



N° d'ordre :/2016

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

Université Mohamed Boudiaf - M'sila

Faculté des Sciences

Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

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

Par

BENTHAMEUR MOURDJANA

THEME

**Etude des propriétés dynamiques du réseau et leurs dépendances
en pression des semi-conducteurs binaires IV, III-V, II-VI.**

Soutenue le : 04/06/2016

Devant le jury composé de :

Promotion Juin 2016

REMERCIEMENTS

Au terme de cette humble recherche, qui fut intense et intensifiée.

Mes remerciements s'adressent tout d'abord au mon directeur de thèse, Professeur Nadir Bouarissa, maître de conférence à l'université de Mohamed Boudiaf-M'sila.

Ses idées, ses conseils et surtout la confiance qu'il m'a témoignée m'ont permis de mener à bien ces recherches. Je remercie donc aussi bien le scientifique que l'homme.

Je remercie aussi très vivement Fadila MEZRAG, Nadir Bouarissa et S.SAIB professeurs à l'université de M'sila.

J'exprime ici, mes sincères remerciements à toute l'équipe du Département du physique.

Dédicaces

A mon fils wassim

A mes parents

A mon mari

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS.....	i
DEDICAES.....	ii
TABELE DES MATIÈRES.....	iii
INTRODUCTION GENERALE.....	1
CHAPITRE I : Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs	
I.1. Introduction.....	3
I.2. Définition d'un semi-conducteur.....	3
I.2.1. La conductivité électrique des semi-conducteurs.....	4
I.2.2. La notion de bandes d'énergie dans un semi- conducteurs.....	4
I.2.3. Bande interdite (gap énergétique).....	5
I.2.4. Notion de gap direct et indirect.....	6
I.2.4.1. Gap direct.....	6
I.2.4.2. Gap indirect.....	6
I.2.5. La conduction électrique des électrons et des trous.....	6
I.2.6. Les différents types des semi-conducteurs.....	7
I.2.6.1. Semi-conducteur intrinsèque.....	7
I.2.6.2. Semi-conducteur extrinsèque.....	7
I.2.6.3. Les dopages des semi-conducteurs.....	7
I.2.6.3.1. Les semi-conducteurs extrinsèque dopé n.....	7
I.2.6.3.2. Les semi-conducteurs extrinsèque dopé p.....	8
I.3. Conclusion.....	9
CHAPITRE II : Dynamique du réseau et effet de la pression	
II.1. Introduction.....	10
II.2. Généralités sur les semi-conductures.....	10
II.2.1. Définition de phonon	10

II.2.2. Définition de matériaux composites.....	11
II.3. L'approximation harmonique	11
II.4. Dynamique des réseaux.....	11
II.5. Vibrations du réseau : les phonons.....	15
II.6. Les hypothèses fondamentale.....	17
II.7. Modes normaux d'un réseau de Bravais monoatomique à une dimension	20
II.8. L'effet de la pression sur les semi-conducteurs.....	20
II.1. Définition.....	20
II.2. L'effet de la pression sur la géométrie de la structure.....	20
II.3. L'effet de la pression sur les niveaux électroniques.....	21

Chapitre III : Résultats et discussion

III.1. Propriétés optiques et vibrationnelles.....	23
III.1.1. Propriétés structurales de composés binaires IV, III-V, II-VI et effet de la pression.....	23
III.2. Propriétés vibrationnelles	27
III.3. Propriétés dynamique de composés binaires	28
III.4. Propriétés optiques et diélectriques.....	29
CONCLUSION GÉNÉRALE.....	43
Références bibliographiques.....	44

Résumé

Liste des Figures et des Tableaux

Introduction générale

Introduction générale :

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le silicium. Ce dernier a été l'un des premiers matériaux utilisés (avec le germanium) pour fabriquer des composants électroniques.

Dans les années 1960, une nouvelle famille est apparue, celle des matériaux III-V comme les alliages binaires tel que le GaAs, ternaires comme le InGaP, quaternaires comme le AlGaAsP. Les composants fabriqués à partir de ces semi-conducteurs, surtout les composés binaires comme GaAs qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications dans le domaine de l'optoélectronique et microélectronique.

En générale, les composés semi-conducteurs binaires sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre du réseau, le gap énergétique, les constantes optiques et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle important dans les composants optoélectronique.

Une connaissance précise de la structure de bandes du matériau étudié est nécessaire pour l'évaluation de son domaine d'application, les transitions directes (l'absorption et émission spontanée, émission stimulée d'un photon) et les transitions indirectes en fonction de la composition sont particulièrement d'une importance principale pour l'étude et la fabrication des composants optoélectronique bien désiré.

Comme les matériaux binaires sont principaux, par leurs larges applications dans les cellules photovoltaïques, les photodiodes, et les dispositifs optoélectroniques tels que les Diodes Electro Luminescentes (DEL) ou Diode laser (DL), les chercheurs veulent progresser ces composants en exécutant des nouvelles études afin d'améliorer leurs propriétés.

La possibilité qu'ont les ions d'un métal ou d'un isolant de se déplacer autour de leur position d'équilibre est un élément qui doit être pris en compte dans la description des propriétés d'un solide.

Les vibrations des ions sont essentielles dans la détermination des propriétés d'un solide qui ne sont pas dominées par la contribution des électrons. Les vibrations du réseau participent au transport de l'énergie dans un solide.

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

Le but de ce travail, est d'avoir une détermination de l'effet de la pression sur les propriétés dynamique structurale et la structure pour les éléments : Si, InSb, InAs, GaAs, CdTe, ZnSe.

Notre travail est organise comme suit : dans le premier chapitre nous présenterons une généralité sur les semi-conducteurs binaires et leurs propriétés. Le deuxième chapitre sera destiné à introduire les composants semiconductures, et les propriétés dynamique du réseau et l'effet de la pression. Nous exposons et discutons nos résultats de calcul dans le troisième chapitre.

Nous terminerons par une conclusion générale

CHAPITRE I

Notions fondamentales sur la physique des semiconducteurs

Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs

I -1) Introduction

Les technologies semi-conducteurs ont connues la plus forte progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement des économies modernes et cela, grâce à leur propriétés physiques curieuses qui sont connues depuis longtemps.

Parmi ceux -ci, les matériaux semi-conducteurs des groupes III-V et II-VI de la classifications de Mendeleïev, qui ont un champ d'application très élargi.

Ces matériaux sont actuellement utilisés dans plusieurs composants électroniques très importants, ils jouent un rôle majeur dans les applications hyperfréquences, l'électronique de puissance mais surtout dans le domaine de l'optoélectronique .

Les alliages semi-conducteurs sont aussi considérés comme une classe importante des matériaux, grâce à la richesse de leurs structures électroniques et leurs propriétés physiques qui peuvent être ajustées et contrôlées, pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré.

Ils ont trouvé une large application dans les dispositifs optiques et électroniques. Ces dernières années, la littérature sur les propriétés fondamentales de ces matériaux a rapidement augmenté, beaucoup de progrès et de découvertes majeurs ont été réalisés.

Pour une bonne maîtrise de ces composants optoélectroniques, il est évidemment nécessaire, d'avoir une connaissance des propriétés électriques de ces matériaux semi-conducteurs.

Ils sont similaires aux isolants, à la différence près de leur bande interdite qui n'est pas plus grande, c'est de ce fait, que découle la propriété la plus caractéristique d'un semi-conducteur [1].

I-2) Définition d'un semi-conducteur

Un semi-conducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductivité électrique sont intermédiaires entre celles des isolants et des conducteurs, elles varient sur plusieurs ordres de grandeur, sous l'effet de :

- La température,
- L'éclairement,
- La présence d'impuretés (dopage) [2].

I-2-1) La Conductivité électrique dans les semi-conducteurs

Un semi-conducteur sera isolant à une température de 0°K, contrairement à un métal, alors qu'à température plus élevée, il devient un conducteur électronique par excitation thermique, comme c'est indiqué sur le schéma ci-contre [3] :

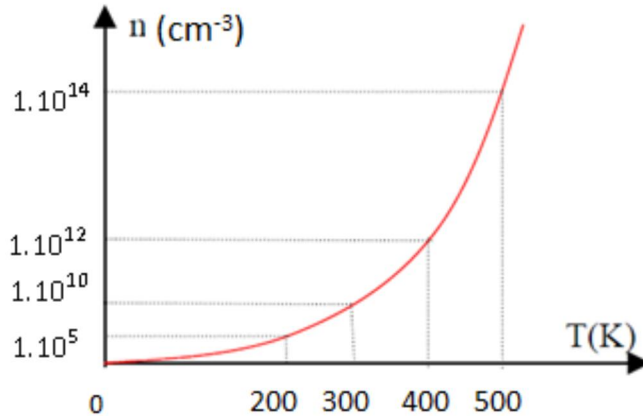


Figure I-1) L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium).

Un semi-conducteur peut transporter de l'électricité et devenir conducteur, c'est cette propriété qui est à la source de la forte réactivité des semiconducteurs leur permette , en fait ,d'être d'un intérêt technologique.

Pour mieux comprendre cette dynamique des électrons responsable du phénomène de conduction dans un semiconducteur, on fait appel à la théorie de bandes, qui décrit le comportement des électrons, dans le cas ou une excitation leur permet de devenir libres et participent à la conduction.

I-2-2) La notion de bandes d'énergie dans un semi-conducteur

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé a l'aide de la théorie des bandes : modèle quantique en physique des solides, qui détermine les énergies permises des électrons dans un solides et permet de comprendre la notion de conductivité électrique, elle est issue de la théorie des orbitales moléculaires.

Ce modèle stipule qu'un électron peut prendre des valeurs d'énergie qu'on les nomme bandes permises, séparées par d'autres bandes appelées bandes d'énergies interdites.

Les bandes de faible énergie pleines, correspondant à des électrons participant au maintien de la structure cristalline ; ce sont des bandes dites de valence.

Les bandes de haute énergie vides, correspondant à des électrons participant à la conduction électrique, sont appelées bandes de conduction [4].

I-2-3) Bande interdite (gap énergétique)

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

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

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction.

Alors que pour les semi-conducteurs, cette bande est suffisamment petite pour qu'une excitation adéquate, permette aux électrons de la bande de valence de rejoindre la bande de conduction, ainsi le semi-conducteur peut transporter de l'électricité et donc devenir conducteur.

Par contre dans les métaux, on rencontre un chevauchement des bandes, les électrons peuvent passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circulent dans tout le solide [5].

Une structure de bandes comparative des trois types de matériaux métal, Semi-conducteur et isolant est représentée sur la figure (1-2).

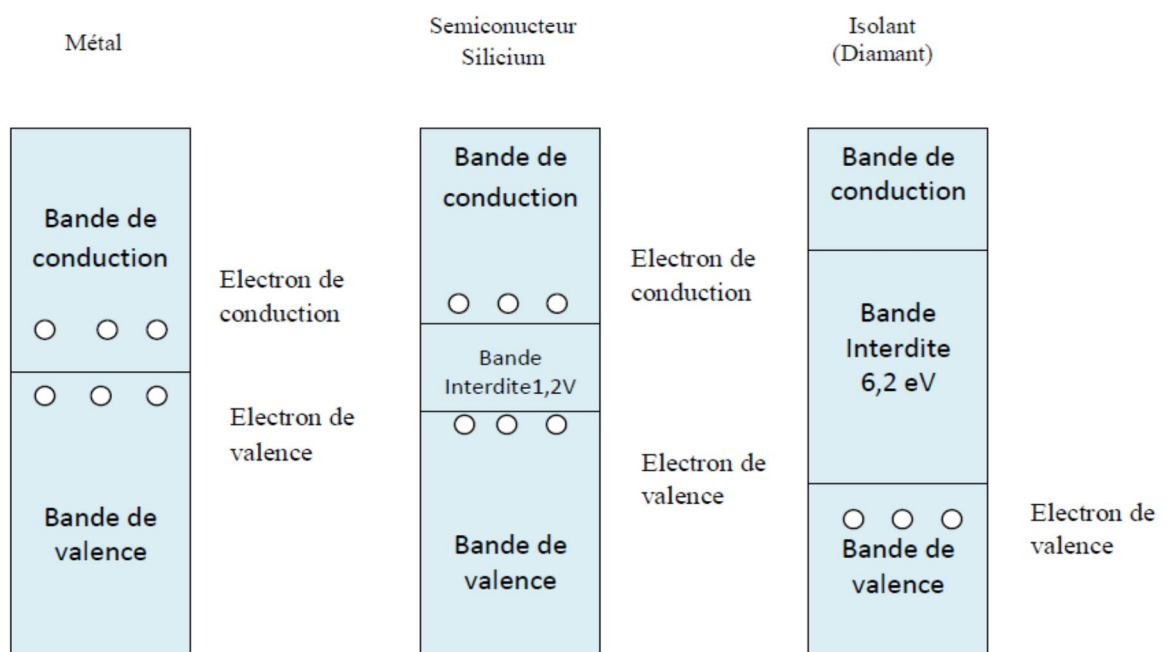


Figure I-2) Les structures des bandes énergétiques: Métal, semi-conducteur, isolant.

I-2-4) Notion de gap direct et de gap indirect

I-2-4-1) Gap direct: Un semi-conducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k [6].

I-2-4-2) Gap indirect : Un semi conducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k . La distinction entre les semi conducteurs à gap direct et indirect est très importante notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi conducteurs à gap direct que dans les semi conducteurs à gap indirect [6].

I-2-5) La conduction électrique des électrons et des trous

Le fait de fournir aux électrons de valence d'un semiconducteur, une énergie suffisante, capable de briser une liaison de valence et de créer ainsi des électrons mobiles, ces derniers peuvent avoir par la suite une transition vers la bande de conduction, les états vacants ainsi créés dans cette bande de valence, sont appelés trous, ils sont dus alors à l'interaction des électrons avec le réseau cristallin [2].

Sous l'action d'un champ électrique ou magnétique, tous les électrons meurent dans une direction faisant en sorte que les trous bougent dans la direction opposée. La neutralité du matériau impose que les trous et les électrons soient identiques [7].

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

On peut dire que, la conduction électrique dans un semi-conducteur a pour origine :

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

La répartition de ces porteurs est donnée sur le schéma si dessous [8]:

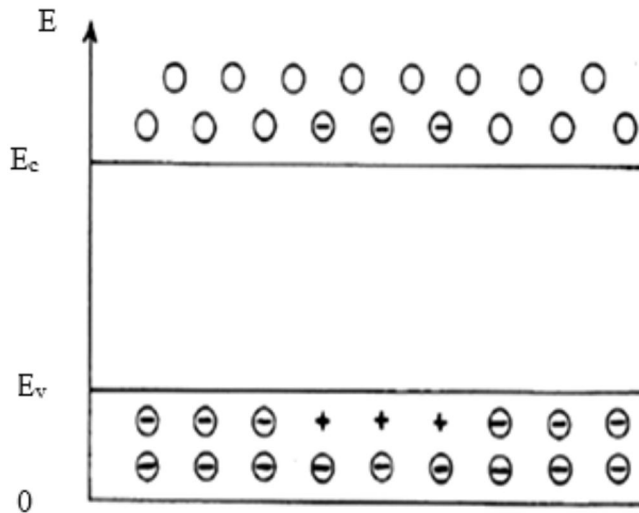


Figure I-3) Répartition des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence à la température T . (Le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre des trous dans la bande de valence).

Afin de comprendre le phénomène de conduction dans un semi-conducteur, nous devons définir quelques termes importants pour la description des semi-conducteurs.

I-2-6) Différents types de Semi conducteurs

I-2-6-1) Semi conducteur intrinsèque

Un semi conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour 10¹³ atomes de l'élément semi conducteur) [6].

I-2-6-2) Semi conducteur extrinsèque

Un semi conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semi conducteur intrinsèque (un atome pour 10⁵ atomes de l'élément semi conducteur) [6].

I-2-6-3) Les dopages des semi-conducteurs

I-2-6-3-1) dopage de type n:

Considérons par exemple les semi conducteurs tétravalents tels que Si ou Ge. Ils cristallisent dans une structure où chaque atome est relié à quatre atomes voisins par des liaisons covalentes. Introduisons un atome ayant cinq électrons de valence (phosphore, arsenic antimoine...). Il prend la place d'un atome du cristal. Parmi les électrons de l'impureté, quatre participeront aux liaisons avec les voisins et le cinquième restera célibataire. L'atome d'impureté est associé un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui se situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semi conducteur est dit de type n [6].

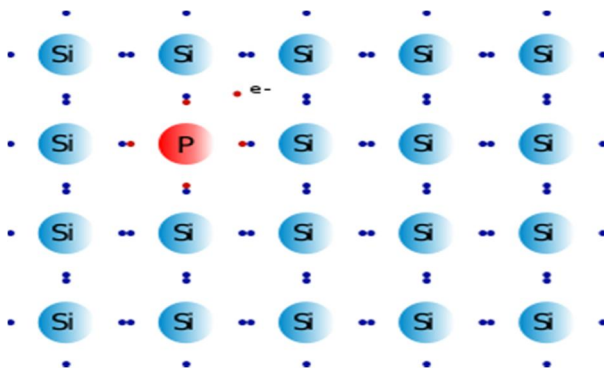


Figure I-4) Dopage de type n [9].

I-2-6-3-2) dopage de type p :

Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore aluminium ou galium). Cet atome ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semi-conducteur est dit de type p [6].

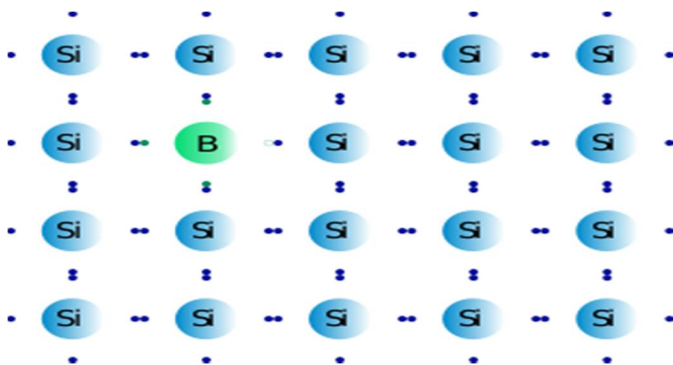


Figure I-5) Dopage de type p [9].

I.3. Conclusion

Ces dernières années, les matériaux semi-conducteurs ont reçu beaucoup d'attention à cause de leur efficacité dans diverses applications intéressantes, surtout en optoélectronique.

Chaque matériau possède ses propres propriétés permettant de le caractériser. La connaissance des propriétés physiques et du comportement de ces matériaux est évidemment essentielle pour l'évaluation de leur domaine d'application [10].

CHAPITRE II

Dynamique du réseau et effet de la pression

II-1) Introduction

La possibilité qu'ont les ions d'un métal ou d'un isolant de se déplacer autour de leur position d'équilibre est un élément qui doit être pris en compte dans la description des propriétés d'un solide. De façon générale on peut dire que :

- les vibrations des ions sont essentielles dans la détermination des propriétés d'un solide qui ne sont pas dominées par la contribution des électrons (chaleur spécifique a des températures $T \geq 10$ K, dilatation thermique des solides, fusion) .
- les vibrations du réseau participent au transport de l'énergie dans un solide (Conductivité thermique des isolants, propagation des ondes acoustiques).
- les vibrations permettent de comprendre la variation du temps de relaxation T des électrons introduit en relation avec les phénomènes de transport dans les métaux, en fonction de la température.
- l'effet des vibrations du réseau sur l'interaction effective entre deux électrons d'un métal est _a la base de la compréhension de la supraconductivité.
- les vibrations du réseau jouent un rôle dans la réponse du solide en présence d'une radiation (rayons X, lumière visible, neutrons).

Nous étudierons les notions de base de la dynamique du réseau au chapitre 2 et examinerons son influence sur les propriétés thermiques (en particulier la chaleur spécifique) [1].

II-2) Généralités sur les semiconductures :

II-2-1) Définition de phonon :

En physique de la matière condensée, un **phonon** désigne un quantum d'énergie de vibration dans un solide cristallin : lorsqu'un mode de vibration du cristal de fréquence définie ν cède ou gagne de l'énergie, il ne peut le faire que par paquets d'énergie $h\nu$, h étant la constante de Planck. Ce paquet est considéré comme une *quasi-particule*, à savoir une particule *fictive* appelée phonon. Le cristal est alors réputé échanger des phonons lorsqu'il perd ou gagne de l'énergie. Le concept permet une analogie avec la lumière qui possède des propriétés similaires : elle se manifeste tantôt comme une onde, tantôt comme un paquet d'énergie $h\nu$, qui correspond à une particule élémentaire appelée photon. Le phonon est une notion de mécanique quantique faisant appel au concept de dualité onde-corpuscule : selon le contexte expérimental il peut se manifester soit comme une onde, soit comme un paquet élémentaire [2].

II-2-2) Définition de matériaux composites :

Un **matériau** désigne toute matière utilisée pour réaliser un objet au sens large. Ce dernier est souvent une pièce d'un sous-ensemble. C'est donc une matière de base sélectionnée en raison de propriétés particulières et mise en œuvre en vue d'un usage spécifique. La nature chimique, la forme physique (phases en présence, granulométrie et forme des particules, par exemple), l'état de surface des différentes matières premières, qui sont à la base des matériaux, leur confèrent des propriétés particulières. On distingue ainsi quatre grandes familles de matériaux.

En science des matériaux, par exemple, « matériau » est un terme générique employé dans le sens de matière, substance, produit, solide, corps, structure, liquide, fluide, échantillon, éprouvette, etc., et désignant notamment l'eau, l'air, et le sable (dans des tableaux de caractéristiques) ; un matériau viscoélastique est souvent qualifié de « fluide à mémoire » [3].

II-3) L'approximation harmonique :

Cette approximation consiste à faire l'hypothèse que le mouvement des noyaux reste confiné au voisinage de leur position d'équilibre \vec{R}_I^0 . Alors l'énergie $E(\vec{R})$ du système peut être développée au second ordre en fonction des composantes cartésiennes des déplacements atomique $\vec{u}_{I\alpha}$:

$$E(\vec{R}) = E_0 + \sum_I \left. \frac{\partial E(\vec{R})}{\partial u_{I\alpha}} \right|_{\vec{R}=\vec{R}_I^0} \vec{u}_{I\alpha} + \sum_{I,J} \vec{u}_{I\alpha} \left. \frac{\partial^2 E(\vec{R})}{\partial u_{I\alpha} \partial u_{J\beta}} \right|_{\vec{R}=\vec{R}_I^0} \vec{u}_{J\beta} \quad (\text{II-1})$$

avec $\vec{u}_{I\alpha} = \vec{R}_I - \vec{R}_I^0$, est le vecteur de déplacement de l'atome I par rapport à sa position d'équilibre dans la direction α [4].

II-4) Dynamique des réseaux :

Depuis la fin des années soixante, avec les travaux de Cicco et Johnson, et ceux de Pick, Cohen et Martin, il est à notre que les constants de forces harmonique des cristaux peuvent se déterminer par leur réponse électronique linéaire statique. De ce fait, L'approximation essentielle, qui permet de découpler les vibration atomique par les degrés électroniques de liberté dans le solide, est l'approximation adiabatique de Born Oppenheimer. Ainsi, en s'appuyant sur cette approximation, les distorsions du réseau dans un cristal, associées à un phonon, peuvent être vues comme une perturbation statique agissant sur les électrons.

Le calcul de la géométrie d'équilibre et des propriétés vibrationnelles d'un système s'obtient à partir de la première et la seconde dérivée de l'énergie de l'état fondamental du système $E(\vec{R})$. Pour réaliser cette tâche, nous appliquerons le théorème de Hellmann-Faynman [29,30] qui consiste à dire que la force généralisée associée à une perturbation λ (paramètre externe) est donnée par l'équation suivante :

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda} = \int \rho_\lambda(\vec{r}) \frac{\partial V_\lambda(\vec{r})}{\partial \lambda} d\vec{r} \quad (\text{II-2})$$

Dans l'approximation de Born Oppenheimer, les coordonnées nucléaires agissent comme des paramètres dans l'Hamiltonien électronique. La force agissant sur l'i-ème noyau dans l'état fondamental est :

$$F_I = - \frac{\partial E(\vec{R})}{\partial u_{I\alpha}} \quad (\text{II-3})$$

On va considérer maintenant les déplacements des atomes autour de leurs positions d'équilibre subissant des perturbations. Dans ce cas, le théorème de Hellmann-Feynman établit que :

$$F_I = - \int d\vec{r} \rho_R(\vec{r}) \frac{\partial V_R(\vec{r})}{\partial u_{I\alpha}} - \frac{\partial E_N(\vec{R})}{\partial u_{I\alpha}} \quad (\text{II-4})$$

où $\rho_R(\vec{r})$ est la densité de charge électronique dans l'état fondamental correspondant à la configuration nucléaire R , $V_R(\vec{r})$ est le potentiel d'interaction électron-noyau et $E_N(\vec{R})$ est l'énergie d'interaction électrostatique entre deux noyaux différents.

La géométrie d'équilibre du système s'obtient quand les forces agissant sur un noyau individuel deviennent nulles :

$$F_I = - \left. \frac{\partial E(\vec{R})}{\partial u_{I\alpha}} \right|_{R_j = \vec{R}_0} = 0 \quad (\text{II-5})$$

Le mouvement des noyaux est un mouvement de vibration, dans lequel chaque noyau est en moyenne sur sa position d'équilibre \vec{R}_I^0 , et est gouverné par la matrice des

constantes de force interatomique $C_{IJ}^{\alpha\beta}$ qui décrit la force de rappel qui s'exerce sur un ion I dans la direction α lorsqu'est déplacé l'ion J dans la direction β .

$$C_{IJ}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 E}{\partial u_{I\alpha} \partial u_{J\beta}} \quad (\text{II-6})$$

Dans développement de l'équation (I.29) à l'ordre deux, le mouvement atomique est un mouvement de $3N$ oscillateurs harmoniques indépendants (sans interaction). Les équations de mouvement de ces oscillateurs sont alors :

$$M_I \ddot{u}_{I\alpha} = - \sum_{J\beta} C_{IJ}^{\alpha\beta} u_{J\beta} \quad (\text{II-7})$$

La solution de cette dernière équation est recherchée sous la forme d'une fonction de Bloch :

$$u_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{M_I}} u_{\vec{q}} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{R} - \omega t)} \quad (\text{II-8})$$

Ce qui amène à résoudre pour chaque vecteur d'onde \vec{q} de la zone de Brillouin, l'équation suivante :

$$\omega^2 M_I u_{I\alpha}(\vec{q}) = \sum_{J\beta} D_{IJ}^{\alpha\beta}(\vec{q}) u_{J\beta}(\vec{q}) \quad (\text{II-9})$$

où $D_{IJ}^{\alpha\beta}(\vec{q})$ est la matrice dynamique et on peut l'obtenir à partir de la transformée de Fourier de la matrice des constantes de force interatomique $C_{IJ}^{\alpha\beta}$ sous la forme suivante :

$$D_{IJ}^{\alpha\beta}(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}} C_{IJ}^{\alpha\beta}(\vec{R}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \quad (\text{II-10})$$

On récrit l'équation (I.37) sous la forme suivante :

$$\omega^2 e_{I\alpha}(\vec{q}) = \sum_{J\beta} \frac{D_{IJ}^{\alpha\beta}}{\sqrt{M_I M_J}} e_{J\beta}(\vec{q}) \quad (\text{II-11})$$

La diagonalisation de l'équation (I.39) nous donne les fréquences de vibration des phonons $\omega_i(\vec{q})$ et leurs déplacement $e_{I\alpha}(\vec{q}, i)$, où $i=1, \dots, 3N_e$ déterminent les branches des phonons.

Par conséquent, les calculs du « premier principe » pour des relations de dispersion de phonons nécessitent la résolution de cette équation, et cela est possible en différenciant les forces d'Hellmann-Feynman par rapport aux coordonnées nucléaires :

$$\frac{\partial^2 E(\vec{R})}{\partial u_{I\alpha} \partial u_{J\beta}} \equiv -\frac{\partial F_I}{\partial u_{J\beta}} = \int dr \frac{\partial \rho_R(\vec{r})}{\partial u_{J\beta}} \frac{\partial V_R(\vec{r})}{\partial u_{I\alpha}} + \int dr \rho_R(\vec{r}) \frac{\partial^2 V_R(\vec{r})}{\partial u_{I\alpha} \partial u_{J\beta}} + \frac{\partial^2 E_N(\vec{R})}{\partial u_{I\alpha} \partial u_{J\beta}} \quad (\text{II-12})$$

Dans notre cas, $V_R(\vec{r})$ l'énergie potentiel électron-ion, est décrite par le potentiel effectif self-consistent, $V_{eff}(\vec{r})$. Cette expression nous permet à représenté la matrice dynamique, comme une fonctionnelle de la densité électronique de charge $\rho_R(\vec{r})$. Pour obtenir la matrice dynamique ou la matrice des constantes de forces interatomique, il suffit de calculer $\rho_R(\vec{r})$ et sa réponse linéaire à une distorsion de la géométrie nucléaire $\frac{\partial \rho_R(\vec{r})}{\partial u_I}$

Toute cette théorie est connu comme Théorie Perturbative de la Fonctionnelle de la Densité (DFPT).

Il est donc possible d'utiliser la procédure self-consistente pour le calcul de $\frac{\partial \rho_R(\vec{r})}{\partial u_I}$ en linéarisant les équations de Khon-Sham :

$$\Delta \rho(\vec{r}) = 4 \sum_{n=1}^{N_e/2} \sum_{m \neq n} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) \frac{\langle \psi_m | \Delta V_{eff} | \psi_n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} \quad (\text{II-13})$$

$$\Delta V_{eff}(\vec{r}) = \Delta V(\vec{r}) + \int dr' \frac{\Delta \rho(\vec{r}')}{|r - r'|} + \frac{\partial E[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho^2(\vec{r})} \quad (\text{II-14})$$

où N_e correspond au nombre total d'électrons, ψ_m sont les orbitaux de Kohn-Sham de particule unique, et ϵ_m les valeurs propres du l'Hamiltonian de Kohn-Sham.

Il existe différentes méthodes qui permettent de calculer les propriétés vibrationnelles des solides en employant la DFPT. Le formalisme de perturbation utilisé est différent pour la méthode de l'orbital linéaire muffin tin (LMTO), la méthode des ondes planes linéaires augmentées (LAPW), et la combinaison pseudopotentiel plus ondes planes (PSP). C'est cette dernière que nous avons utilisée dans ce travail [4].

II-5) Vibrations du réseau : les phonons

La structure cristalline des métaux nobles ne contient qu'un seul atome par maille élémentaire. Les modes de vibration du réseau cristallin sont donc de type acoustique, c'est-à-dire qu'ils ont une fréquence nulle quand leur vecteur d'onde est nul. La loi de dispersion comporte trois branches : deux branches transverses (notées T1 et T2) pour lesquelles la vibration se propage perpendiculairement au mouvement des atomes et une branche longitudinale (notée L) pour laquelle la direction de propagation et le déplacement sont colinéaires. L'ensemble des vibrations est décrit pour des vecteurs d'onde de la première zone de Brillouin, il y a donc N modes propres par branche, où N est le nombre d'atomes formant le cristal.

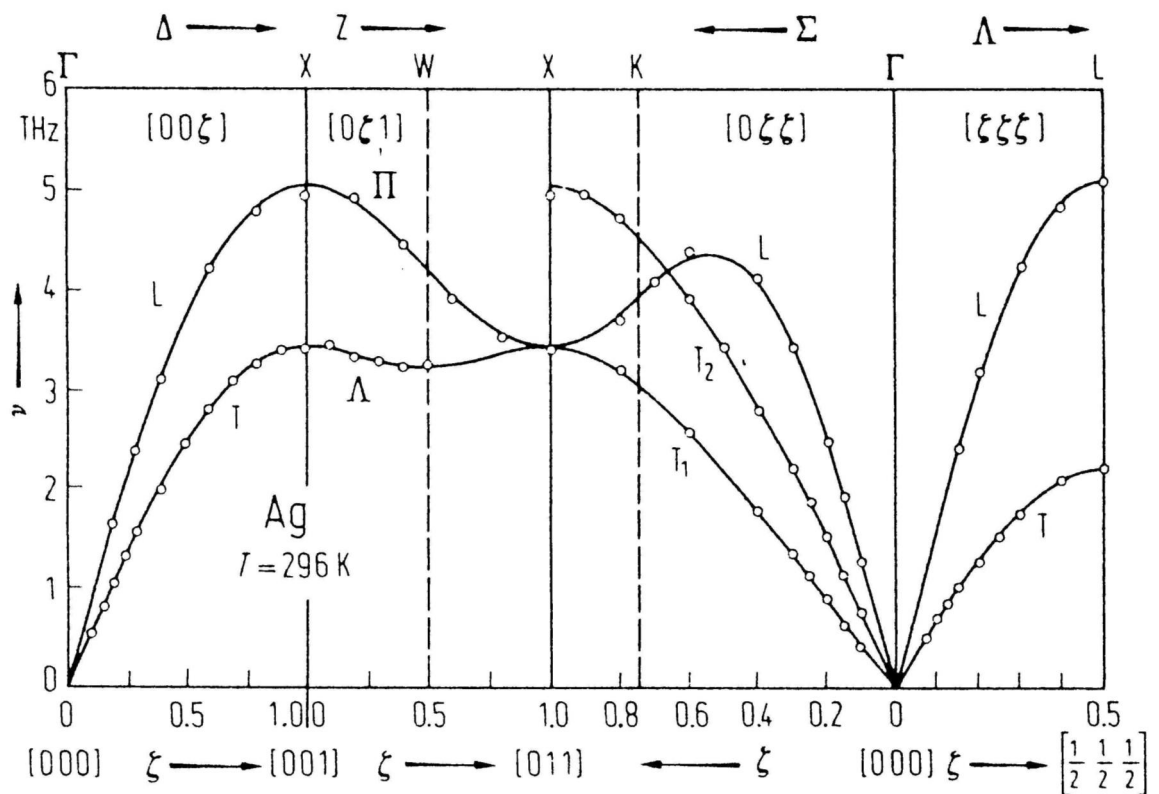


Figure II-1) Courbe de dispersion des phonons dans l'argent mesuré par diffusion inélastique de neutrons.

Expérimentalement, la relation de dispersion des phonons peut être obtenue grâce à des mesures de diffusion inélastique de neutrons. En considérant que les variations d'énergie et de vecteur d'onde d'un neutron lorsqu'il interagit avec un cristal sont dues à l'émission ou à l'absorption de phonons, la mesure de l'énergie des neutrons et de leurs angles de diffusion après leur interaction permet d'extraire des informations sur la relation de dispersion des phonons. La figure 1.4 représente les résultats expérimentaux obtenus pour l'argent.

Le calcul de la relation de dispersion doit tenir compte des interactions entre atomes non consécutifs et de la non-linéarité des potentiels d'interaction. Lorsqu'une description approximative des relations de dispersion est suffisante, trois modèles simples peuvent être utilisés :

– Le modèle sinusoïdal, où seules les interactions linéaires entre proches voisins sont prises en compte, donne :

$$\omega(q) = \omega_M \left| \sin\left(\frac{q}{2a}\right) \right| \quad (\text{II-15})$$

Où a est le pas du réseau dans la direction de propagation \vec{q} et ω_M la fréquence maximale.

– Le modèle de Debye est une approximation linéaire du modèle précédent pour les faibles vecteurs d'onde :

$$\omega(q) = v_s q \quad (\text{II-16})$$

Cette relation permet de définir la célérité v_s du son dans la direction de propagation \vec{q} pour la branche considérée. L'hypothèse d'isotropie du cristal étant généralement utilisée, il est nécessaire de borner les vecteurs d'onde afin d'obtenir un nombre fini de N modes. Le plus grand vecteur d'onde correspondant, appelé vecteur d'onde de Debye, s'écrit :

$$q_D = (6\pi^2 n_i)^{1/3} = \sqrt[3]{2/Zk_F} \quad (\text{II-17})$$

où Z est la valence du métal ($Z = 1$ pour les métaux nobles) et n_i le nombre d'ions par unité de volume. La fréquence maximale des phonons correspondante est $\omega(q) = v_s q_D$. A partir de cette fréquence, on peut également définir la température de Debye Θ_D , $\hbar\omega_D = k_B \Theta_D$, qui donne un ordre de grandeur de la température au delà de laquelle on peut considérer que tous les modes de vibration sont excités thermiquement. Pour l'or, l'argent et le cuivre, Θ_D vaut respectivement 165 K, 225 K et 343 K. La capacité thermique du réseau lorsque tous les modes sont excités est alors donnée par la loi de Dulong et Petit :

$$C_L = 3Nk_B \quad (\text{II-18})$$

– Le modèle d'Einstein, initialement censé modéliser les modes optiques, suppose que tous les phonons ont la même fréquence ω indépendante de q . A l'équilibre thermique à la température T , le nombre d'occupation des phonons est donné par la distribution de Bose-Einstein :

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\hbar\omega(q)/k_B T} - 1} \quad (\text{II-19})$$

Appliqué aux modes acoustiques, ce modèle donne de bons résultats et permet en particulier de retrouver la loi de Dulong et Petit [5].

II-6) Les hypothèses fondamentale :

Un cristal parfait, sans vibration, peut être décrit en donnant son réseau de Bravais, ainsi que la description de l'arrangement des atomes (la base) dans une cellule primitive. Rappelons qu'un réseau de Bravais (voir Appendice A) est formé de tous les points décrits par les vecteurs R tel que

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \quad (\text{II-20})$$

Où a_1, a_2, a_3 sont les vecteurs primitifs et $n_i \in \mathbb{Z}$.

La position des vibrations r_j d'un atome j de la base dans la cellule primitive spécifiée par R est donnée, sans vibration, par

$$r_j(R) = R + d_j \quad (\text{II-21})$$

En présence des vibrations nous ferons l'hypothèse que la position d'équilibre Moyenne d'un ion est encore donnée par (3,2). On pourra donc écrire

$$r_j(R) = R + d_j + u_j(R) \quad (\text{II.22})$$

où $u_j(R)$ représente le déplacement de l'atome j par rapport à la position d'équilibre.

Nous ferons d'autre part l'hypothèse que l'amplitude de déplacement $u(R)$ est faible, ceci permettra de faire l'approximation harmonique (voir ci-dessous). Il faut cependant remarquer qu'une telle description ne permet pas de décrire la diffusion d'un ion dans un cristal ou le comportement des solides à des températures proches de leur point de fusion.

D'autre part certaines propriétés, telles que la dilatation thermique et la conductibilité Thermique, ne peuvent s'expliquer qu'en introduisant des termes anharmoniques.

Pour être concret prenons le cas d'un cristal avec une base monoatomique, dans lequel on peut décrire l'énergie potentielle d'interaction entre les ions comme une somme d'interaction de paires. Notons $\emptyset(x)$ le potentiel d'interaction entre 2 ions séparés par le vecteur x , ce qui implique que le potentiel ne dépende que de la position relative des ions. En compte des vibrations,

$$X = R - R' + u(R) - u(R') \quad (\text{II-23})$$

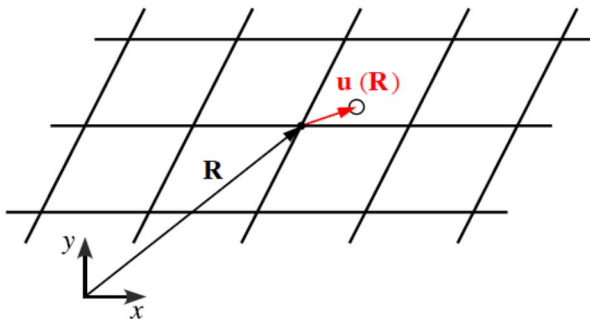


Figure II-2) Réseau de Bravais et vecteur déplacement $u(R)$ pour une base monoatomique.

L'énergie potentielle totale s'écrit,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\substack{R, R' \\ R \neq R'}} \emptyset[R - R' + u(R) - u(R')] \quad (\text{II-24})$$

Dans l'hypothèse où les déplacements $u(R)$ sont faibles, on peut développer $\emptyset(x)$ autour de $(R-R')$, on obtient avec $\alpha, \beta = x, y, z$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\substack{R, R' \\ R \neq R'}} \left\{ \emptyset(R - R') + \sum_{\alpha} [u_{\alpha}(R) - u_{\alpha}(R')] \frac{\partial \emptyset}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} [u_{\alpha}(R) - u_{\alpha}(R')] [u_{\beta}(R) - u_{\beta}(R')] \frac{\partial^2 \emptyset}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \right\} \quad (\text{II-25})$$

Le 1^{er} terme de (3.5) correspond au potentiel sans tenir compte des vibrations (réseau statique),

$$U_{stat.} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{R,R' \\ R \neq R'}} \phi(R - R') = \frac{N}{2} \sum_{R \neq 0} \phi(R) \quad (II-26)$$

Le terme linéaire de (3.5) s'annule car le coefficient de $u_\alpha(R)$ correspond au signe près à la somme des forces qui s'exercent sur le ion R à l'équilibre, il est donné par

$$\frac{1}{2} \sum_{R'} \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial U_{stat.}}{\partial R_\alpha} = 0 \quad (II - 27)$$

L'approximation harmonique revient à négliger dans le développement (3.5) tous les termes d'ordre supérieur à deux, on a donc

$$U = U_{stat.} + U_{har m.} \quad (II-28)$$

Avec

$$U_{harm.} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{R,R' \\ R \neq R'}} \sum_{\alpha,\beta} [u_\alpha(R) - u_\alpha(R')] \phi_{\alpha\beta}(R - R') [u_\beta(R) - u_\beta(R')] \quad (II-29)$$

Où

$$\phi_{\alpha\beta}(x) = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \quad (II-30)$$

Le potentiel harmonique peut s'écrire

$$U = \frac{1}{2} \sum_{R,R'} \sum_{\alpha,\beta} u(R) D(R - R') u(R') \quad (II - 31)$$

On peut vérifier que (2.9) s'exprime sous la forme générale (2.10) si

$$D(R - R') = \delta \sum_{R''} \phi(R - R'') - \phi(R - R') \quad (II - 32)$$

Dans le cas général, et en particulier dans le cas des métaux, le potentiel ne peut pas être représenté comme une somme d'interaction de paires, et il faut partir de la forme générale (3.10) [1].

II-7) Modes normaux d'un réseau de Bravais monoatomique à une dimension :

Pour expliquer la variation de la chaleur spécifique en fonction de la température, il est essentiel de décrire quantiquement les vibrations du réseau. Cependant, les résultats obtenus dans le cadre d'une description classique, en particulier la décomposition en modes normaux des vibrations, pourra être transposée sans difficulté au cas quantique. C'est la raison pour laquelle nous nous attachons, dans ce x et les 2 x suivants, à décrire classiquement les vibrations du réseau.

Nous choisissons d'autre part, pour illustrer les idées de base, le cas simple d'une chaîne linéaire d'atomes, tous identiques, équidistants à l'équilibre. Ce cas correspond aussi à la description des variations (longitudinales ou transverses) associées à une onde élastique se propageant selon l'une des directions principales [100], [110] ou [111] d'un cristal cubique, car dans ces cas des plans entiers d'atomes se déplacent en phase [1].

II- 8) L'effet de la pression sur les semi-conducteurs :**II-1) Définition :**

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

La compressibilité des substances diminue quand la pression augmente, il en résulte une tendance à l'uniformisation des densités des divers éléments. La diminution de La distance entre particule entraîne des modification d'ordre structurale et électronique [6].

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

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

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

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

Ces modifications peuvent entraîner, des arrangements nouveaux des atomes et peuvent provoquer le passage à des arrangements nouveaux plus compacts, il s'agit donc, des transformations au cours desquelles les niveaux électroniques peuvent être profondément modifiés [6].

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

L'application d'une pression hydrostatique présente l'avantage d'agir de manière isotrope sur l'espacement interatomique du réseau et ne provoque aucun changement de la symétrie ; cependant les modifications de la distance interatomique entraînent des déplacements continus des états électroniques qui modifient ainsi la disposition relative des bandes d'énergie due à la redistribution des électrons dans les minima de ces bandes principalement en Γ , X et L (point de haute symétrie dans le cristal).

Cette redistribution entraîne d'une part un élargissement des bandes permises et d'autre part une augmentation de bandes interdites.

Pour une pression donnée, il peut se produire un recouvrement de certaines de ces bandes, se traduisant par une délocalisation des électrons et par suite d'une apparition de l'état conducteur pour les substances isolantes ou semiconducteurs.

On note que la transition isolant-conducteur a été observée pour le Germanium à 81 Kbar et pour le Silicium à 15 GPa.

Les différents minima des bandes varient en fonction de la pression suivant l'équation suivante :

$$E_{nk}(P) = E_{nk}(0) + \frac{dE_{nk}}{dP} P + \frac{d^2E_{nk}}{dP^2} P^2 \quad (\text{II-33})$$

Où $E_{nk}(P)$ est la valeur du gap à pression P.

$E_{nk}(P)$ est la valeur du gap à l'état fondamentale (P=0).

$\frac{dE_{nk}}{dP}$ est le coefficient de pression linéaire du gap.

$\frac{d^2E_{nk}}{dP^2}$ est le coefficient de pression non linéaire du gap.

Dans notre cas on note une pression hydrostatique variant de 0 à 80 Kbar sera appliquée sur le semiconducteur Germanium ; on note cependant, que cette pression entraîne une variation de volume qui est obtenue en utilisant l'équation d'état de Murnaghan [6].

CHAPITRE III

Résultats et discussion

III-1) Propriétés optiques et vibrationnelles :

Dans ce chapitre, nous présentons nos résultats concernant les propriétés optique et vibrationnelle qui, constituent un pas important pour comprendre les propriétés des matériaux de point de vu microscopique.

III-1-1) Propriétés structurales de composés binaires IV, III-V, II-VI et effet de la pression :

Les composés Si, InSb, GaAs, InAs, ZnSe et CdTe appartient à la famille des semi-conducteurs IV, III-V et II-VI. Ce sont des composés intéressants pour leurs applications dans la réalisation des composants optoélectroniques.

Ces composés ont tous une structure de type zinc blende [1]. Leur réseau n cristallin peut se décomposer en deux sous réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, II, l'autre des atomes de l'élément V, VI (voir la figure (III-1)).

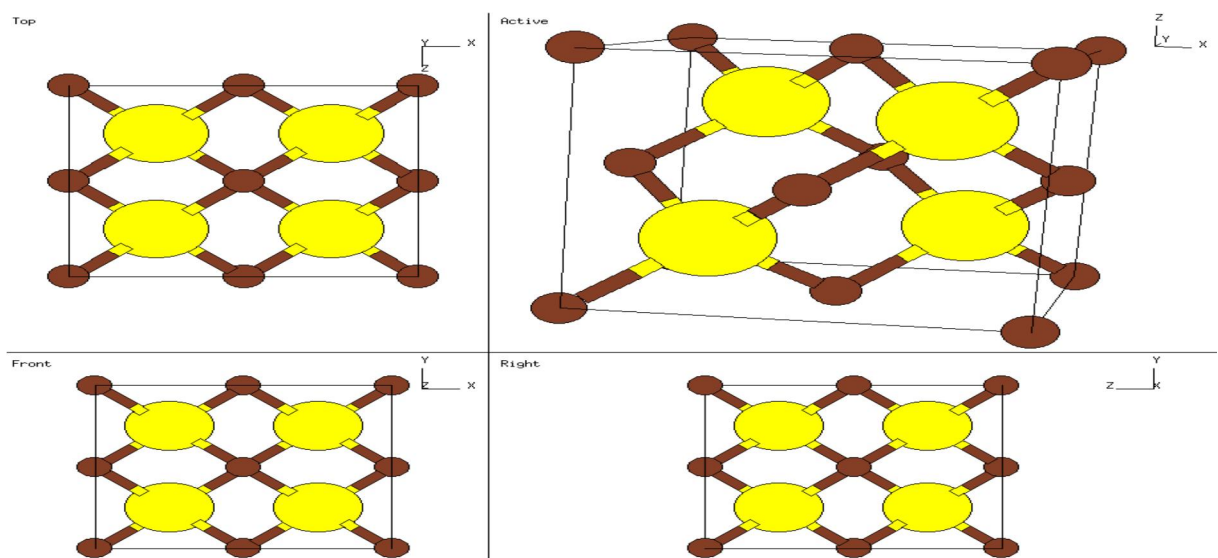


Figure III-1) Réseau cristallin dans la structure zinc blende et leur projections selon différents axes.

Ces deux réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube d'une quantité $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$, a_0 étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire. Chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce. La maille élémentaire, à partir de laquelle on peut reconstituer le cristal entier par un ensemble de translations, est formée par un atome de chaque type.

À partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est système de coordonnées (énergie – vecteur d'onde) dans lequel on représente les variations des fréquences de vibrations du réseau cristallin ou l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde \vec{k} caractérisant la propagation de l'onde considérée de nature vibrationnelle ou électronique [2].

Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à première zone de Brillouin est représentée sur la figure (III-2) [3].

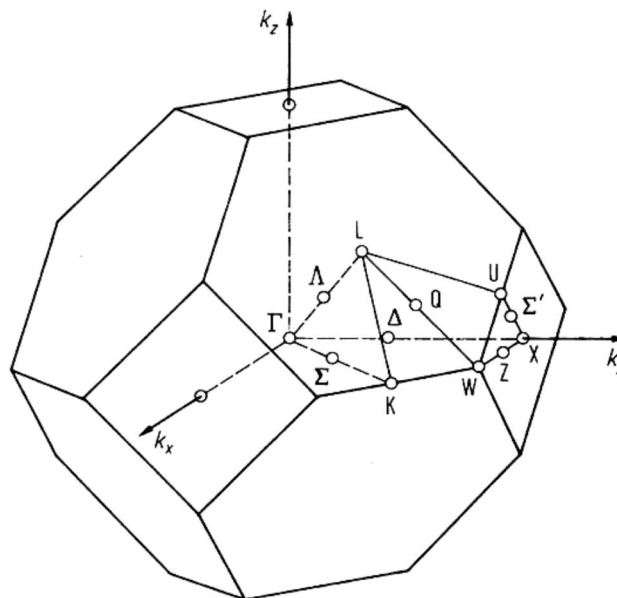
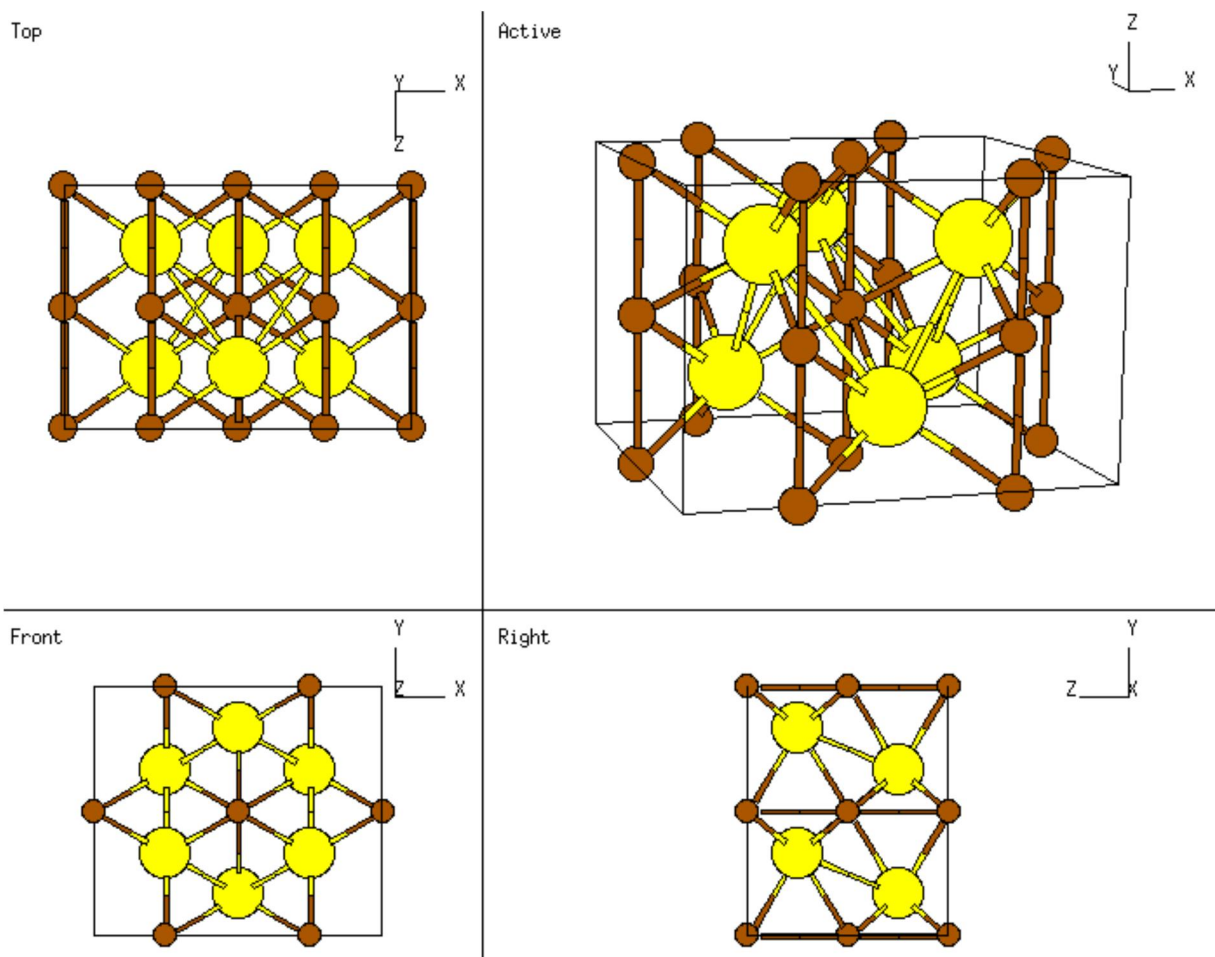


Figure III-2) Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées.

Ces composés à structure zinc blende se transforment sous l'effet de la Pression hydrostatique, soit dans la structure Roksalt dans cas InAs, soit dans la structure Cmc_m dans le cas de GaAs, soit dans la structure Betta-Sn dans le cas de InSb, soit dans la

structure Rocksalt dans le cas de ZnSe, soit dans la structure Cinnabar dans le cas de CdTe, soit dans la structure Beta-Sn dans le cas de Si. En général, les composés ayant une grande ionicité se transforment dans la structure rocksalt.

Nous allons maintenant donner quelques descriptions de ces structures. En ce qui correspond à deux réseaux hexagonaux, chacun est composé de deux espèces d'atomes de type A et de type B, décalés suivant l'axe C, d'un paramètre u . Les deux positions des deux atomes de types A sont $(0,0,0)$ et $(1/3, 2/3, 1/2)$. La figure (III-3) montre la structure NiAs et sa première zone de Brillouin.



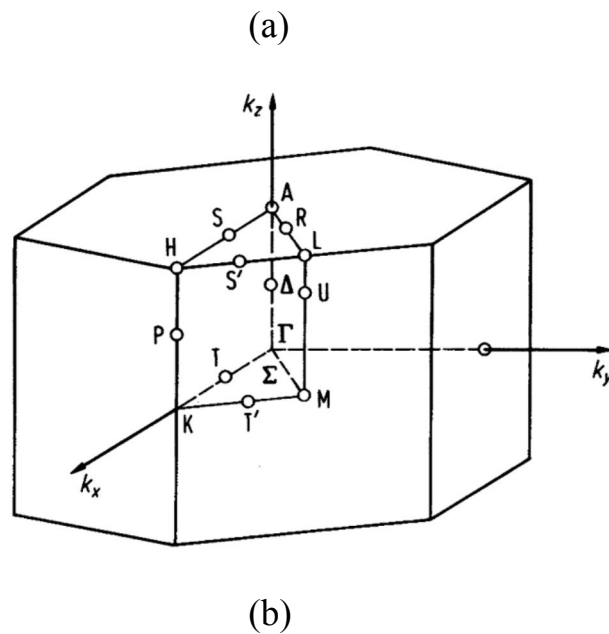


Figure III-3) (a) Réseau cristallin dans la phase NiAs et leur projections selon différents axes (b) Première zone de Brillouin d'un réseau hexagonale .

La structure NaCl (ou bien Rocksalt) ne diffère de la phase zinc blende que des position atomiques qui sont $(0,0,0)$ pour l'atome de type A et $(1/2, 1/2, 1/2)$ pour l'atome de type B comme il est montré dans la figure (III-4).

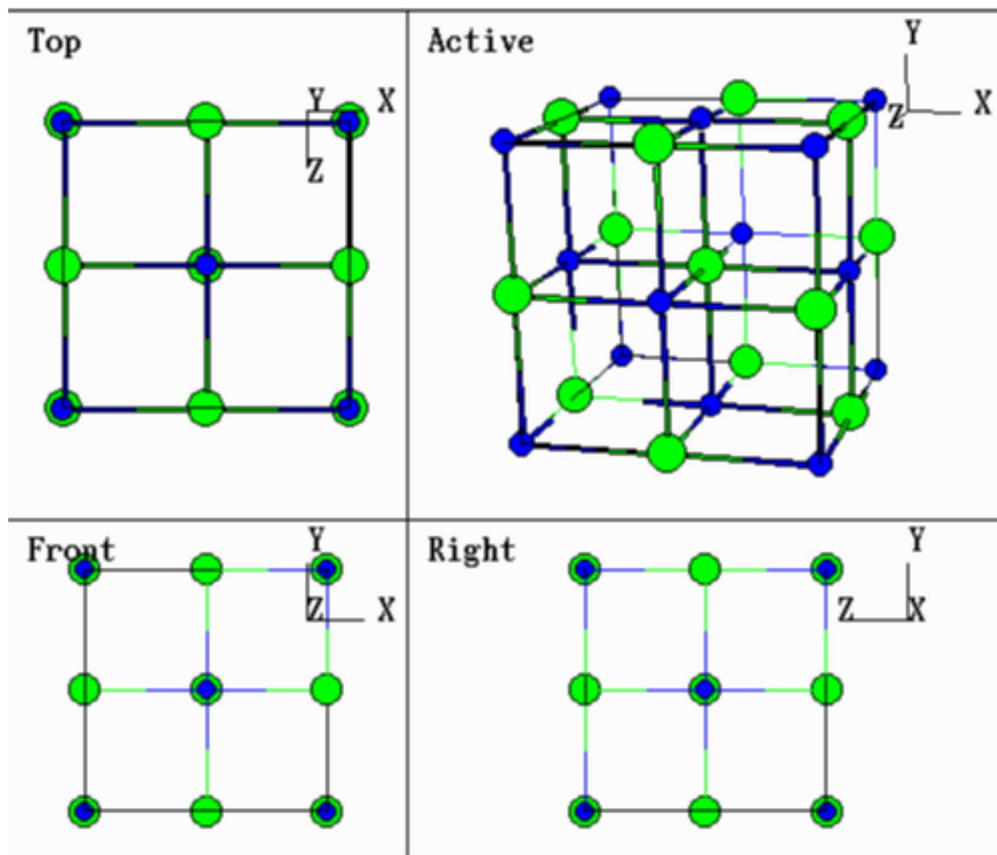


Figure III-4) Réseau cristallin dans la phase rocksalt et leur projection selon différent axes.

La structure Cmc_m peut être considérée comme une distorsion orthorhombique de la structure NaCl, les deux atomes de chaque espèce sont situés respectivement dans les positions $(u_1, u_1, 1/4)$ et $(-u_1, -u_1, 3/4)$ pour le type A et $(u_2, u_2, 1/4)$ et $(-u_2, -u_2, 3/4)$ pour le type B avec les paramètres $u_1=0,165$ et $u_2=0,397$.

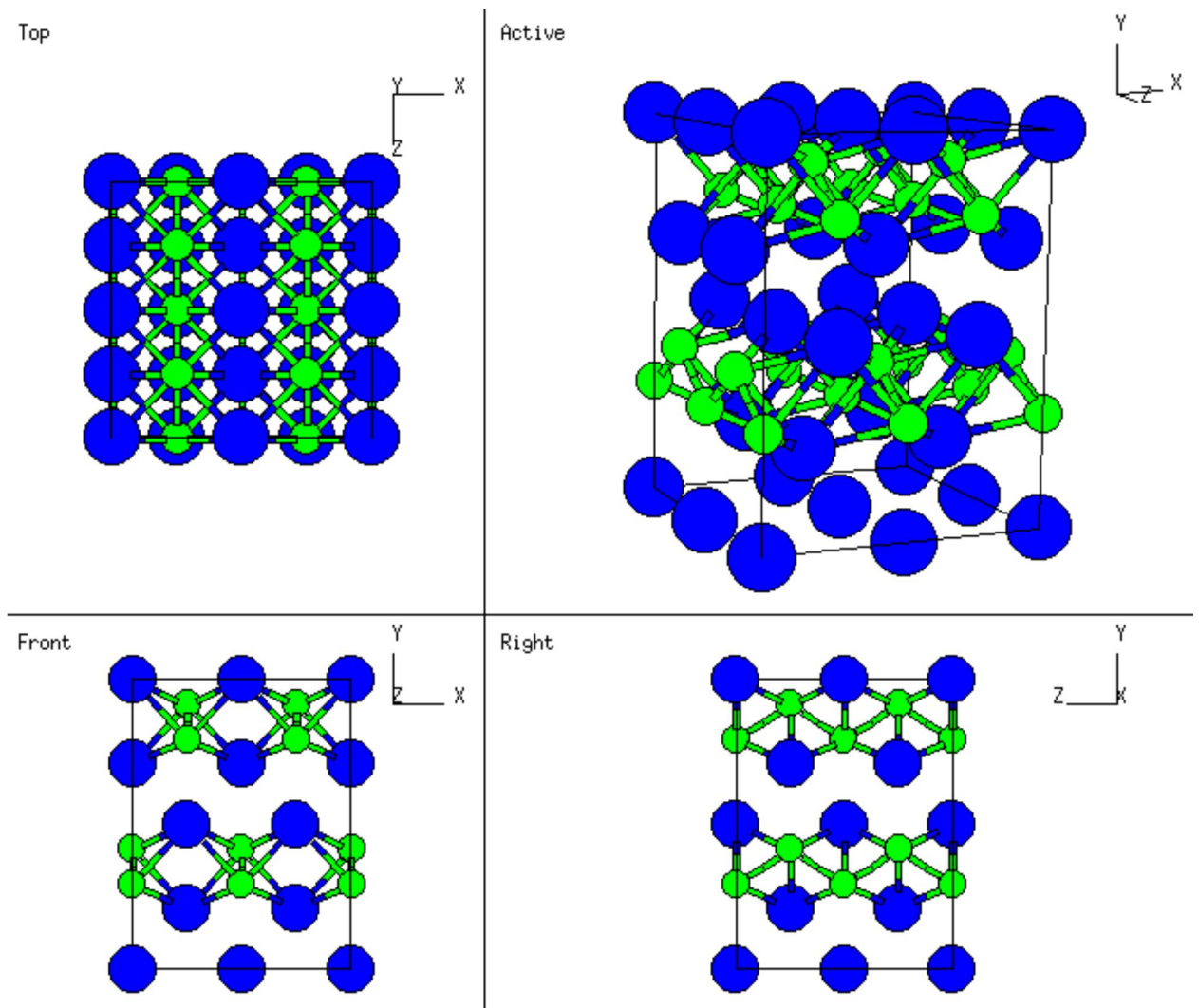


Figure III-5) Réseau cristallin dans la phase Cmc_m et leur projection selon différents axes.

III-2) Propriétés vibrationnelles:

Les excitations des phonons jouent un rôle très important dans le transport électronique, le processus de relation des électrons non radiatif et autres propriétés ont un grand intérêt pour la caractérisation des matériaux et des dispositifs d'ingénierie [4,5].

III-3) Propriétés optiques et diélectriques :

La polarité est une caractéristique décrivant la répartition des charges négatives et positives dans un dipôle. La polarité d'une liaison ou d'une molécule est due à la différence d'électronégativité entre les éléments chimiques qui la composent, des différences de charge qu'elle induit, et à leur répartition dans l'espace.

Dans ce présent travail, la polarité a été calculée en utilisant la relation de Vogl [10].

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{III-1})$$

Nos résultats sont montrés sur le tableau (3-1). Nous avons aussi calculée la covalence qui est définie par :

$$\alpha_c = \sqrt{1 - \alpha_p^2} \quad (\text{III-2})$$

Nos résultats sont aussi présentés dans le tableau suivante :

Tableau 3-1) Valeurs des facteurs de forme symétrique $v_s(3)$ et antisymétrique $v_A(3)$ les et polarité et covalence des semi-conducteurs binaires sous investigation.

	$V_s(3)$ Å	$V_A(3)$ Å	$\alpha_p(\text{Polarité})$	$\alpha_c(\text{Covalence})$
Si	-0,21	0	0	1
InSb	-0,201294	0,064495	0,32	0,95
GaAs	-0,239833	0,060536	0,25	0,97
InAs	-0,217669	0,064731	0,30	0,95
CdTe	-0,396388 ^a	0,1311 ^a	0,33	0,94
ZnSe	-0,225333 ^a	0,116490 ^a	0,52	0,85

^a Ref.[6].

Pour déterminer l'effet de la pression sur la constante diélectrique de haute fréquence (ϵ_∞), nous avons suivie l'approche de Davydov et Tikhorov [11], comme suit :

$$\frac{\partial \varepsilon_{\infty}}{\partial p} = -\eta \frac{\varepsilon_{\infty} - 1}{3B} \quad (\text{III-3})$$

Ou $\eta = 2(1 - 3\alpha_p^2)$; ε_{∞} est la constante diélectrique de haut fréquence appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique à pression nulle, présentée dans le tableau 3-2 et B est le module de compressibilité qui est aussi donné dans le tableau 3-2.

Tableau 3-2) Valeurs des propriétés dynamique de les matériaux utilisé :

Matériaux	$\varepsilon_{\infty}(0)$	$\varepsilon_0(0)$	$\omega_{T_0}(0)$ cm ⁻¹	$\omega_{L_0}(p)$ cm ⁻¹	e_T	f_i	B (dyn/cm ²)
Si	11,7 ^a	11,7 ^a	519,2 ^c	519,2 ^c	0	0	9,78 ^d
InSb	15,6 ^a	17,7 ^a	179 ^c	190,7 ^c	2,05	0,321	4,56 ^d
GaAs	10,9 ^a	12,9 ^a	267 ^c	285 ^c	1,63	0,310	7,55 ^d
InAs	12,3 ^a	14,9 ^a	219,6 ^c	241,4 ^c	1,92	0,357	5,79 ^d
ZnSe	6,32 ^a	9,9 ^a	205 ^c	252 ^c	3,08	0,717	6,24 ^d
CdTe	8,47 ^b	9,64 ^b	139 ^c	167 ^c	2,09	0,630	4,24 ^d

^aRef. [6].

^bRef. [7].

^cRef.[8].

^dRef.[9].

Tableau 3-3) Dérives des paramètres de bandes par effet à la pression.

Matériaux	$\frac{\partial \varepsilon_{\infty}}{\partial p}$ (kbar ⁻¹)	$\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial p}$ (kbar ⁻¹)	$\frac{\partial \omega_{T_0}}{\partial p}$ (kbar ⁻¹)	$\frac{\partial \omega_{L_0}}{\partial p}$ (kbar ⁻¹)	$\frac{\partial e_T}{\partial p}$ (kbar ⁻¹)	$\frac{\partial f_i}{\partial p}$ (kbar ⁻¹)
Si	-7,29*10 ⁻³	-7,29*10 ⁻³	0,35	0,30	0	0
InSb	-1,46*10 ⁻²	-7,76*10 ⁻²	0,301	0,27	-2,46*10 ⁻³	-3,85*10 ⁻⁴
GaAs	-7,31*10 ⁻³	-9,79*10 ⁻³	0,25	0,30	-1,27*10 ⁻³	-1,51*10 ⁻⁴
InAs	-9,49*10 ⁻³	-1,50*10 ⁻²	0,28	0,27	-1,83*10 ⁻³	-2,66*10 ⁻⁴
ZnSe	-3,82*10 ⁻³	-1,55*10 ⁻²	0,30	0,19	-1,79*10 ⁻³	-5,32*10 ⁻⁴
CdTe	-7,86*10 ⁻³	-1,40*10 ⁻²	0,25	0,35	-2,64*10 ⁻³	-4,26*10 ⁻⁴

La variation de ε_{∞} en fonction de la pression est supposée linéaire, donc

$$\varepsilon_{\infty}(p) = \varepsilon_{\infty}(0) + \frac{\partial \varepsilon_{\infty}}{\partial p} p \quad (\text{III-4})$$

Ou faisant varier la pression, nous avons observé la variation de ϵ_∞ en fonction de la pression, qui est montrée dans les figures (III-6), (III-7) et (III-8) pour les différents éléments étudiés.

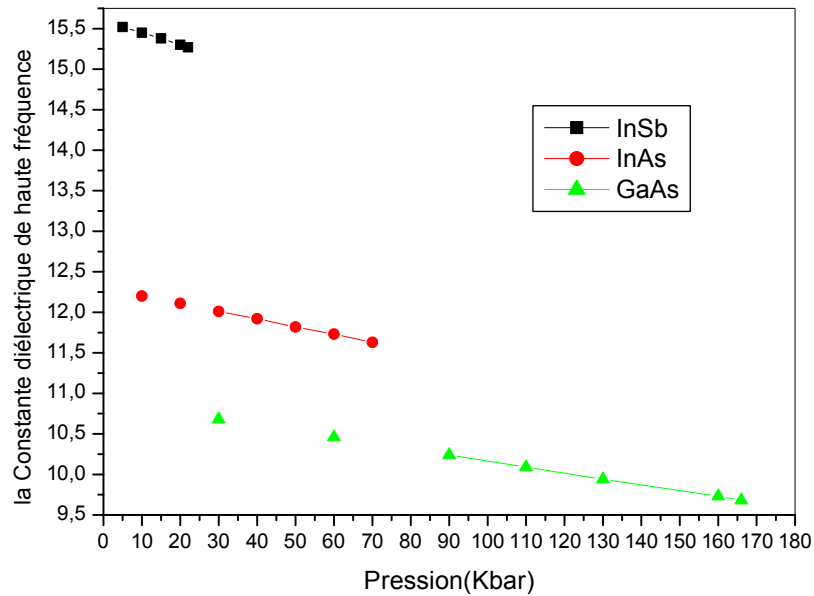


Figure III-6) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

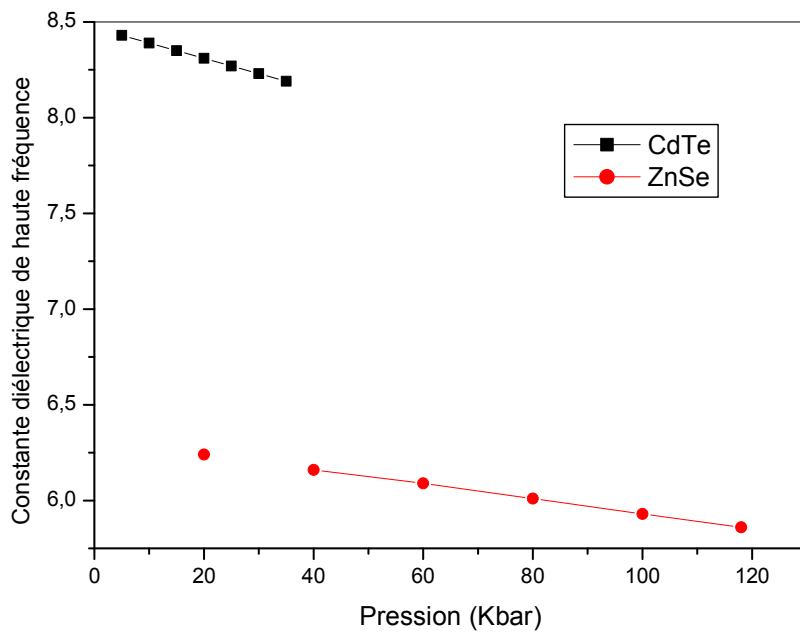


Figure III-7) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression pour ZnSe et CdTe.

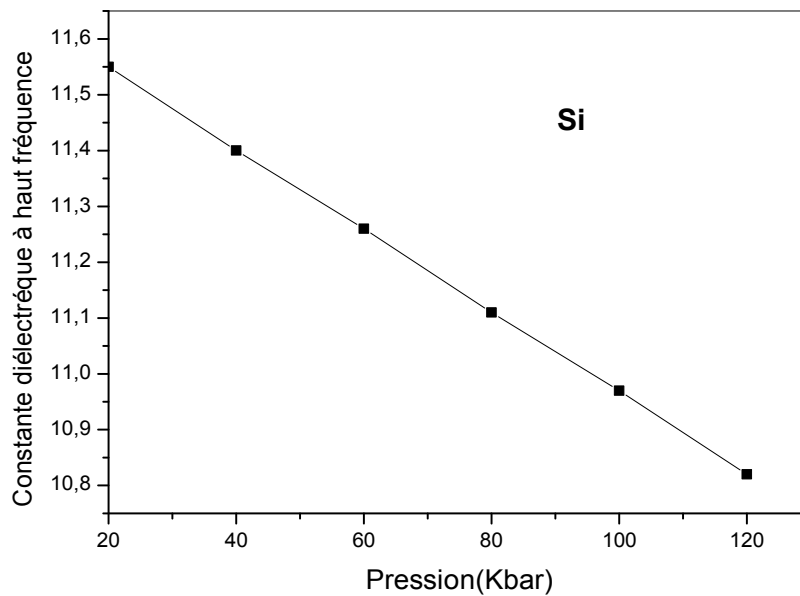


Figure III-8) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression pour Si.

On remarque que la constante diélectrique de haute fréquence pour tous les éléments étudiés diminue lorsque la pression augmente. Qualitativement, la tendance est la même. Néanmoins, le taux de variation diffère d'un élément à l'autre. Aussi l'intervalle de pression n'est pas le même pour tous les éléments. Cela est due au fait qu'on doit prendre uniquement les pressions qui sont inférieures à la pression de transition de phase pour chaque élément étudié étant donné que la structure prise en considération est celle du zinc blende.

Nous avons aussi calculé l'effet de la pression sur la constante diélectrique statique (ε_0) en utilisant le modèle de Harrison [12,13].

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_\infty - 1} = 1 + \mathcal{G} \quad (\text{III-5})$$

$$\text{Ou } \mathcal{G} = \alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2) / 2\alpha_c^4 \quad (\text{III-6})$$

ce qui conduit à :

$$\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial p} = (\varepsilon_\infty - 1) \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial p} + (1 + \mathcal{G}) \frac{\partial \varepsilon_\infty}{\partial p} \quad (\text{III-7})$$

$$\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial p} = -\frac{2\alpha_p^2}{3B\alpha_c^2} \left(3 + 2\frac{\alpha_p^2}{\alpha_c^2} \right) \quad (\text{III-8})$$

Cela va permettre de calculer ε_0 de l'équation (IV-9) et $\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial p}$ de l'équation (IV-7) et donc de poser :

$$\varepsilon_0(p) = \varepsilon_0(0) + \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial p} p \quad (\text{III-9})$$

Cette équation à permis de calculer la notion de la constante diélectrique statique en fonction de la pression.

Nos résultats sont présentés dans les figures (III-4), (III-5) et (III-6) .

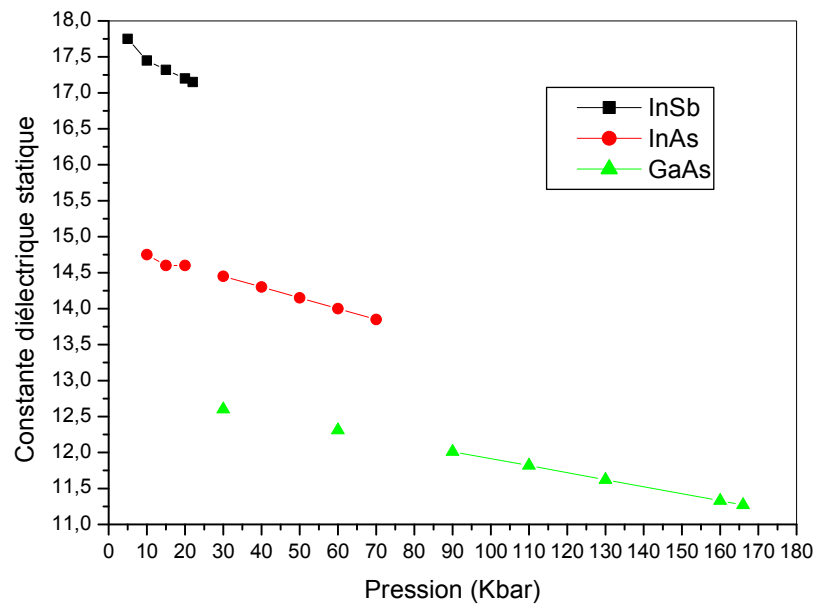


Figure III-9) Variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

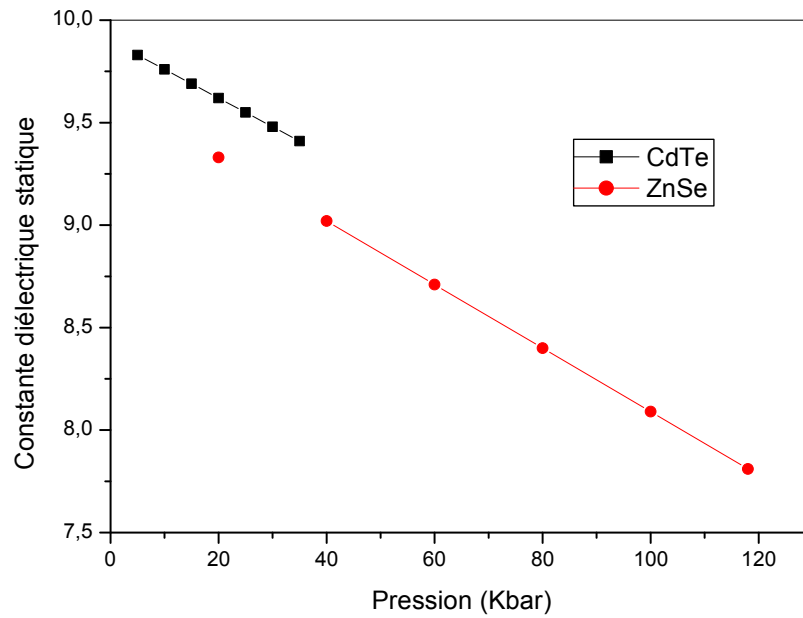


Figure III-10) Variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

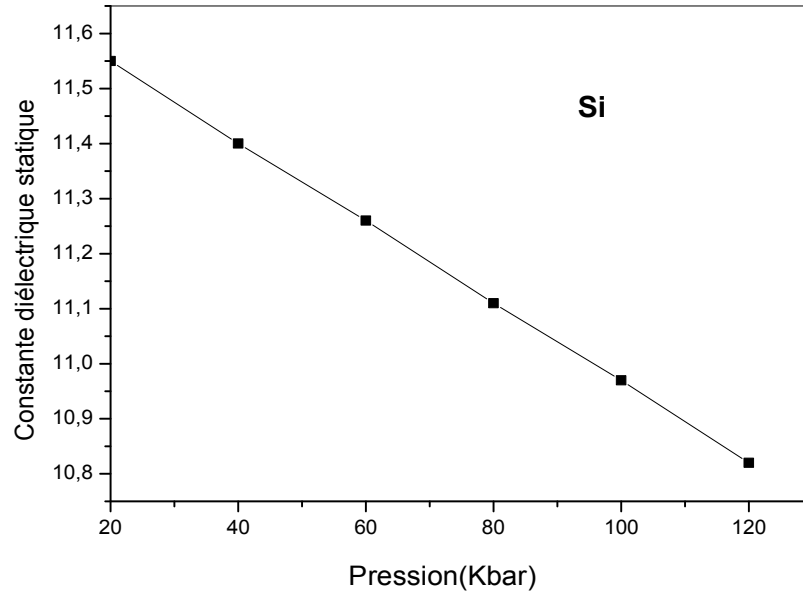


Figure III-11) Variation de constante diélectrique statique en fonction de la pression pour Si.

On observe que la constante diélectrique statique diminue lorsque la pression augmente. Cette variation est monotone pour les éléments étudiés et ne diffère que par la valeur de la pente.

On se basons sur le comportement de ε_∞ et ε_0 sous pression, nous pouvons conclure que lorsque la pression augmente les fonctions diélectriques diminuent, ce qui rend le matériaux étudié un bon isolant ; cela conduit à la diminution de la capacité d'emmagasiner la charge électrique dans tous les élément étudiés.

Dans cette contribution, nous avons calculer la charge effective transverse en utilisant L'équation :

$$e_T(p) = e_T(0) + \frac{\partial e_T}{\partial p} p \quad (\text{III-10})$$

Nous avons aussi étudié la variation de la charge effective en fonction de la pression, comme montrent les figures (III-7) et (III-8).

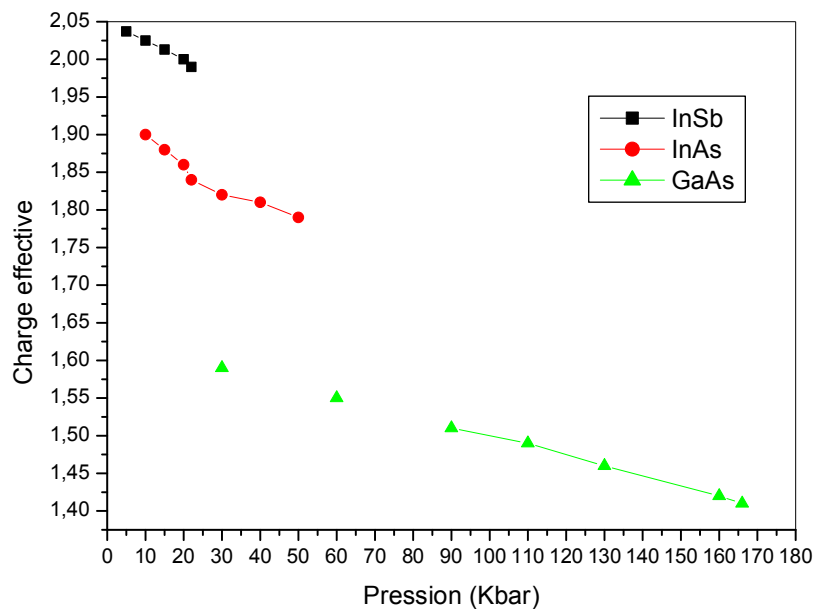


Figure III-12) Variation de la charge effective en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

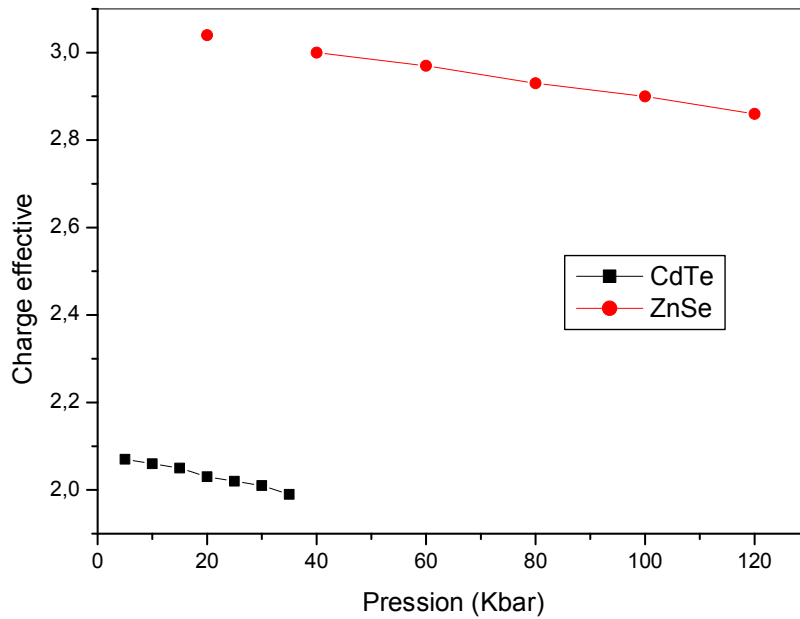


Figure III-13) Variation de la charge effective en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

Il est à noter que la charge transverse effective du Si est nulle. Donc il n'y a pas d'effet de la pression sur e_T dans le Si. Pour les autres éléments du groupe III-V et II-VI, on remarque que e_T diminue lorsque la pression augmente.

Nous avons aussi étudié l'ionicité des semi-conducteurs d'intérêt en utilisant la relation suivante :

$$f_i(p) = f_i(0) + \frac{\partial f_i}{\partial p} p \quad (\text{III-11})$$

A cet effet, l'ionicité du Si a été calculée et trouvée égale à zéro. Cela veut dire que le Si est un semiconducteur purement covalent, tandis que l'ionicité des autres semiconducteurs sous investigation est donnée dans le tableau (III-2).

La dépendance de l'ionicité de la pression est montrée sur les figures (III-9) et (III-10) pour les éléments III-V et II-VI, respectivement.

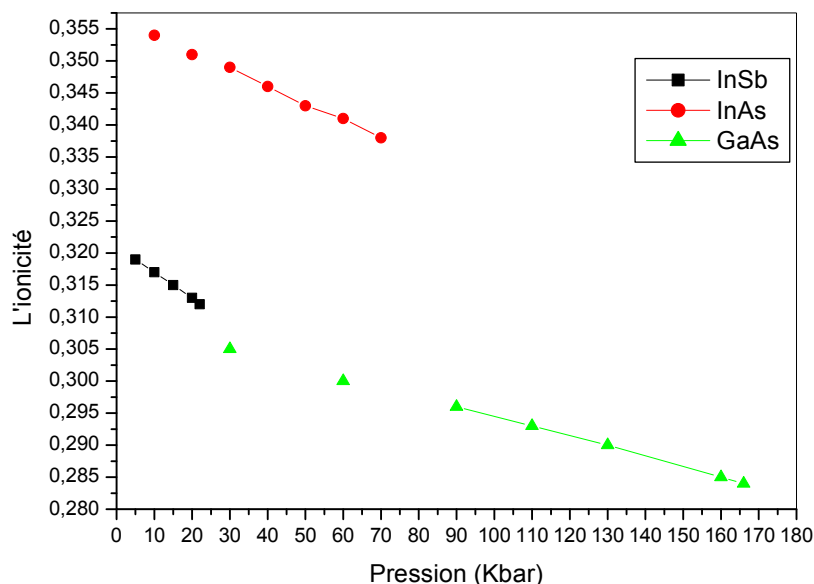


Figure III-14) Variation de l'ionicité en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

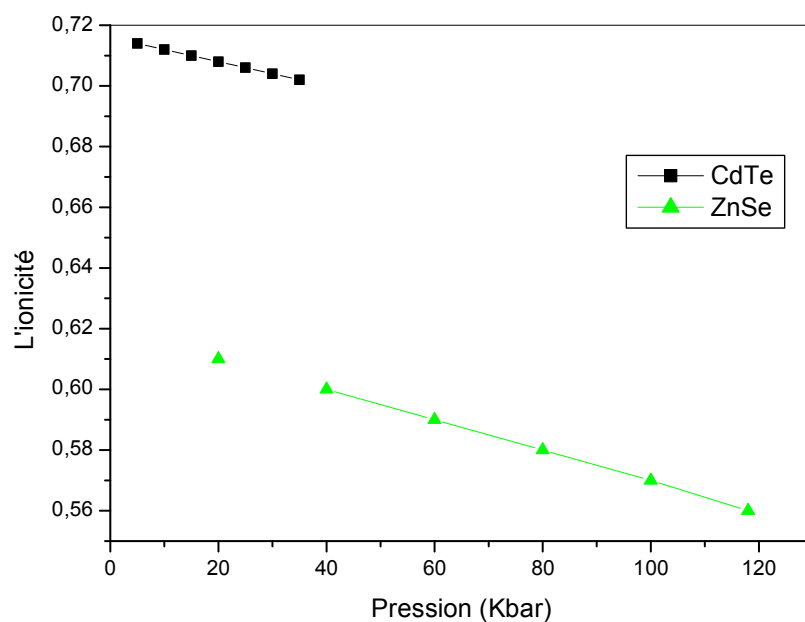


Figure III-15) Variation de l'ionicité en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

On remarque que l'ionicité diminue avec l'augmentation de la pression. Cela veut dire que lorsque la pression augmente, le caractère ionique des éléments étudiés diminue, ce qui augmente le caractère covalent.

Dans cette contribution, nous avons calculer la fréquence optique transversale en utilisant l'équation :

$$\omega_{To}(p) = \omega_{To}(0) + \frac{\partial \omega_{To}}{\partial p} p \quad (\text{III-12})$$

Cette équation (III-12) a parmi de calculer la variation de la fréquence optique transversale en fonction de la pression. Nos résultats sont présentés dans les figures (III-11), (III-12) et (III-13).

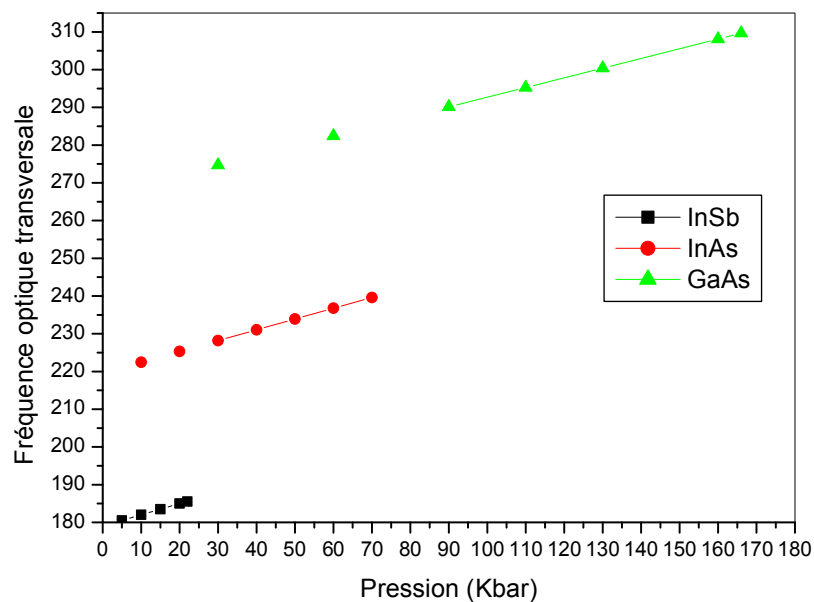


Figure III-16) Variation de la fréquence optique transversale en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

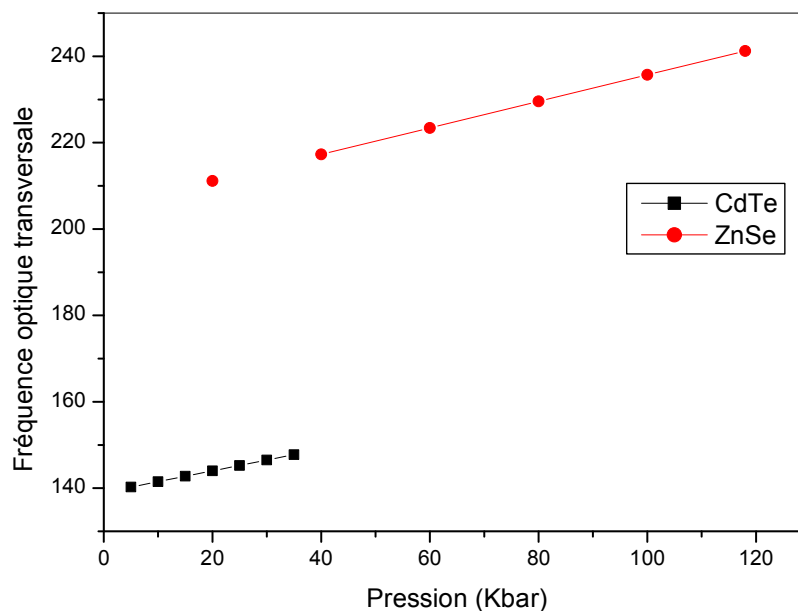


Figure III-17) Variation de la fréquence optique transversale en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

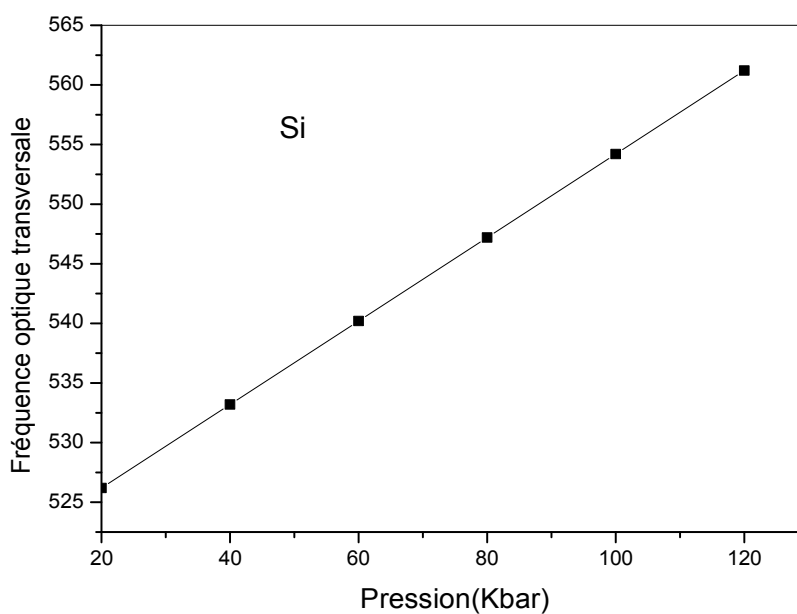


Figure III-18) Variation de fréquence optique transversale en fonction de la pression pour Si.

On observe que la fréquence optique transversale augmente lorsque la pression augmente. Cette variation est monotone pour tous les éléments étudiés.

Cela va permettre de calculer la fréquence optique longitudinale par l'équation suivante:

$$\omega_{Lo}(p) = \omega_{Lo}(0) + \frac{\partial \omega_{Lo}}{\partial p} p \quad (\text{III-13})$$

Cette équation a permis de calculer la variation de la fréquence optique longitudinale en fonction de la pression. Nos résultats sont présentés dans les figures (III-14), (III-15) et (III-16).

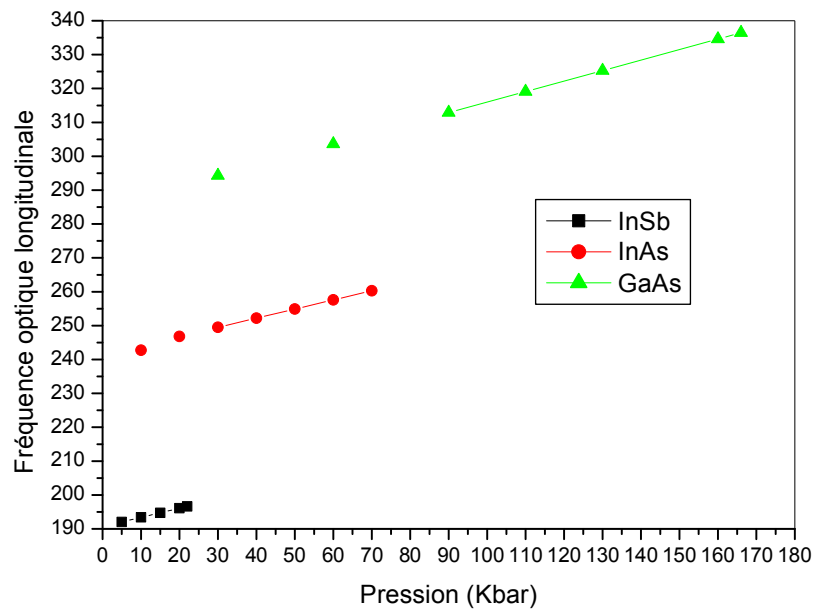


Figure III-19) Variation de la fréquence optique longitudinale en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

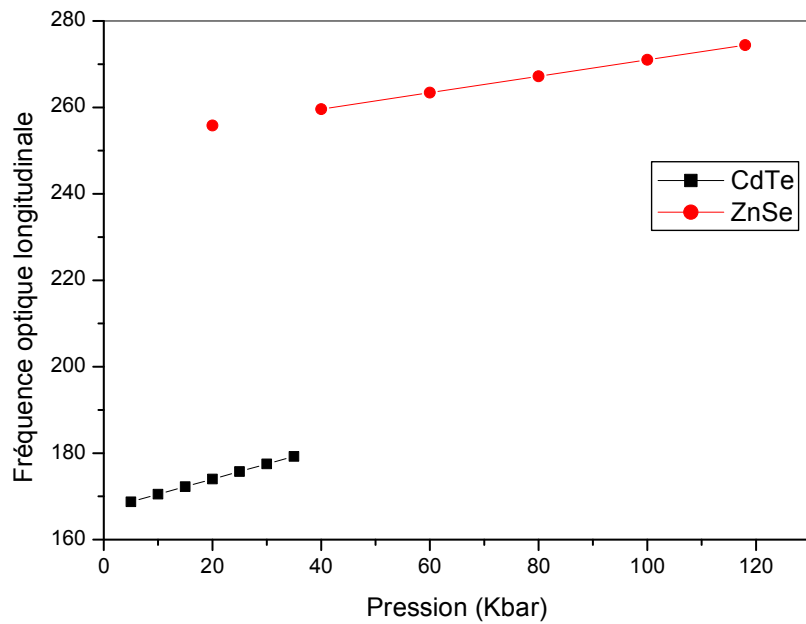


Figure III-20) Variation de la fréquence optique longitudinale en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

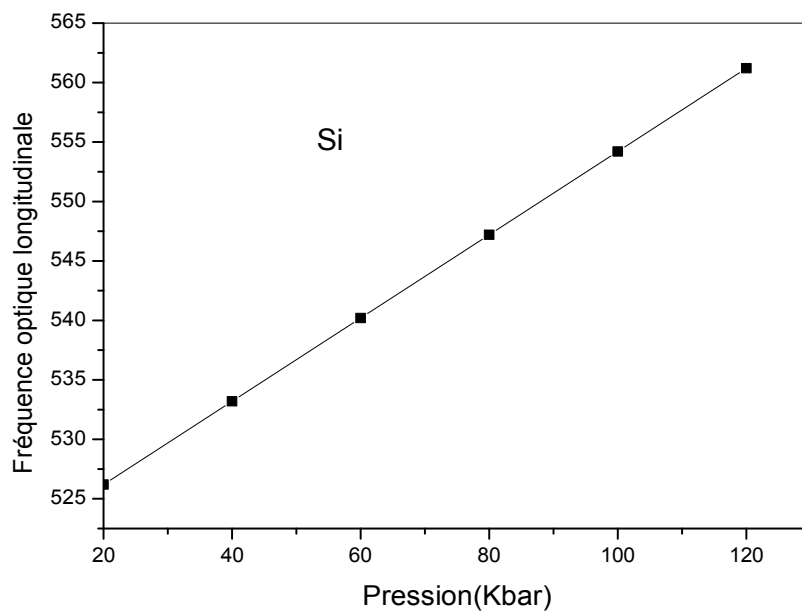


Figure III-21) Variation de fréquence optique longitudinale en fonction pression pour Si.

On remarque que la fréquence optique longitudinale pour tous les éléments étudiés augmente lorsque la pression augmente.

Conclusion générale

Conclusion générale :

Dans ce présent travail nous avons étudié l'effet de la pression sur les propriétés structurales et vibrationnelles des semi-conducteurs binaires, a savoir : Si, InAs, InSb, GaAs, CdTe et ZnSe en utilisant l'approche de Davydov et Tikhonov basé sur le modèle de Harrison . Nos résultats a pression normale ont montrés un bon accord avec l'expérience.

L'effet de la pression sur les propriétés étudiées a conduit a la diminution des constantes diélectriques, la charge transverse effective et l'ionicté des semi-conducteurs III-V et II-VI, tandis que pour le Si la charge transverse effective et l'ionicté sont nulles. Les fréquences des modes de vibrations augmentent avec l'augmentation de la pression pour tous les éléments, III-V, II-VI étudiés dans ce travail.

On peut conclure donc que la pression change les propriétés structurales et vibrationnelles des semi-conducteurs on donnant lieu à des nouveaux matériaux avec des nouvelles propriétés.

Références bibliographiques

Références bibliographiques citées dans le chapitre I :

[1] MEZRAG Fadila, thèse de doctorat, UNIVERSITE MOHAMED KHIDER BISKRA (2012).

[2] E. Mooser, « Introduction à la Physique du solide », 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).

[3] [www.creea.u-bordeaux.fr physique_technologie_composants_puissance.pdf](http://www.creea.u-bordeaux.fr/physique_technologie_composants_puissance.pdf).

[4] C. Ng –Hélène Ng , physique des semi-conducteurs, 3 Ed. Dunod, (2007).

[5] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod Université (1983).

[6] ABDELALI

[7] H. Mathieu, « Physique des semiconducteurs et des composants électronique », 4 Ed. Masson (1998).

[9] [http://fr.wikipedia. Org/ wiki/ Dopage :\(semi-conducteur\).# Dopage_de_type_N_et_de_type_p.](http://fr.wikipedia.org/wiki/Dopage_(semi-conducteur)#Dopage_de_type_N_et_de_type_p)

[10] MEZRAG Fadila, thèse de doctorat, , UNIVERSITE MOHAMED KHIDER BISKRA (2012).

Références bibliographiques citées dans le chapitre II :

[1] Chapitre 3: dynamique du réseau la notion phonon.

[2] [http:// fr. wikipedia. org/wiki/Phonon.](http://fr.wikipedia.org/wiki/Phonon)

[3] [http:// fr. wikipedia. org/wiki/Matériau.](http://fr.wikipedia.org/wiki/Matériau)

[4] Sassi AOUADI, thèse de doctorat (2009).

[5] Julien BURGIN , thèse de doctorat, université BORDEAUXI (2007).

[6] A. Tonto, thèse de Magistère 1996, université de sétif.

Références bibliographiques citées dans le chapitre III :

[1] R. K. Willardson, A. C. Beer, Semiconductors and Semimetals, Academic Press.

[2] C. Kittel, Introduction à la physique de l'état solide, Dunod (1972).

[3] J. R. Chelikowsky, M. L. Cohen, Phys. Rev. B 14, 556 (1976).

[4] P. Giannozzi, S. Gironcoli, P. Pavone, S. Baroni, Phy.Rev.B. 43, 7231(1991).

[5] S. Baroni, P. Giannozzi and A. Testa, Green's-function approach to linear response in

solides, Phys. Rev. Lett. 58, 1861 (1987).

[6] MEZRAG Fadila, thèse de doctorat (2012).

[7] N. Bouarissa, physique B 399 (2007) 126.

[8] S. Adachi, Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors, John, Wiley, 2009.

[9] S. Adachi, Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors, Wiley, Chichester, 2005.

[10] P. Vogl, J. Phys. C: Solid State Phys. 11 (1978) 251.

[11] S. Yu. Davydov and S. K. Tikhonov, Fiz. Tverd. Tela (St. Petersburg) 37, 3044 (1995)

[Phys. Solid State 37, 1677 (1996)].

[12] W. A. Harrison, Phys. Rev. B 24, 5835 (1981).

[13] W. A. Harrison, Phys. Rev. B 27, 3592 (1983).

Etude des propriétés dynamiques du réseau et leurs dépendances en pression des semi-conducteurs binaires IV, III-V, II-VI.

Résumé

Basé sur l'approche de Davydov et Tikhonof couplée au modèle de Harrison, les propriétés structurales et vibrationnelles ont été étudiées à pression nulle et sous pression pour les semi-conducteurs Si, InSb, InAs, GaAs, CdTe and ZnSe. Nos résultats ont montré que toutes les propriétés d'intérêt varient d'une façon presque linéaire avec la pression hydrostatique.

Mots-clés :

Semi-conducteurs binaires, pression, propriétés structurales, propriétés vibrationnelles.

Study of the dynamic properties of the system and their dependencies in pressure binary semiconductor IV, III-V, II-VI.

Abstract

Based on the approach of Davydov and Tikhonof within the Harrison model, the structural and lattice dynamics properties have been studied at normal and under hydrostatic pressure for Si, InSb, InAs, GaAs, CdTe and ZnSe semiconducting materials. Our results showed that all studied properties vary almost linearly with applied pressure.

Key Words:

Binary semiconductors, pressure, structural properties, lattice – dynamics.

دراسة الخصائص الديناميكية و التابعيات الخاصة في الضغط الهيدروستاتيكي لأشباه الموصلات الثنائية .

ملخص :

لقد تمت دراسة الخصائص البنيوية و الاهتزازية لأشباه الموصلات (CdTe, ZnSe, Si, InAs, InSb, GaAs,) في الظروف العادية و تحت الضغط الهيدروستاتيكي و ذلك باستعمال منهجية دافيدوف و تكنوف من خلال نموذج هارسون. بينت نتائجنا ان كل الخصائص المدروسة تتغير تقريبا خطيا من ازدياد الضغط.

الكلمات المفتاحية:

اشباه الموصلات الثنائية ، الضغط ، الخصائص البنيوية ، الخصائص الاهتزازية.

Liste des Figures et des Tableaux

Figures :

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

Figure I-2) Les structures des bandes énergétiques: Métal, semi-conducteur, isolant.

Figure I-3) Répartition des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence à la température T. (Le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre des trous dans la bande de valence).

Figure I-4) Dopage de type n.

Figure I-5) Dopage de type p.

Figure II-1) Courbe de dispersion des phonons dans l'argent mesuré par diffusion inélastique de neutrons.

Figure II-2) Réseau de Bravais et vecteur déplacement $u(\mathbf{R})$ pour une base monoatomique.

Figure III-1) Réseau cristallin dans la structure zinc blende et leur projections selon différents axes.

Figure III-2) Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées .

Figure III-3) (a) Réseau cristallin dans la phase NiAs et leur projections selon différents axes (b) Première zone de Brillouin d'un réseau hexagonale .

Figure III-4) Réseau cristallin dans la phase rocksalt et leur projection selon différents axes .

Figure III-5) Réseau cristallin dans la phase Cmcm et leur projection selon différents axes .

Figure III-6) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

Figure III-7) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression pour ZnSe et CdTe.

Figure III-8) Variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression pour Si.

Figure III-9) Variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

Figure III-10) Variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

Figure III-11) Variation de constante diélectrique statique en fonction de la
pression pour Si.

Figure III-12) Variation de la charge effective en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

Figure III-13) Variation de la charge effective en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

Figure III-14) Variation de l'ionicté en fonction de la pression pour InSb, InAs et GaAs.

Figure III-15) Variation de l'ionicté en fonction de la pression pour CdTe et ZnSe.

Figure III-16) Variation de la fréquence optique transversale en fonction de la pression
pour InSb, InAs et GaAs.

Figure III-17) Variation de la fréquence optique transversale en fonction de la pression
pour CdTe et ZnSe.

Figure III-18) Variation de fréquence optique transversale en fonction de la pression pour Si.

Figure III-19) Variation de la fréquence optique longitudinale en fonction de la pression
pour InSb, InAs et GaAs.

Figure III-20) Variation de la fréquence optique longitudinale en fonction de la pression
pour CdTe et ZnSe.

Figure III-21) Variation de fréquence optique longitudinale en fonction pression pour Si.

Tableaux :

Tableau 3-1) Valeurs des facteurs de forme symétrique $v_s(3)$ et antisymétrique $v_A(3)$ les et polarité et covalence des semiconducteurs binaires sous investigation.

Tableau 3-2) Valeurs des les propriétés dynamique de les matériaux utilisé.

Tableau 3-3) Dérives des paramètres de bandes par effet à la pression.