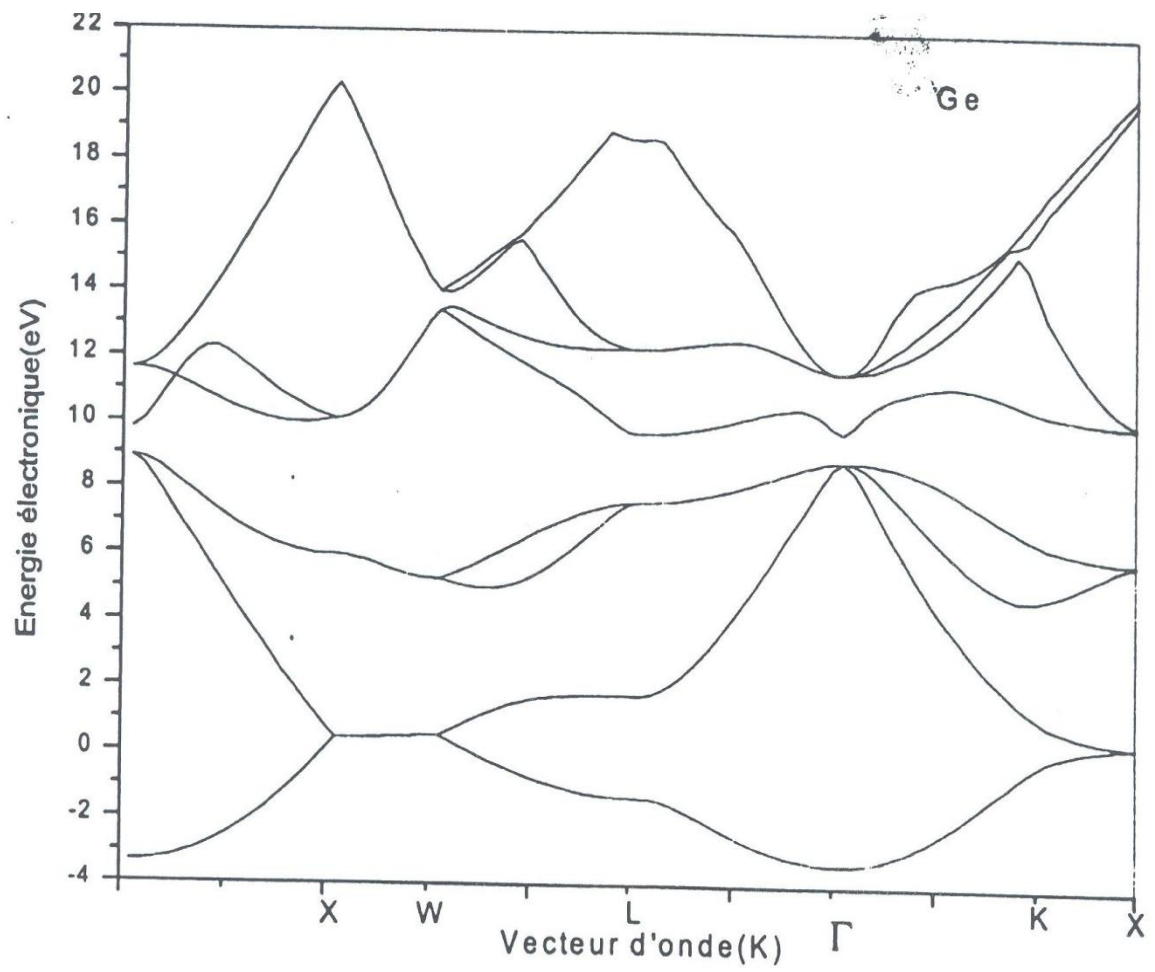
Les facteurs de formes symétriques et antisymétriques ajustent en (Ryd) ainsi que leurs paramètres du réseau des semi-conducteurs étudiés dans la phase zinc-blende sont présentes dans le tableau (IV-1) :

Tableau IV-1 : Les facteurs de forme symétriques et anti symétriques et les paramètres du réseau des semi-conducteurs étudiés dans la phase zinc-blende.

matériel	Facteurs de forme symétriques et antisymétriques						paramètres du réseau (unité atomique)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_{As}(3)$	$V_{As}(4)$	$V_{As}(11)$	
Ge	-0.299467	0.077585	0.001723	0.0	0.0	0.0	10.692
α -Sn	-0.195	-0.008	0.04	0.0	0.0	0.0	12.262
AlSb	-0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	0.004544	11.591
InP	-0.213870	0.00	0.070502	0.088816	0.06	0.03	11.091
InAs	-0.217669	0.011	0.041633	0.054731	0.039485	0.024	11.447
GaAs	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01	10.682
ZnTe	-0.247293	0.021262	0.252724	0.030061	0.116	0.290414	11.534
CdTe	-0.396388	0.198275	0.459548	0.1311	0.28	0.708145	12.245
CdSe	-0.404199	0.174645	0.340923	0.1311	0.28	0.572395	11.436
ZnSe	-0.225333	0.007070	-0.007421	0.116490	0.129940	-0.100180	10.711

IV-2 propriétés électroniques :

L'utilisation des ces paramètres dont les valeurs mentionnées dans le tableau (IV-1) nous à permet de calculer les structures de bandes dont elles sont un outil efficace pour calculer les gaps énergétiques et par conséquent déduire les masses effectives des électrons des différents semi-conducteurs étudiés.



IV-1 : Structure de bande électronique de Ge.

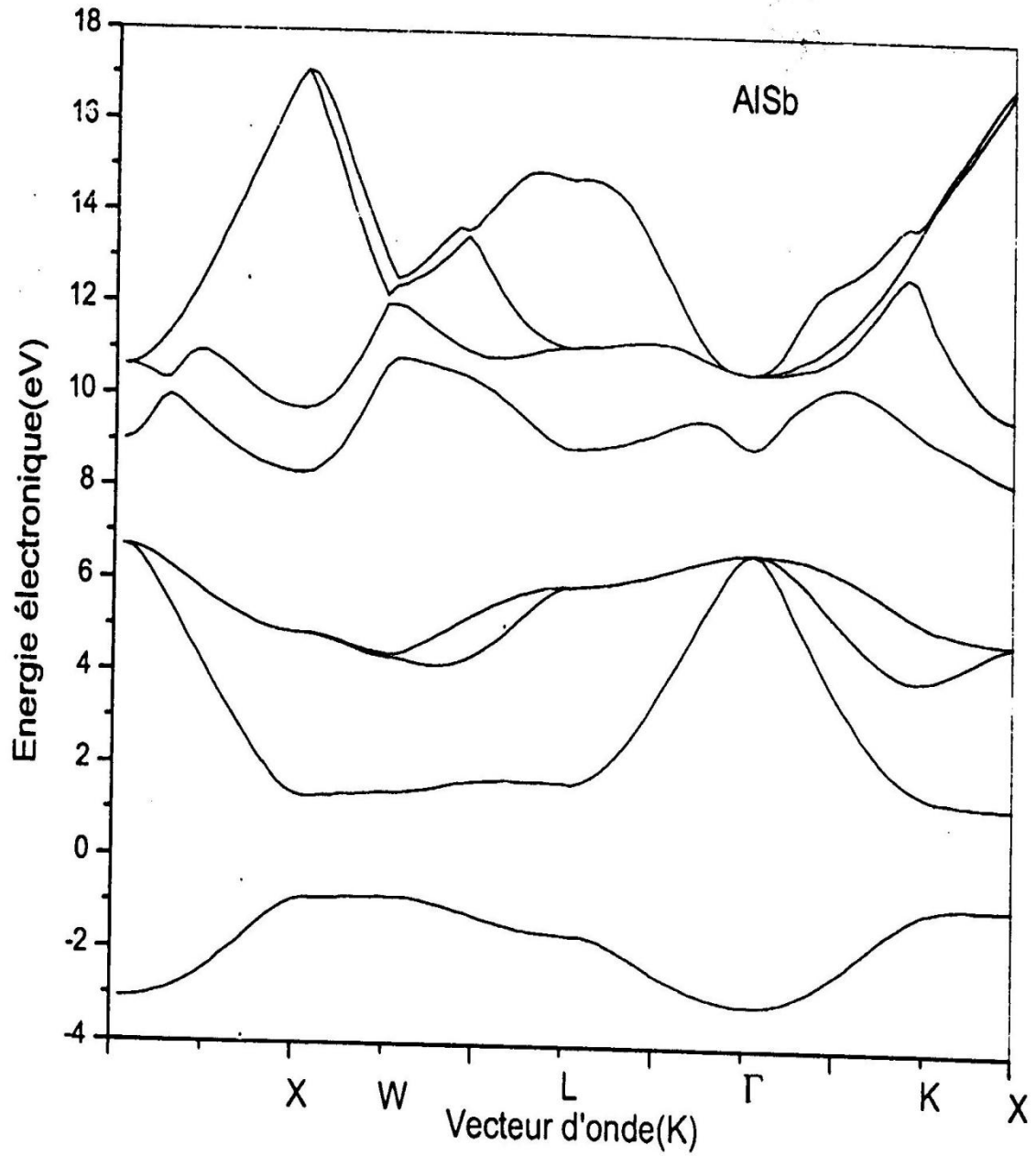


Figure IV-2 : la structure de bande électronique de AlSb.

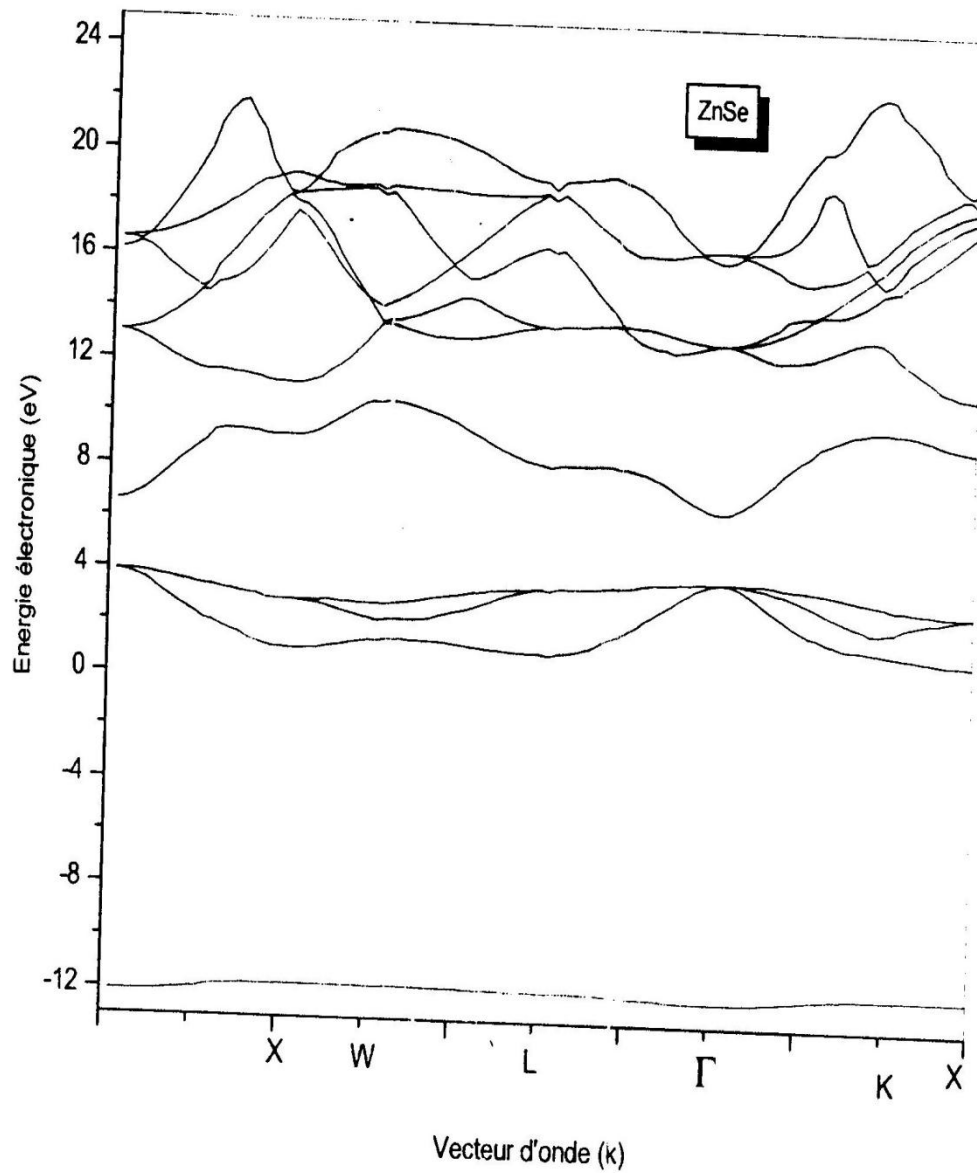


Figure IV-3 : Structure de bande électronique de ZnSe.

Dans les figures (IV-1 ; IV-2 ; IV3), Nous avons présenté la structure de bande électronique des matériaux Ge qui un exemple des semi-conducteurs simples de type (IV), AlSb qui est un exemple des semi-conducteurs de type (III-V) et de ZnSe qui est un exemple des semi-conducteurs de type (II-VI). On remarque qu'il y'a une similitude quantitative de la structure de bande des matériaux présentes.

Au point de vu quantitatif on remarque que ces semi-conducteurs différents dans les valeurs de leurs bandes interdite. Ces structures de bandes montrent que le Ge et le AlSb sont des semi-conducteurs à gap indirect, vu que le max de bande de valence est situé au point Γ tandis que le minimum de la bande de conduction est situé au point de haute symétrie X dans la zone de Brillouin. Neau moins de semi-conducteur ZnSe est un semi-conducteur à gap direct ou on remarque que le max de la bande de la valence est situé au point Γ (centre de la zone de Brillouin) alors que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ .

De ces structures de bandes nous avons déduire les valeurs des gaps d'énergies des éléments semi-conducteurs : (Ge, α -Sn, AlSb, InP, InAs, GaAs, ZnTe, CdTe, CdSe, ZnSe) aux points haute symétrie Γ , X, L qui sont illustrées sur le tableau (IV-2) :

Tableau IV-2 : Les valeurs des gaps d'énergies des éléments semi-conducteurs.

Matériel	E (Γ- Γ)	E (Γ-L)	E (Γ-x)
Ge	0.87	0.78	1.20
a-Sn	0	0.314	1.082
AlSb	2.30	2.21	1.61
InP	1.35	2.05	2.21
InAs	0.36	1.068	1.37
GaAs	1.42	1.72	1.8
ZnTe	2.26	2.38	3.046
CdTe	1.5	2.47	3.48
CdSe	1.68	3.61	3.9
ZnSe	2.7	3.3	3.17

VI-3 La masse effective :

La masse effective qui est lié étroitement avec le transporteur (la mobilité) est connue pour être l'un des plus importants paramètres, elle est en général un tenseur a neuf composants défini comme : [56]

$$\frac{1}{m_{xy}^*} = \frac{4\pi}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (\text{VI-5})$$

Ou : E est le transporteur d'énergie.

K sont les composants du vecteur d'onde k dans un semi-conducteur dans un champ de potentiel périodique.

Toute fois, pour un cas simple très idéalisé, c'est-à-dire pour le groupe qui se produit dans la structure de bande à l'extrémum de k (Γ, X, L).

La masse effective est un scalaire qui peut être obtenue à partir de cette relation :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial K^2} \quad (\text{VI-6})$$

En utilisant l'équation (VI-2), nous avons calculé la masse effective des électrons pour tous les matériaux étudiés dans notre travail.

La masse effective a été déterminée en utilisant une relation quadratique entre l'énergie de l'électron et le vecteur d'onde au voisinage du minimum de la bande de conduction pour tous les composés étudiés. Le fit quadratique illustré dans la figure (IV-4) pour le composé α -Sn et en utilisant cette relation appliqué sur les autres composés.

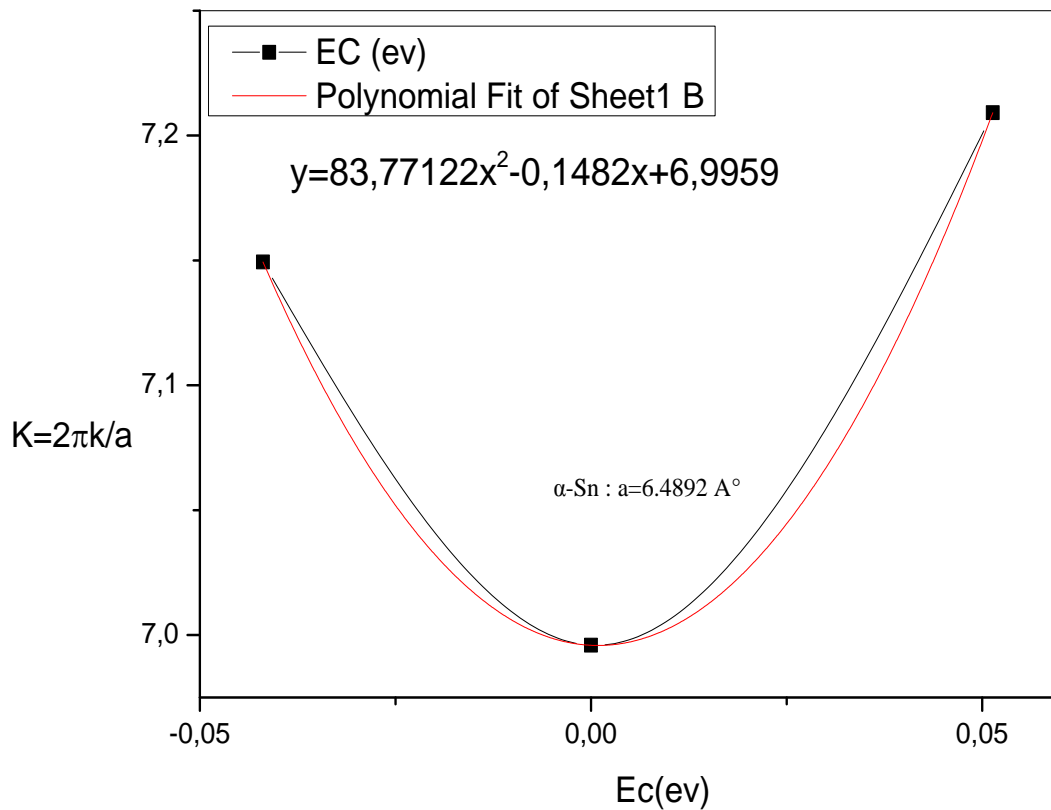


Figure IV-4 : le fit quadratique entre l'énergie d'électron et le vecteur d'onde.

Nous résultats sont indiqués dans le tableau (VI-3) :

Tableau IV-3 : Les masses effectives des semi-conducteurs.

Eléments	La masse effective calculée En (Kg)	La masse effective Trouvée En (Kg)
Ge	$4.36 \cdot 10^{-32}$	
a-Sn	$3.56 \cdot 10^{-32}$	
AlSb	$1.04 \cdot 10^{-31}$	$1.09 \cdot 10^{-31}$
InP	$6.96 \cdot 10^{-32}$	$7 \cdot 10^{-32}$
InAs	$3.05 \cdot 10^{-32}$	$2.09 \cdot 10^{-32}$
GaAs	$6.37 \cdot 10^{-32}$	$6.10 \cdot 10^{-32}$
ZnTe	$1.98 \cdot 10^{-31}$	
CdTe	$1.79 \cdot 10^{-31}$	
CdSe	$1.35 \cdot 10^{-31}$	
ZnSe	$1.76 \cdot 10^{-30}$	$1.24 \cdot 10^{-31}$

À partir de ce tableau on peut observer que nos valeurs sont en très bon accord avec ceux de l'expérience reportés dans [57].

VI-4 Propriétés de plasmon :

L'objectif de cette contribution est l'étude des fréquences et des fonctions diélectriques des semi-conducteurs d'intérêt.

IV-4-1 Fréquence de plasmon :

La fréquence de plasma a été calculée en utilisant la relation suivante :

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m^*} \quad (\text{IV-7})$$

n : concentration des électrons.

e : la charge des électrons.

ϵ_0 : la permittivité électrique.

m^* Représente la masse effective des électrons.

Cette masse à été déjà calculé pour tous les éléments sous investigation est représentés précédemment dans le tableau (IV-3).

Nous résultats concernant la fréquence de plasma sont illustrés dans le tableau (IV-4) en fonction de la concentration des électrons (n) ; qui est exprimé en e/cm^3 . L'intervalle des concentrations des électrons prés en considérations dans notre étude est de 10^{10} jusqu'à $10^{22} e/cm^3$.

Tableau IV-4 : les fréquences et longueur d'onde du plasma en fonction de la concentration des électrons.

Eléments	$n_1=10^{22} e/cm^3$		$n_2=10^{18} e/cm^3$		$n_3=10^{14} e/cm^3$		$n_4=10^{10} e/cm^3$	
	$\omega_p (s^{-1})$	$\lambda_p (m)$	$\omega_p (s^{-1})$	$\lambda_p (m)$	$\omega_p (s^{-1})$	$\lambda_p (m)$	$\omega_p (s^{-1})$	$\lambda_p (m)$
Ge	$2,5510^{16}$	$7,3810^{-8}$	$2,5510^{14}$	$7,3810^{-6}$	$2,5510^{12}$	$7,38 \cdot 10^{-4}$	$2,5510^{10}$	$7,3810^{-2}$
a-Sn	$2,8210^{16}$	$6,6710^{-8}$	$2,8210^{14}$	$6,6710^{-6}$	$2,8210^{12}$	$6,67 \cdot 10^{-4}$	$2,8210^9$	$6,6710^{-2}$
AlSb	$1,6510^{16}$	$1,1410^{-7}$	$1,6510^{14}$	$1,1410^{-6}$	$1,6510^{12}$	$1,14010^{-3}$	$1,6510^9$	$1,1410^{-1}$
InP	$2,0210^{16}$	$9,3210^{-8}$	$2,0210^{14}$	$9,3210^{-6}$	$2,0210^{12}$	$9,3210^{-4}$	$2,0210^9$	$9,3210^{-2}$
InAs	$3,0510^{16}$	$6,1710^{-8}$	$3,0510^{14}$	$6,1710^{-6}$	$3,0510^{12}$	$6,1710^{-4}$	$3,0510^{10}$	$6,1710^{-2}$
GaAs	$2,1110^{16}$	$8,9110^{-8}$	$2,1110^{14}$	$8,9110^{-6}$	$2,1110^{12}$	$8,9110^{-4}$	$2,1110^{10}$	$8,9110^{-2}$
ZnTe	$1,1910^{16}$	$1,5710^{-7}$	$1,1910^{14}$	$1,5710^{-5}$	$1,1910^{12}$	$1,5710^{-3}$	$1,1910^{10}$	$1,5710^{-1}$
CdTe	$1,2510^{16}$	$1,4910^{-7}$	$1,2510^{14}$	$1,4910^{-5}$	$1,2510^{12}$	$1,49 \cdot 10^{-3}$	$1,2510^{10}$	$1,4910^{-1}$
CdSe	$1,410^{16}$	$1,2910^{-7}$	$1,4510^{14}$	$1,2910^{-5}$	$1,4510^{12}$	$1,2910^{-3}$	$1,4510^{10}$	$1,2910^{-1}$
ZnSe	$1,2610^{16}$	$1,4810^{-7}$	$1,2610^{14}$	$1,4810^{-5}$	$1,2610^{12}$	$1,48 \cdot 10^{-3}$	$1,2610^{10}$	$1,4810^{-1}$

Il a été reporté dans la littérature que dans un plasma semi-conducteur les fréquences de collision des électrons et des trous en faible concentration sont de l'ordre $10^{12} Hz$ [53].

La fréquence plasma est proportionnelle à la racine carrée de porteur photo-induit. Pour des densités de porteur libre de l'ordre de 10^{10} ou 10^{13} e/cm^3 , la fréquence de plasma se situe entre 10^{10} Hz jusqu'à 10^{13} Hz [53] cela est consistant avec nos résultats présentés dans le tableau (IV-4) et donne ainsi une crédibilité au modèle utilisé dans nos calculs.

En se basant sur les valeurs de fréquence de plasma nous avons aussi calculé les valeurs des longueurs d'ondes de plasma selon la relation :

$$\lambda_p = \frac{2\pi c}{\omega_p} \quad (\text{IV-6})$$

Nos résultats sont donnés dans le tableau (IV-4) on remarque la longueur d'onde plasma diminue lorsque on augmente la concentration des électrons.

En plus on remarque l'onde de grandeur de λ_p est en bon accord avec selon publiée dans la littérature [53].

En se basant sur les valeurs de ω_p l'énergie de plasma a été aussi calculée pour tous les éléments étudiés. Nos résultats sont montrés sur le tableau (IV-5).

Tableau IV-6 : Energie de plasmon des semi-conducteurs dans les différentes concentrations

Eléments	$n=10^{20} \text{ e/cm}^3$	$n=10^{18} \text{ e/cm}^3$	$n=10^{14} \text{ e/cm}^3$	$n=10^{10} \text{ e/cm}^3$
	$E_p(\text{ev})$			
Ge	16,8	$16,8 \cdot 10^{-2}$	$16,8 \cdot 10^{-4}$	$16,8 \cdot 10^{-6}$
α -sn	27,2	$27,2 \cdot 10^{-2}$	$27,2 \cdot 10^{-4}$	$27,2 \cdot 10^{-6}$
AlSb	10,8	$10,8 \cdot 10^{-2}$	$10,8 \cdot 10^{-4}$	$10,8 \cdot 10^{-6}$
InP	13,3	$13,3 \cdot 10^{-2}$	$13,3 \cdot 10^{-4}$	$13,3 \cdot 10^{-6}$
InAs	20,1	$20,1 \cdot 10^{-2}$	$20,1 \cdot 10^{-4}$	$20,1 \cdot 10^{-6}$
GaAs	13,9	$13,9 \cdot 10^{-2}$	$13,9 \cdot 10^{-4}$	$13,9 \cdot 10^{-6}$
ZnTe	07,8	$07,8 \cdot 10^{-2}$	$07,8 \cdot 10^{-4}$	$07,8 \cdot 10^{-6}$
CdTe	08,2	$08,2 \cdot 10^{-2}$	$08,2 \cdot 10^{-4}$	$08,2 \cdot 10^{-6}$
CdSe	09,5	$09,5 \cdot 10^{-2}$	$09,5 \cdot 10^{-4}$	$09,5 \cdot 10^{-6}$
ZnSe	08,3	$08,3 \cdot 10^{-2}$	$08,3 \cdot 10^{-4}$	$08,3 \cdot 10^{-6}$

On note que nos résultats pour le Ge et AlSb sont en très accord avec ceux reportés dans la littérature [55].

Une tentative a été faite afin de trouver une relation entre la fréquence de plasma et les gaps fondamentaux. A cet effet nous avons tracé la variation de w_p en fonction des gaps fondamentaux pour tous les éléments sur investigation. Nos résultats sont illustrés sur les figures (IV-4, IV-5, IV-6, IV-7).

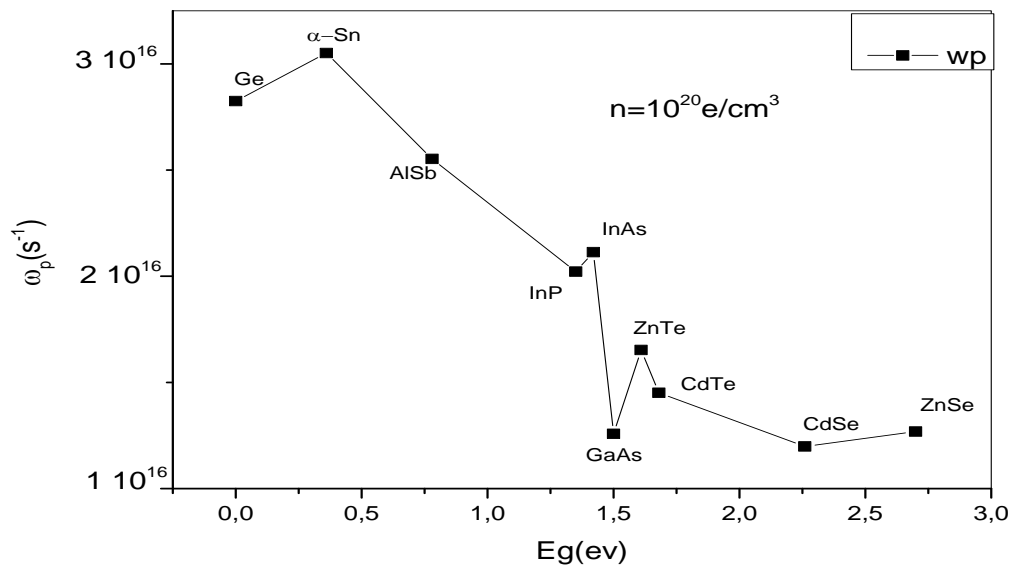


Figure IV-5 : Etude de fréquence de plasma des semi-conducteur en fonction Energie de gap à concentration $10^{20} e/cm^3$.

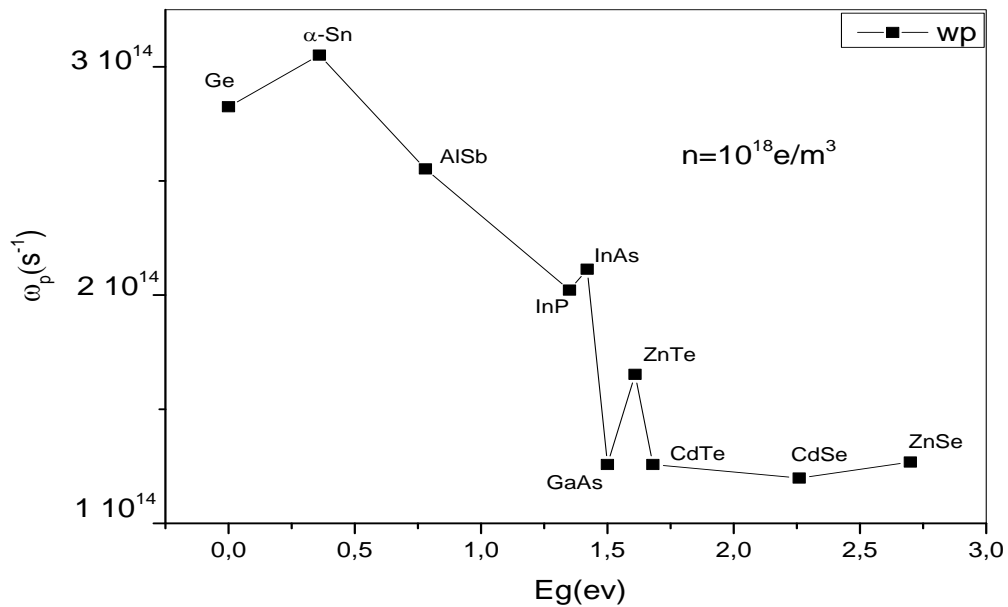


Figure IV-6 : Etude de fréquence de plasma des semi-conducteur en fonction Energie de gap à concentration $10^{18} e/cm^3$.

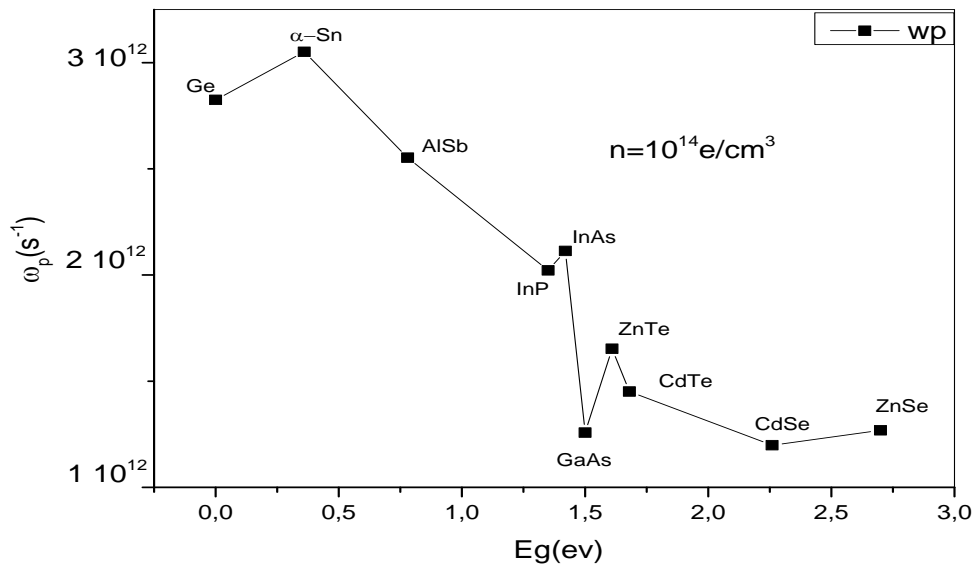


Figure IV-7: Etude de fréquence de plasma des semi-conducteur en fonction Energie de gap à concentration $10^{14} e/cm^3$.

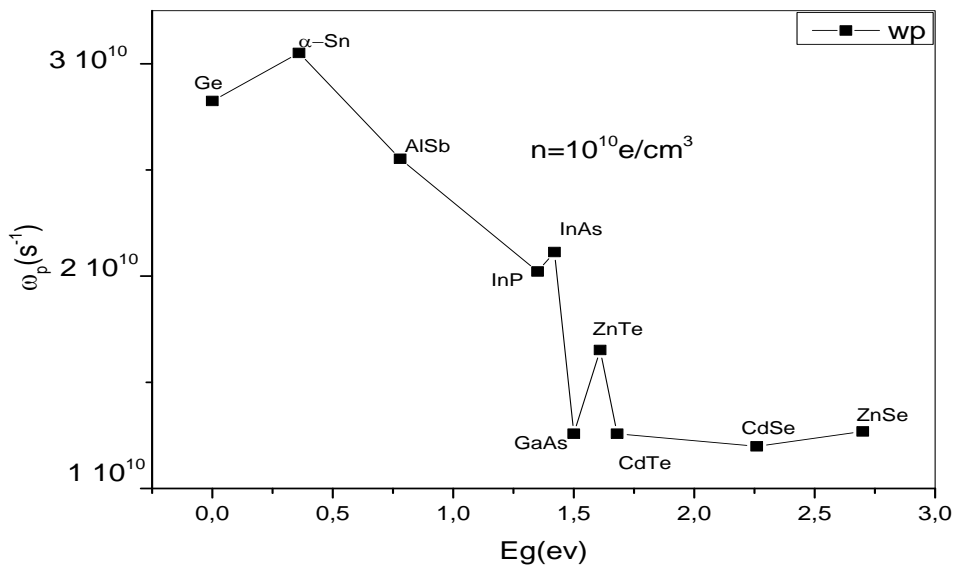


Figure IV-8 : Etude de fréquence de plasma des semi-conducteur en fonction Energie de gap à concentration $10^{10} e/cm^3$.

D'après ces figures on remarque qu'il ya une variation non monotone de w_p en fonction des gaps fondamentaux en plus interpolation polynomiale d'ordre (2) n'étant pas possible. On peut conclure donc que pour une concentration fixe des électrons, une interpolation quadratique entre w_p et les gaps fondamentaux n'est pas possible.

IV-4-2 Propriétés diélectriques :

La fonction diélectrique d'un plasmon dépend de la fréquence. L'étude de la fonction diélectrique dans les plasmas est très importante dans la détermination des différentes propriétés électronique et optique des plasmons dans les semi-conducteurs.

La fonction diélectrique dépend de la fréquence de plasma w_p et la fréquence de l'onde électromagnétique incidente suivant la relation :

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (\text{IV} - 7)$$

Les figures (IV-8, IV-9, IV-10, VI-11, IV-12, IV-13) représentent les variations de $\varepsilon(\omega)$ en fonction de ω , pour les composés semi-conducteurs (Ge, AlSb, ZnSe) pour les faibles concentrations d'électrons $n = 10^{10} \text{ e/cm}^3$.

Sachant que la fréquence ω varie dans le domaine optique allant de l'Infrarouge ou visible.

On note que pour la forte concentration $n = 10^{20} \text{ e/cm}^3$ la fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ augmente avec l'augmentation de ω , cette tendance est monotone et presque linéaire pour toutes les matériaux semi-conducteurs d'intérêt.

On remarque que toutes les valeurs de ε est négative, étant donner les ondes électromagnétiques ne se propagent que lorsque les valeurs de $\varepsilon(\omega)$ sont positives, d'où on peut conclure que les ondes électromagnétique dans le domaine optique sont totalement réfléchis par le milieu.

Néons moins pour les faibles concentrations des électrons $n = 10^{10} \text{ e/cm}^3$, la fonction diélectrique reste presque constante avec l'augmentation de la fréquence ω dans le domaine optique. Pour les semi-conducteurs sous investigation, cette constante est trouvée de valeur positive et proche de l'unité(1).

La fonction diélectrique de plasma qui n'est que la permittivité relative de diélectriques ϵ_r , est complexe exprimé par :

$$\epsilon_r = \epsilon_1 - i\epsilon_2 \quad (\text{IV-8})$$

Dans ce cas la fonction diélectrique de la couche plasma est donc présente par un nombre réel qui n'est autre que la permittivité relative de semi conducteurs d'intérêt.

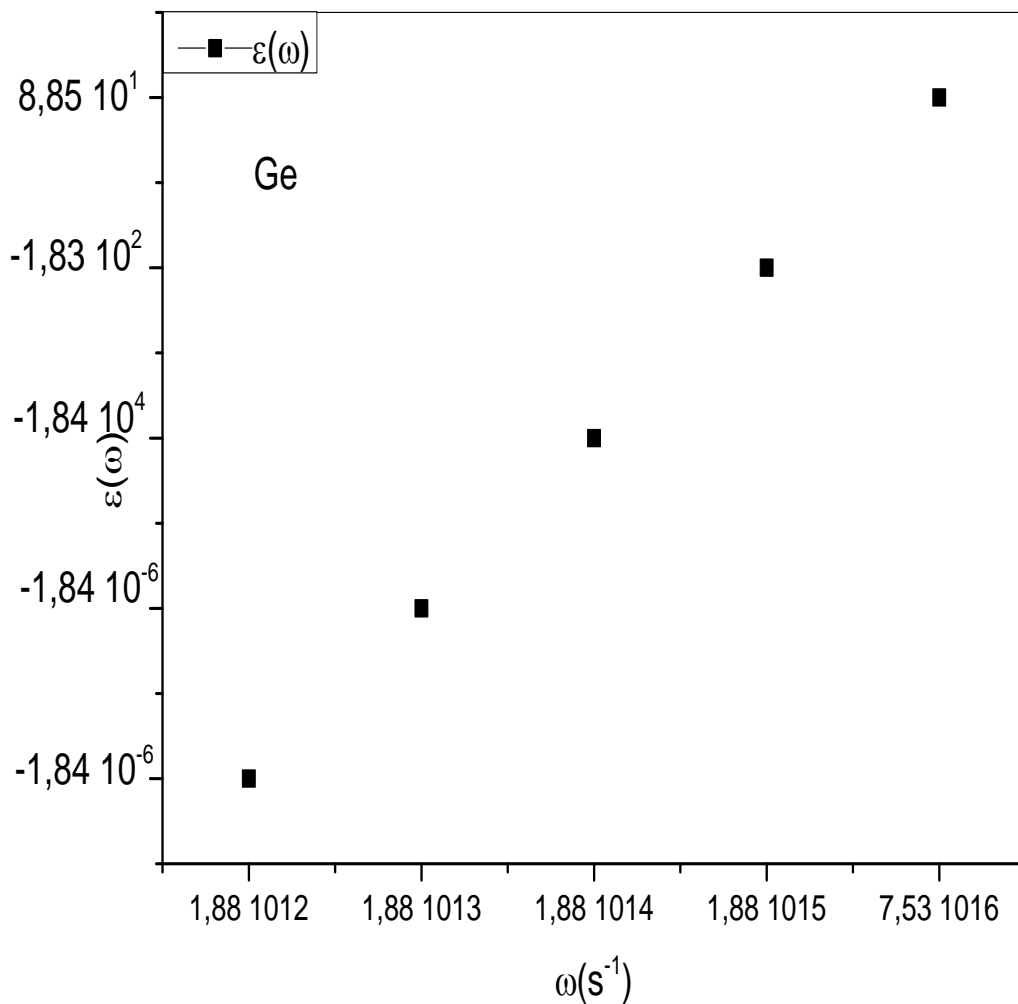


Figure IV-9 : La variation de la fonction diélectrique de Ge en fonction de ω pour fortes concentrations.

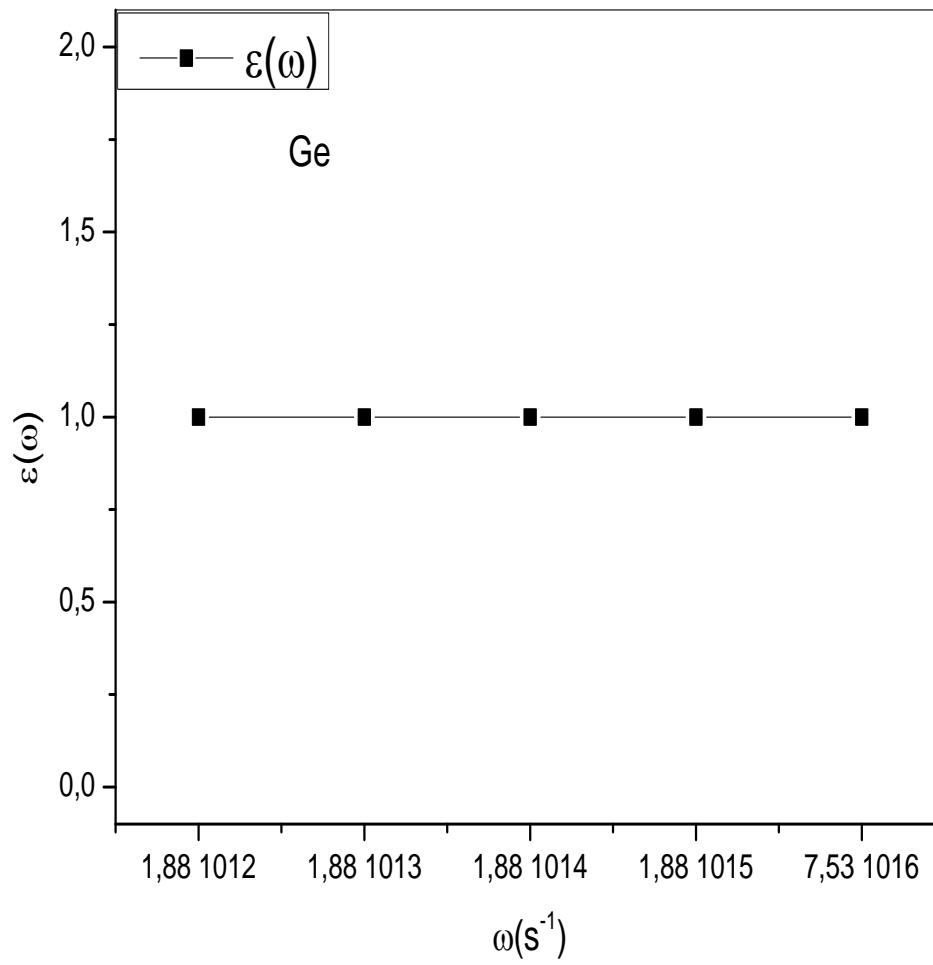


Figure IV-10 : La variation de la fonction diélectrique de Ge en fonction de ω pour faibles concentrations.

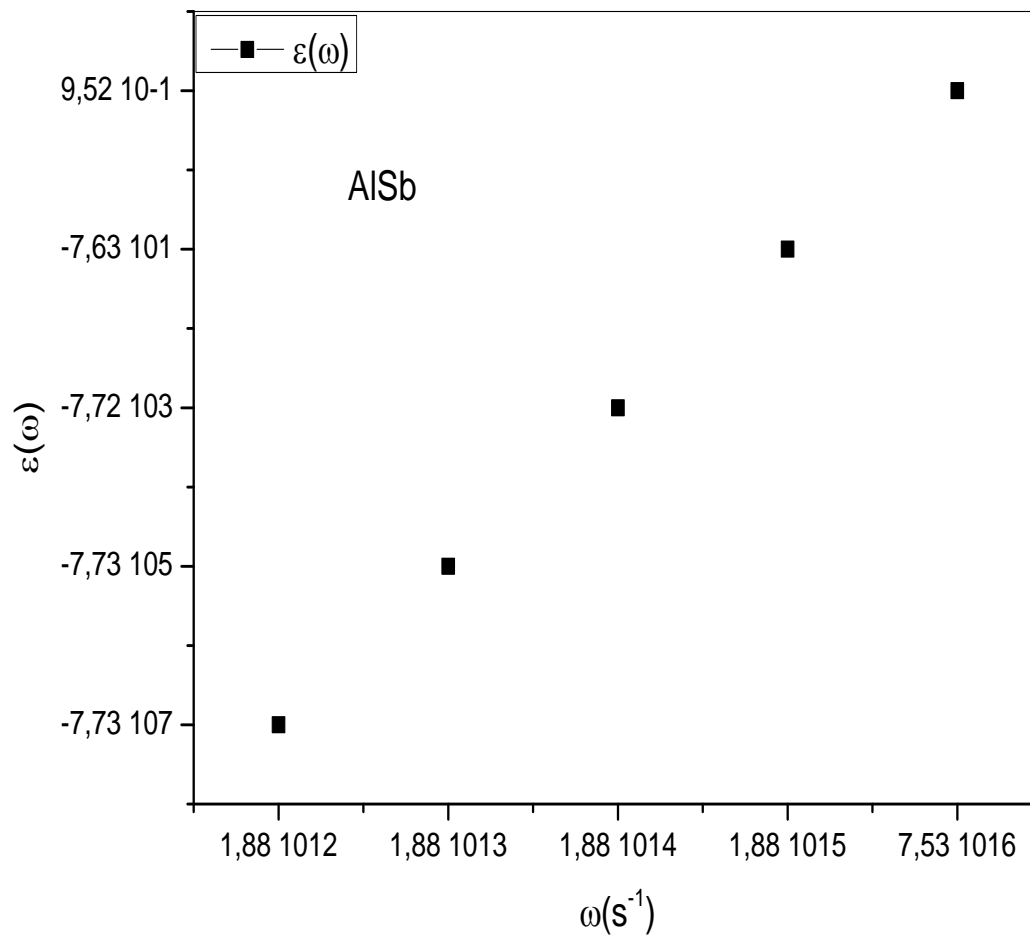


Figure IV-11 : La variation de la fonction diélectrique de AISb en fonction de ω pour fortes concentrations.

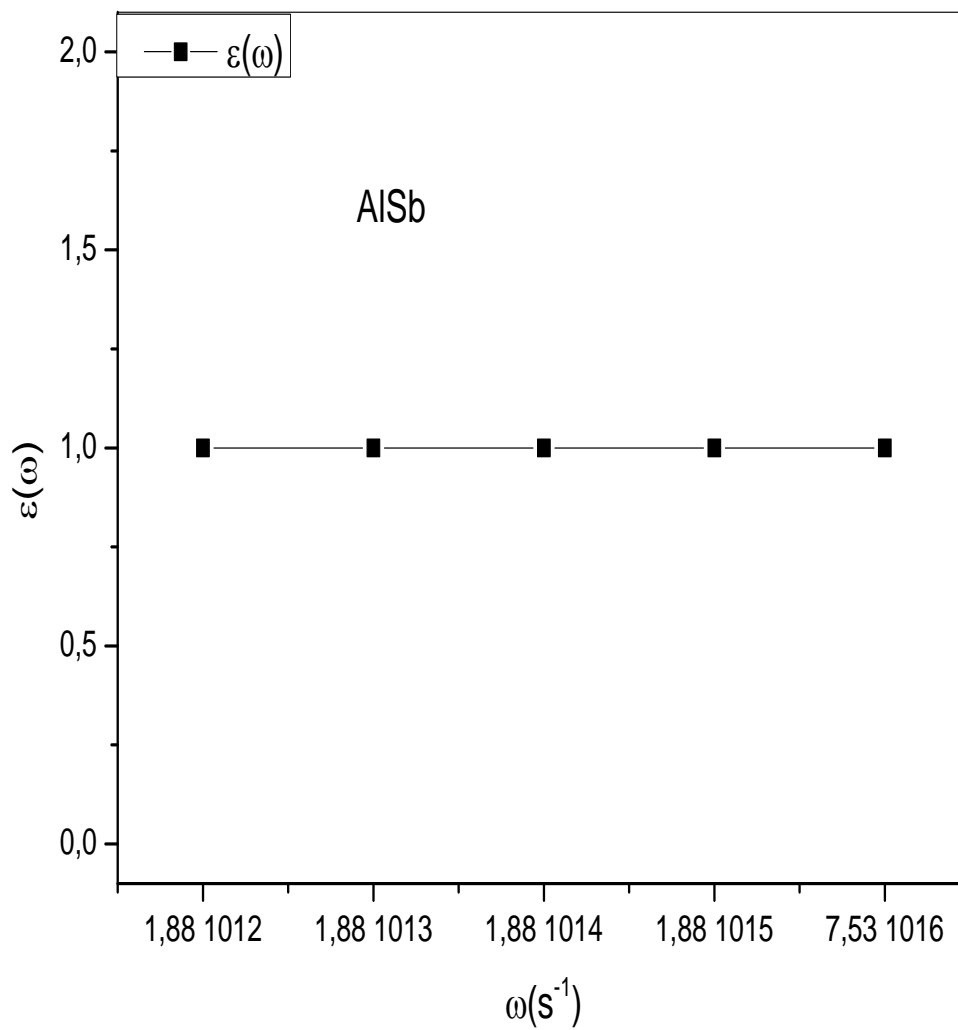


Figure IV-12 : La variation de la fonction diélectrique de AISb en fonction de ω pour faibles concentrations.

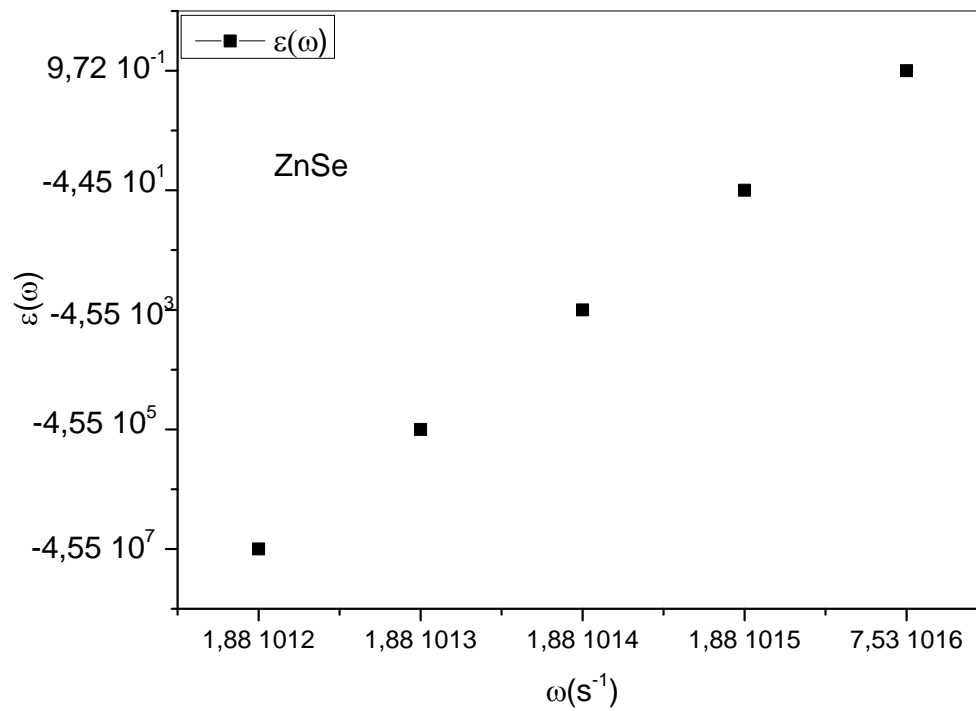


Figure IV-13: La variation de la fonction diélectrique de ZnSe en fonction de ω pour fortes concentrations

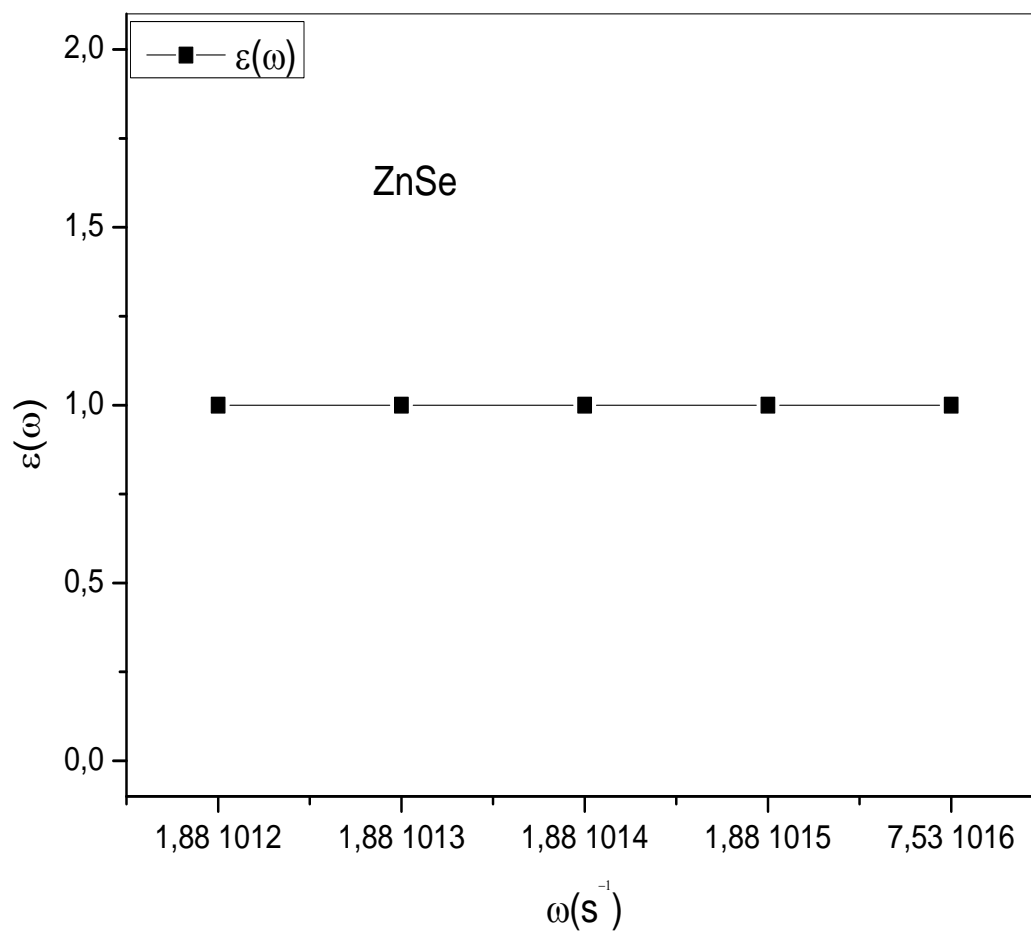


Figure IV-14: La variation de la fonction diélectrique de ZnSe en fonction de ω pour faibles concentrations



Conclusion Général

Conclusion Générale

Conclusion Générale

En conclusion, dans ce travail nous avons étudiés les propriétés physiques des plasmons dans les semi-conducteurs (Ge, α -Sn, AlSb, InP, InAs, GaAs, ZnTe, CdTe, CdSe, ZnSe), dans la phase zinc blende pour ce faire nous avons utilisé principalement la méthode empirique de pseudo potentiel.

L'objectif principal est l'étude de la variation des paramètres optiques des plasmons en fonction de la fréquence et de la concentration des électrons. Pour cela nous avons calculé les facteurs de forme, les énergies des bandes interdites directes et indirects. Les masses effectives des électrons ont été également déterminé en utilisons une relation quadratique entre l'énergie de l'électron et le vecteur

D'onde au voisinage du minimum de la bande de conduction.

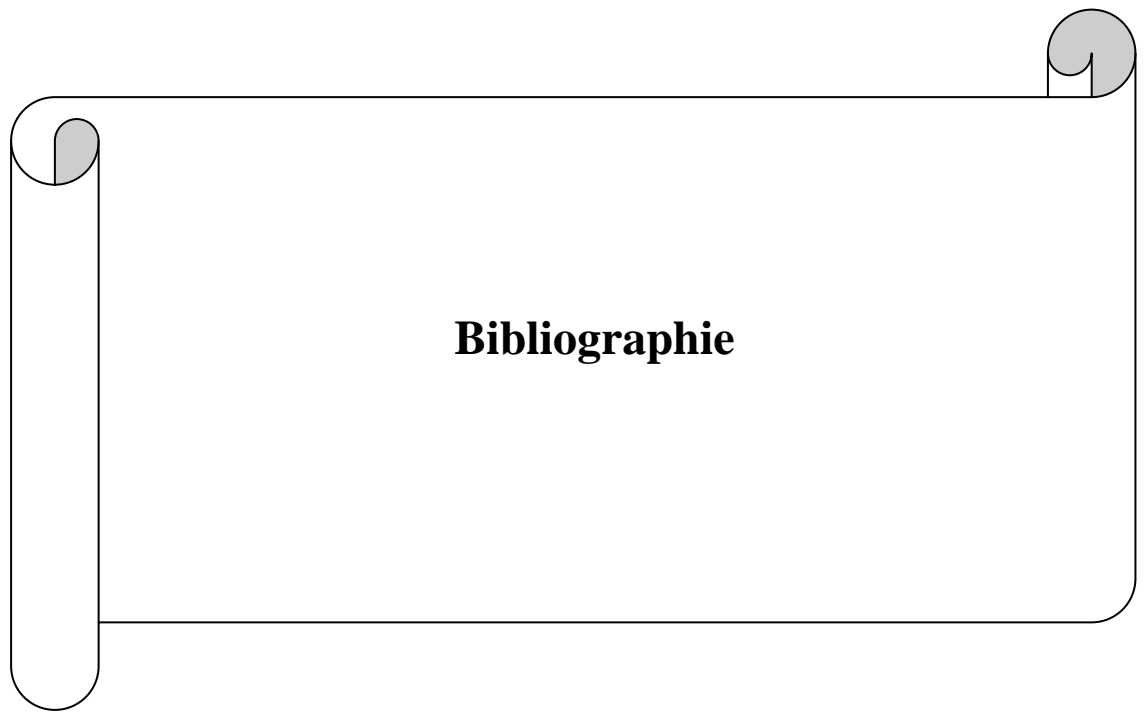
On a calculé aussi les fréquences, les énergies du plasmons ainsi que les fonctions diélectriques dans le domaine optique.

Nos résultats ont montré que les masses effectives et les gaps énergétiques obtenus dans on accord avec ceux de l'expérience reporté dans la littérature.

Les valeurs des fréquences et des énergies des plasmons sont aussi consistante avec celle de la littérature.

La variation de la fonction diélectrique en fonction de la fréquence dans le domaine optique est presque linéaire et monotone pour les fortes concentrations des électrons en volume.

Les valeurs de la fonction diélectrique obtenue pour ces concentrations sont négatives, cela a été explique ne se propagent pas lorsque $\epsilon(\omega)$ est négative, par conséquent ces ondes sont totalement réfléchis par le milieu de semi-conducteurs étudié, par contre pour les faibles concentrations la fonction diélectrique ϵ est trouvé presque constante est tend vers l'unité suggérant ainsi une propagation des ondes électromagnétiques.



Bibliographie

- [1]: Dimitri galayko. Unité d'enseignement Elec-info, 2005.
- [2]: Fadi Aldeek. Université de Nancy, 2010.
- [3]: Myriam Protiere. L'Université JOSEPH FOURIER, 2007.
- [4] E. Prodan, C. Radloff, N. J. Halas et P. Nordlander; Report A Hybridization Model for the Plasmon Response of Complex Nanostructures; Science 17 October 2003 : Vol. 302 no. 5644 pp. 419-422; DOI : 10.1126/science.1089171(Résumé).
- [5] Assefa, Solomon; Xia, Fengnian; Vlasov, Yurii A. (2010). "Reinventing germanium avalanche photodetector for nanophotonic on-chip optical interconnects". Nature 464(7285): 80.doi:10.1038/nature08813.
- [6] "Research Discovery By Ethiopian Scientist At IBM at Tadias Magazine". Tadias.com. Consulté 2010-03-15.
- [7] : Francis Lévy, " physique et technologie des semi-conducteurs ", édition première, 1995, lausanne.
- [8] : Dimitri Galayko «Introduction des composants à semi conducteur», cours ; 2005; Unité Enseignement Elec -info pour master ACSI à l'UPMC.
- [9,10] : Mme BAGHDADI Nawel née : Korti, Evolution du paramètre exciton de Bohr en fonction des propriétés Optoélectronique des semi-conducteurs III-V, (2013).
- [11] : CENTRE REGIONAL DES METIERS DE LEDUCATION ET DE FORMATION (2014/2015)]
- [12] : A Chovet et P. Masson ; Physique des semi-conducteurs.
- [13]: Marius Grundman: Graduate texts in physics. The physique of semi-conducator. An Introduction Including Nanophysics .second édition .springer.
- [14] BECHIRI. Abderrachid. Effet du des ordres et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V. thèse doctoral .université mentouri .UMC (ALGERIE). 2006 .
- [15] : DR. abdelhafid.souici, Laboratoire de Physico -Chimie des Matériaux et Catalyse Faculté des Sciences Exactes Université de Béjaia, Algérie.

- [16] :E. Mooser « Introduction à la physique de solide », 1Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes(1993).
- [17,18] : Krauss and Wise F W, Phys. Rev. B 55, 9860. 1997 ; Wise F W (2000) Acc. Chem. Res. 33, 773.
- [19] : E. Mooser « Introduction à la physique de solide », 1Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes(1993)
- [20] : Jean Pierre Mercier, Wilfried Kurz, Gérald Zambelli, " Introduction à la science des matériaux ",1999.
- [21] : Alain Ricaud, Convertisseurs photovoltaïques, 2007.
- [22] : Malika LABIDI, Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires,(2011).
- [23] : Henry Mathieu, physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Dunod, ISBN 2 10 005654 9, Paris. (2001).
- [24]: Dr. A.P. Vajpeyi, Indian Institute of Technology Guwahati, India, Department ofPhysics.
- [25] : Abderrachid BECHIRI ;docteur d'état ; EFFETS DU DESORDRE ET DU SUBSTRAT SUR LA STRUCTURE ELECTRONIQUE DANS LES ALLIAGES SEMI-CONDUCTEURS III-V ; UNIVERSITE MENTOURI-CONSTANTINE ;2006.
- [26]: John H.Davies, The physics of low-dimentional semiconductors, combridge University Press,(1998).
- [27]: A.G.Milnes and D.L.Feucht, Heterojunctions and Metal-Semiconductors Junctions, Academic Press, (1972).
- [28] : H.Mathieu, physique des semi-conducteurs et les composantes électroniques, Ed. Masson(1998).
- [29] :S. Bounab, thèse de magister .université de Constantine, Algeria2002.
- [30]: Warren E. Pikett, Computer Physics Repport 9, 115 (1989).
- [31] : O.K.Andresen, Phys.Rev.B12,3060(1975).
- [32] : H.Mathieu, physique des semi-conducteurs et les composantes électroniques, Ed. Masson (1997).
- [33]: H. J. Monkhorst, J.D. Pack, *Phys. Rev. B*, 13, 5188 (1976).
- [34]: Peter Y.YU, Manuel Cardona. Fundamentals of semiconductors Physics and materials properties.Springer (2001).

- [35]: M. L. Cohen, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, SpringerVerlag (1988).
- [36] : Bounab Sabrina. *Etude des états électroniques et positronique de l'alliage AlInN dans la phase Zinc-Blinde* (2002).
- [37] : Baaziz Hakim. *Étude des propriétés électronique et structurales des alliages semi-conducteurs penternaires Ga InP SbAs*. Thèse d'état en sciences des matériaux. Université de Batna (2006).
- [38] :A. Chebihi, E.M. Oualim, M. Harmouchi, J.P. Vigneron, P. Lambin. *Propriétés optiques et électroniques du silicium et leurs applications dans le transfert radiatif*. Phys. Chem. News 3 (2001).
- [39] : U. Von Barth, C.D. Gelatt. Phys. Rev. B, 21, p 2222, (1980), W. E. Pickett, *Pseudopotential Methods in Condensed Matter Applications*. Elsevier, Science Publishers.
- [40]: J.C. Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. 116, 287 (1959).
- [41]: H. Nara and T. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn. 41, 1429 (1976).
- [42]: J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 32, 674 (1974); W. A. Harrison, Phys. Rev. B14, 702 (1976).
- [43]: H. Nara and T. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn. 41, 1429 (1976).
- [44] : Charles Kittel (trad. Nathalie Bardou, Évelyne Kolb) *Physique de l'état solide «Solid state physics »*, 1998.
- [45] :Akira Ishihara, *Electron Liquids*(Springer-Verlag).
- [46] : H.J.Schulz, Phys.Rev.Lett.71,1864(1993).
- [47] :Shigeru Toyama, Narumasa Doumae, Atsumu Shoji, Yoshihito Ikariyama; *Design and fabrication of a waveguide coupled prism device for surface plasmon resonance sensor* ; *Sensors and Actuators B:Chemical*, Volume 65, Issues 1-3, 30 June 2000, Pages 32-34 (Résumé).
- [48] :Pr. Welter, *Matériaux Diélectriques*.
- [49] :Badr-Eddine Nabil B RAHIMI ,thèse docteur en physique *Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc*, université aboubakar belkaid –Tlemcen,(2013).
- [50] :P.J.L.Hervé, L.K.J.Vandame, *Infrared Phys. Technol.*35(1994) 609.
- [51] :R.R.Reddy, S.Anjaneyulu, *Phys.Stat .Sol.(b)*174(1992) K91.
- [52] :N.M.Ravindra.P.Ganapathy, *J.Coi, Infraredphys, Technol.* 50(2007)21.

[53] :Tsutomu Ishihara, Tsuyoshi Arakawa; Detection of cytochrome C by means of surface Plasmon resonance sensor; Sensors and Actuators B : Chemical, Volume 91, Issues 1-3, 1 June 2003, Pages 262-265 (résumé).

[55] : C. Kittel, Phys de l'état solide, 5^{ème} édition, 1976.

[56] : W. Nakwaski, Physica B 210 (1995) 1.

[57]. (J.R. Cheikowsky ; T.J. WAGENER ; A. Jin, phys. Rev. B 40 (1989)).

Résumé

Les plasmons est un sujet important dans le domaine des études photovoltaïques qui a de multiples propriétés et utiles dans les semi-conducteurs qui nous permettent de les utiliser dans des applications électroniques optiques.

Dans cette étude, nous avons étudié les propriétés physiques des plasmons dans les semi-conducteurs, y compris les simples, et du groupe **III-V et II-IV**.

Nous avons mesuré les valeurs d'énergie dans cette bande et déterminé la structure cristalline et la masse effective de l'électron pour le **Ge, AISb, ZnSe**.

Les résultats obtenus sont :

Avec la variation de la concentration d'électrons en volume La fonction d'isolement en forte concentration augmente avec l'augmentation de la valeur de la tension ω . Il est établi en concentrations faibles et s'approche de l'unité (1). L'énergie du plasmon est forte en concentrations élevées et faible en faibles concentrations. Les résultats obtenus sont importants pour les études dans ce domaine.

ملخص:

البلازمونات هو موضوع هام في دراسات المجالات الضوئية والتي لها خواص متعددة ومفيدة داخل النواقل والتي تمكننا من استخدامها في تطبيقات الالكترونيات الضوئية. قمنا في هذا العمل بدراسة الخواص الفيزيائية للبلازمونات في أنصاف نواقل منها البسيطة ومنها من المجموعة **III-V و II-IV**.

قمنا بقياس قيم الطاقة في هذه العصابة وتحديد البنية البلورية والكتلة الفعالة للإلكترون لكل من **Ge, AISb, ZnSe**. اهم نقطة هي دراسة الخصائص الفيزيائية لأنصاف النواقل في البلازمونات هي قياس تواتراتها وأطوالها الموجية وطاقتها.

النتائج المتحصل عليها مع التغيير في تركيز الالكترونيات في الحجم تبين ان دالة العزل في التراكيز العالية تتزايد مع تزايد قيمة التوتر ω . وثبتت في التراكيز الضعيفة وتقترب للوحدة (1). طاقة البلازمونات قوية في التراكيز العالية وضعيفة في التراكيز الضعيفة. والنتائج المتحصل عليها مهمة للدراسات في هذا المجال.

Abstract :

Plasmons is an important subject in the field of photovoltaic studies that has multiple properties and useful in semiconductors that allow us to use them in optical electronic applications. In this study, we studied the physical properties of plasmons in semiconductors, including simple, and group **III-V and II-IV**.

We measured the energy values in this band and determined the crystal structure and the effective mass of the electron for **Ge, AISb, ZnSe**.

The results obtained are:

With the variation of the concentration of electrons in volume The isolation function in high concentration increases with the increase of the value of the voltage ω . It is established in low concentrations and approaches unit (1). Plasmon energy is high in high concentrations and low in low concentrations. The results obtained are important for studies in this field.