

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° :PhMat 15/2019



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : Sciences Des Matériaux

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Réalisé par: Mohammed Mehani

Intitulé

*Etude des propriétés élastiques et ondes
acoustiques dans les semi-conducteurs
ternaires $Ga_x In_{1-x} As$*

Soutenu le 30 /06 /2019 devant le jury composé de:

N.Bouarissa

Prof Univ. de M'sila

Président

M.Boucenna

Prof Univ. de M'sila

Rapporteur

F.Mezrag

Dr Univ. de M'sila

Examineur

Année universitaire : 2018/2019

Remerciements

Je remercie Allah tout puissant de nous avoir donné la force et le courage d'établir ce modeste travail.

Je tiens à remercier particulièrement mon encadreur le professeur **Boucenna Mustapha**, pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet et pour les précieux conseils m'a donné, et pour ses compétences et sa bonne directive qui m'ont aidé à achever ce mémoire de master.

Je suis très reconnaissant au **Dr. F.Mezrag** d'avoir accepté d'examiner ce travail et de me faire l'honneur de participer au jury.

Aussi je remercie chaleureusement le professeur **N.Bouarissa** d'avoir accepté de présider le jury et de m'honorer de sa présence.

Mes remerciements vont également à tous les enseignants du département de physique qui n'ont pas ménagé leurs efforts.

Je ne saurais aussi oublier mes amis et mes collègues pour les beaux moments et pour leurs soutiens, leurs présences et leurs encouragements.

Ainsi tous ceux qui ont participé de loin ou de près et qui m'ont aidés pour l'élaboration de ce mémoire.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

A ma mère et mon père

A mes sœurs

A toute la famille Mehani

A tous qui m'ont aidé de près ou de loin

<i>Table des matières</i>	i
<i>Liste des tableaux</i>	iv
<i>Liste des figures</i>	v
<i>Introduction générale</i>	1

Chapitre I: Généralité sur les semi-conducteurs

I-1 Introduction	4
I -2 Définition d'un semi-conducteur	4
I-3 Semi-conducteurs III-V	5
I-4 Les composés binaires et ternaires des semi- conducteurs III-V	6
I-4-1 Les composés binaires	6
I-4-2 Les composés ternaires.....	7
I-5 Propriétés des matériaux semi-conducteurs III-V	7
I-5-1 Propriétés cristallines	7
I-5-2 Propriétés électroniques	9
I-6 La zone de Brillouin.....	9
I-7 La première zone de Brillouin.....	10
I-7-1 Les points de haute symétrie.....	11
I-7-2 Les lignes de haute symétrie	11
I-8 Bande d'énergie.....	12
I-8-1 Gap direct – Gap indirect.....	13

I-9 Applications technologiques d'un alliage semi-conducteur ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$	14
I.10 Conclusion	14

Chapitre II: Méthode de calcul de la structure de bande d'énergie des composés semi-conducteurs

II-1 Introduction	15
II -1-1 L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin.....	15
II -1-2 L'approximation de Born – Oppenheimer	16
II -1-3 Approximation à un électron	17
II-1-4 Méthode du Pseudo-potentiel	19
II-1-4-1 Méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M)	20
II-2 L'approximation du cristal virtuel (VCA)	23
II-2-1 Le cas d'un alliage ternaire	23

Chapitre III: Propriétés élastiques et vibrationnelle des semi- conducteurs

III-1 Les propriétés élastiques	25
III-2 Introduction	25
III-3 Le tenseur de déformation	25
III-4 Le tenseur des contraintes	27
III-4-1 Définition.....	27

III-5 La loi de Hooke	28
III-6 Les propriétés Vibrationnelles (phonons)	29
III-6-1 Introduction	29
III-6 -2 Vibrations des réseaux monoatomiques	29
III-6-3 Cas d'un cristal à une dimension	31
III-6-4 Généralisation à un cristal tridimensionnel	34

Chapitre IV: Résultats et discussions

IV-1 Introduction	36
IV-2 Structure de bande des alliages ternaires $Ga_xIn_{1-x}As$	36
IV-3 Structure de bande de GaAs et InAs	37
IV-3-1 Le composé GaAs	37
IV-3-2 Le composé InAs	38
IV-4 Variation du gap de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la concentration x	41
IV-5 Les propriétés élastiques	44
IV-5-1 Les Constants élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44}	44
IV-6 Les propriétés Vibrationnelles (phonons) de $Ga_xIn_{1-x}As$	48
Conclusion générale	56

Liste des tableaux

Tableau I-1 Extrait de la classification périodique des éléments.....	3
Tableau I-2 Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300K.....	6
Tableau IV-1 Facteurs de formes (Ry) et paramètres de réseaux. du GaAs et InAs.....	36
Tableau IV-2 Gaps énergétiques des composés zinc-blende GaAs et InAs... ..	37
Tableau IV-3 Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} des alliages semi- Conducteurs $Ga_xIn_{1-x}As$	45
Tableau IV-4 Vitesses calculées des ondes acoustiques se propagent dans les directions [100], [110] et [111] pour $Ga_xIn_{1-x}As$ à $(0 \leq x \leq 1)$	50

Liste des figures

Figure I-1 (a) La structure de zinc blende et (b) la première zone de Brillouin.....8

Figure I-2 (a) Un réseau de bravais bidimensionnel et (b) Un réseau de bravais tridimensionnel.....10

Figure I-3 diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.....12

Figure I-4 Structure de bande d'énergie du : a-gap indirect et b-gap direct13

Figure II-1 Diagramme de la procédure de calcul par EPM22

Figure III-1 Axe de coordonnées : (a) état initial, (b) état déformé25

Figure III-2 Les composantes du tenseur des contraintes27

Figure III-3 (En pointillés) plans d'atomes à l'équilibre. (En traits pleins) plans d'atomes déplacés par une onde longitudinale. La coordonnée u mesure le déplacement des plans30

Figure III-4 Plans d'atomes déplacés par le passage d'une onde transverse31

Figure III-5 Schéma d'un cristal à une dimension31

Figure III-6 Courbes de dispersion des vibrations dans un réseau linéaire de 2 atomes par maille primitive33

Figure III-7 Vibrations à une dimension transverses selon les branches acoustiques et optiques34

Figure III-8 Le mode de vibration longitudinal (L) et les 2 modes transverses (T) d'un réseau à trois dimensions35

Figure III-9 Allure des courbes de dispersion dans un cristal pour de vibrations se propageant dans la direction [100]35

Figure IV-1 Structure de bande de composé GaAs.....38

Figure IV-2 Structure de bande de composé InAs.....39

Figure IV-3 Structure de bande de composé $Ga_{0,3}In_{0,7}As$40

Figure IV-4 Structure de bande de composé $Ga_{0,5}In_{0,5}As$40

Figure IV-5 La variation du gap direct (E_F^F) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$	41
Figure IV-6 La variation du gap indirect (E_F^X) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$	42
Figure IV-7 La variation du gap indirect (E_F^L) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$	42
Figure IV-8 La variation du gap direct E_F^F et des gaps indirects (E_F^X) et (E_F^L) en fonction de la concentration x de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As$	43
Figure IV-9 Constante élastique C_{11} de $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la concentration x	46
Figure IV-10 Constante élastique C_{12} de $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la concentration x	47
Figure IV-11 Constante élastique C_{44} de $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la concentration x.....	47
Figure IV-12 Constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la concentration x	48
Figure IV-13 Vitesse du mode longitudinal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [100] en fonction de la concentration x	51
Figure IV-14 Vitesse du mode transversal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [100] en fonction de la concentration x	51
Figure IV-15 Vitesse du mode longitudinal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [110] en fonction de la concentration x	52
Figure IV-16 Vitesse du mode transversal vertical dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [110] en fonction de la concentration x	52

Figure IV-17 Vitesse du mode transversal parallèle dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [110] en fonction de la concentration x53

Figure IV-18 Vitesse du mode longitudinal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [111] en fonction de la concentration x53

Figure IV-19 Vitesse du mode transversal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [111] en fonction de la concentration x54



Introduction générale

Introduction générale

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

Les semi-conducteurs III-V et leurs alliages correspondants, occupent actuellement une position privilégiée dans plusieurs domaines d'applications tels que l'optoélectronique. Le domaine de l'optoélectronique a connu un essor considérable grâce à l'utilisation des matériaux semi-conducteurs III-V (GaAs, InAs, et InP et alliages associés) à gap direct, L'avènement des sources de lumière dans les semi-conducteurs, et, en particulier celui du laser GaAs vers 1962 a orienté l'attention des constructeurs de systèmes de télécommunications vers la transmission des signaux optiques. Cette dernière offre des avantages considérables liés à la vitesse, la densité des données d'informations,.... Dans cette optique les semi-conducteurs III-V tels que GaAs, InAs et InP, ainsi que leurs alliages, sont potentiellement plus performants et résistent mieux aux rayonnements cosmiques que le silicium pour deux raisons évidentes, leur gap est direct et plus grand [1].

L'apparition des fibres optiques en silice à très faible absorption a permis un développement plus important des études sur les composés ternaires et quaternaires des alliages III-V. L'objectif visé est d'avoir une adéquation entre les dispositifs optoélectroniques et les propriétés de ces fibres optiques. Ainsi que le développement des fibres optiques de silice avec des caractéristiques de dispersion et d'atténuation intéressantes dans la gamme de longueurs centrées autour de 1,3 μm et de 1,55 μm , nécessite comme composants d'extrémité (émetteur et détecteur de lumière) des dispositifs réalisés à partir des alliages III-V:

$\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ et $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ et $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ et des composés II-VI :
 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$.

Or, la fabrication de ces composés n'est pas facile. Cependant la bonne connaissance des propriétés des ces matériaux est cruciale, d'une part pour le contrôle de la fabrication des dispositifs électroniques et d'autre part pour la découverte de nouveaux matériaux aux propriétés intéressantes. De nos jours, la modélisation physique par simulation numérique joue un rôle de plus en plus prépondérant dans de nombreux domaines de la physique, grâce à leur succès dans la description et la prédiction des propriétés des matériaux, Les avancées technologiques dans le domaine de la micro-informatique ont permis aux calculs de structures électroniques, dits abinitio, de connaître un grand essor ces dernières années.

Le travail présenté porte sur l'étude des propriétés électroniques, élastiques et vibrationnelles des composés semi-conducteurs III-V GaAS et InAs ainsi que leurs alliages ternaire $Ga_{1-x}In_xAs$, par la méthode des pseudopotentiels du type local. Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides. En effet, elle a couvert plusieurs applications [2-3]. Notre étude utilise la méthode du pseudopotentiel empirique local couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA. Pour pouvoir expliquer les propriétés de ces alliages, nous avons, après avoir résolu l'équation de Schrödinger, déterminé les énergies et les fonctions d'ondes. Les valeurs des énergies ont été utilisées pour la détermination de la structure de bandes des composés semi-conducteurs.

Le premier chapitre de ce manuscrit présente une étude bibliographique générale et une description des matériaux semi-conducteur III-V GaAS et InAS dans leur aspect fondamental à savoir la structure du réseau cristallin et la structure de bande électronique.

Dans le deuxième chapitre, on développera les méthodes de résolution pour la détermination des structures de bandes et on traitera les méthodes utilisées dans nos calculs.

Un rappel des principales propriétés élastiques et vibrationnelles des matériaux semi-conducteurs est exposé dans le troisième chapitre.

Dans le dernier chapitre, nous présentons les résultats de nos calculs, leur interprétation ainsi qu'une comparaison avec certains travaux théoriques et expérimentaux.

Finalement, ce manuscrit est couronné par une conclusion générale qui résume les principaux résultats de ce travail.



Chapitre I :
Généralité sur les semi-conducteurs

Chapitre I : Généralité sur les semi-conducteurs

I-1 Introduction

Les semi-conducteurs ont fait depuis ces dernières décennies l'objet de très importantes recherches à cause des intérêts propres qu'ils représentent et surtout à cause des applications de plus en plus nombreuses dans lesquelles ils sont utilisés.

Les semi-conducteurs sont des isolants dont la bande interdite est suffisamment faible pour que l'excitation thermique permette à un nombre d'électrons de peupler la bande de conduction.

Le progrès qui a été réalisé en physique des semi-conducteurs dépend principalement des matériaux semi-conducteurs III-V [4].

I-2 Définition des semi-conducteurs

Un semi-conducteur est intermédiaire entre un métal et isolant, à $T=0K$, il se comporte comme un isolant mais il conduit l'électricité dès que la température augmente, sa conductivité augmente avec la température contrairement aux métaux.

La structure de bande est analogue à celle des isolants avec une zone interdite séparant la bande de valence de celle de conduction, mais la largeur de celle-ci est plus faible.

Elle est par exemple ; de 1.17eV pour le silicium et de 1.42eV pour l' GaAs.

À $T=0K$, la bande permise occupée la plus haute est complètement remplie: c'est la bande de valence. La bande permise vide la plus basse est la bande de conduction ; elle est vide à $T=0K$. Lorsque la température augmente, l'énergie d'agitation thermique excite un certain nombre d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction, comme celle-ci est partiellement remplie, il y a conduction si on applique électrique.

À cette conduction d'origine électronique, s'ajoute celle des trous qui sont les places vacantes Laissées par les électrons dans la bande de valence, pour un semi-conducteur, la conductivité est d'autant plus grande que le nombre d'électrons dans la bande de conduction est élevé, c'est-à dire que la température est plus grande [5].

I-3 Semi-conducteurs III-V

On distingue les semi-conducteurs de type III-V qui se forment de l'association d'un élément de la III colonne et d'un élément de la V colonne, à partir de la classification périodique de Mendeleïev de nombreux composés binaires, ternaire ou quaternaire peuvent être réalisés selon les éléments qui ont formés.

Le tableau (I-1) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique) [6].

<i>III</i>	<i>IV</i>	<i>V</i>
$10,81^{5}B$	$12,01^{6}C$	$14,01^{7}N$
$26,98^{13}Al$	$28,09^{14}Si$	$30,97^{15}P$
$69,74^{31}Ga$	$72,59^{32}Ge$	$74,92^{33}As$
$114,82^{49}In$	$118,69^{50}Sn$	$121,75^{51}Sb$

Tableau I-1 Extrait de la classification périodique des éléments

Dans les semi-conducteurs III-V, les électrons ns^3 des dernières orbitales des atomes de groupe III et les électrons ns^2p^3 des atomes du groupe V, se réarrangent pour former, eux aussi, les orbitales hybridées $(2x)sp^3$ [7].

I-4 Les composés binaires et ternaires des semi- conducteurs III-V

I-4-1 Les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés de bande interdite large et indirecte, ainsi que la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [8], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de band directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [9]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thalium ou le bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I-2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

<i>Composé III-V</i>	E_g (eV)	m^*/m_0	μ ($cm^2/V.s$)	$a(A^\circ)$
B N	7.5			3.6150
Al P	2.45			5.4510
Al As	2.16			5.6605
Al Sb	1.58	0.12	200	6.1355
B P	2.0			4.5380
Ga N	3.36	0.19	380	4.50
Ga P	2.26	0.82	110	5.4512
Ga As	1.42	0.067	8500	5.6533
Ga Sb	0.72	0.042	5000	6.0959
In P	1.35	0.077	4600	5.8686
In As	0.36	0.023	33000	6.0584
In Sb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Tableau I-2 propriétés des principaux composés binaires III-V à 300K

I-4-2 Les alliages ternaires

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, qui sont identifiés de la façon suivante :

Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit, $A_xA'_{(1-x)}B$

Exemple : $Ga_xIn_{(1-x)}As$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInAs.

I-5 Propriétés des matériaux semi-conducteurs III-V

I-5-1 propriétés cristallines

Les matériaux semi-conducteurs sont exclusivement des solides cristallins. leurs propriétés électronique, optiques, mécaniques et thermiques sont donc liées à la géométrie particulière qui représente l'arrangement des atomes au sein du matériau : le réseau cristallin.

Les semi-conducteurs III-V tels que GaAs (arséniure de gallium), GaP, InAs, etc....ont une structure cristallographique de type de zinc blende. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (Si, Ge, etc...), est constituée de deux sous-réseaux cubique à faces centrées, l'un d'éléments III, l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale (voir la figure I-1(a), l'atome en rouge représente un élément III par exemple, l'atome en jaune représente un élément V). le premier (Ga) à l'origine et l'autre (As) à $(\mathbf{a}/4, \mathbf{a}/4, \mathbf{a}/4)$, ou \mathbf{a} représenté le paramètre de maille du matériau.

Du fait que les deux sous-réseaux cubiques à faces centrées sont décalés, le cristal n'est pas centrosymétrique. Il en découle des propriétés physiques différentes suivant les directions cristallographiques considérées.

De ce fait, les liaisons atomiques dans les matériaux III-V ne sont pas simplement covalentes comme dans le cas du silicium. Elles reposent sur le transfert

d'électrons des atomes du groupe V (As) sur ceux du groupe III (Ga). Dans un cristal composé de l'arséniure de gallium, chaque atome d'arséniure est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'arséniure. Il se produit alors un échange d'électrons, le cristal se construit avec les ions Ga^+ et As^- qui ont tous quatre électrons périphériques. cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons (semi- conducteurs polaires) qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier .cette propriété est en particulier responsable de l'anisotropie optique dans les hétéro structures semi-conductrices III-V qui a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisin [10,11]

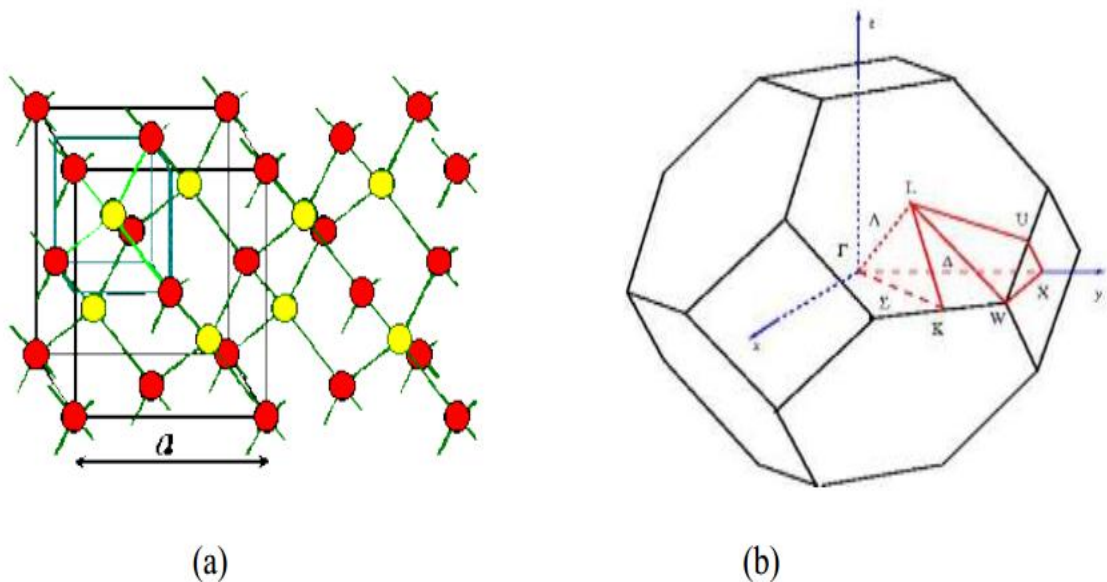


Figure I-1 (a) La structure de zinc blende et (b) la première zone de Brillouin

Le réseau réciproque du réseau de Bravais correspondant à la structure zinc blende est un réseau cubique centré. La première zone de Brillouin du réseau réciproque a la forme octaèdre tronqué (voir figure I-1(b)) par les six faces d'un cube. Elle présente un centre de symétrie à l'origine noté Γ et les axes de symétrie Δ , λ et les points de croisement de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin sont les points de haute symétrie, et ils jouent un rôle primordial dans la structure de bande.

I-5-2 Propriétés électroniques

Les matériaux de semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétérostructures. Les orbitales de type **s** et de type **p** de chaque atome de gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As, et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type **sp³** : 4 orbitales liantes et 4 orbitales antiliantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence. Cette bande est pleinement occupée par des électrons à $T = 0K$, pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antiliantes donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur E_g (band gap en anglais). Pour les semi-conducteurs à gap direct, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point Γ [4].

I-6 la zone de Brillouin

Les zones de Brillouin d'ordre supérieur sont simplement des régions limitées par les plans de Bragg, définis comme suit :

La première zone de Brillouin est l'ensemble des points de l'espace de K , qui peuvent être atteints à partir de la première zone en traversant un seul plan de Bragg.

La $(n + 1)^{\text{e}}$ zone Brillouin est l'ensemble des points qui ne sont pas dans la $(n - 1)^{\text{e}}$ zone et qui peuvent être atteints à partir de la n^{e} zone en traversant un seul plan de Bragg.

Autrement dit, la $n^{\text{ième}}$ zone de Brillouin peut être définie comme étant l'ensemble des points pouvant être atteints à partir de l'origine en traversant $n-1$ plans de Bragg, mais pas moins [11].

I-7 La première zone de Brillouin

La maille primitive de Wigner-Seitz du réseau réciproque est appelée Première zone de Brillouin. Comme le suggère le nom, on définit des zones de Brillouin d'ordre plus élevé, constituant des mailles primitives d'un type différent et qui apparaissent dans la théorie des niveaux électroniques dans un potentiel périodique.

Bien que les termes de « maille de Wigner-Seitz » et de « première zone de Brillouin » se réfèrent à des constructions géométriques identiques. En pratique, le dernier terme n'est appliqué qu'à la maille de l'espace des k .

En particulier, lorsqu'on fait référence à la première zone de Brillouin d'un réseau de Bravais particulier de l'espace réel (associé à une structure cristalline particulière), il faut toujours comprendre la maille de Wigner-Seitz du réseau réciproque associé. Ainsi, puisque le réseau réciproque du réseau cubique centré et cubique à faces centrées, la première zone de Brillouin du réseau **CC** (figure I-2.a) est simplement la maille de Wigner-Seitz **CFC**, Inversement, la première zone de Brillouin du réseau **CFC** (figure I-2.b) est simplement la maille de Wigner-Seitz **CC** [8]. la première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende d'un tronqué (figure I-1(b)) [12].



Figure I-2 (a) Un réseau de bravais bidimensionnel et (b) Un réseau de bravais tridimensionnel

I-7-1 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:

$$K_W = \frac{2\pi}{a} (0, \frac{1}{2}, 1).$$

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 :

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

I-7-2 Les lignes de haute symétrie

Δ : Cette ligne représente la direction $\langle 100 \rangle$, elle relie le centre Γ au point X

Σ : C'est un point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$

A : Cette ligne est la direction $\langle 100 \rangle$ elle relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonal qui est le point L de l'octaèdre [13].

I-8 Bande d'énergie

Les électrons d'un atome isolé ont des niveaux d'énergie permis bien définis, mais son comportement dans un réseau cristallin périodique est totalement différent. Si la distance entre les atomes voisins génère une sorte d'interférence entre les niveaux permis d'atome, cela entraîne une multitude quasi continue d'états autour de chaque niveau permis de l'atome individuel, cet ensemble d'états, très proche entre eux, est plutôt considéré alors comme une bande d'énergie permise, avec une densité d'états associée. Les niveaux d'énergie des électrons de valence et le niveau d'énergie d'ionisation génèrent ainsi deux bandes d'énergies permises particulièrement intéressantes. La bande de valence et la bande de conduction, séparées par une bande dépourvue de niveau permis, nommé bande interdite (figure I.3) la particularité de ces bandes permises de conduction tient au fait que les électrons peuvent circuler librement dans toute la maille cristalline et ainsi génère des courant de conduction électrique [14].

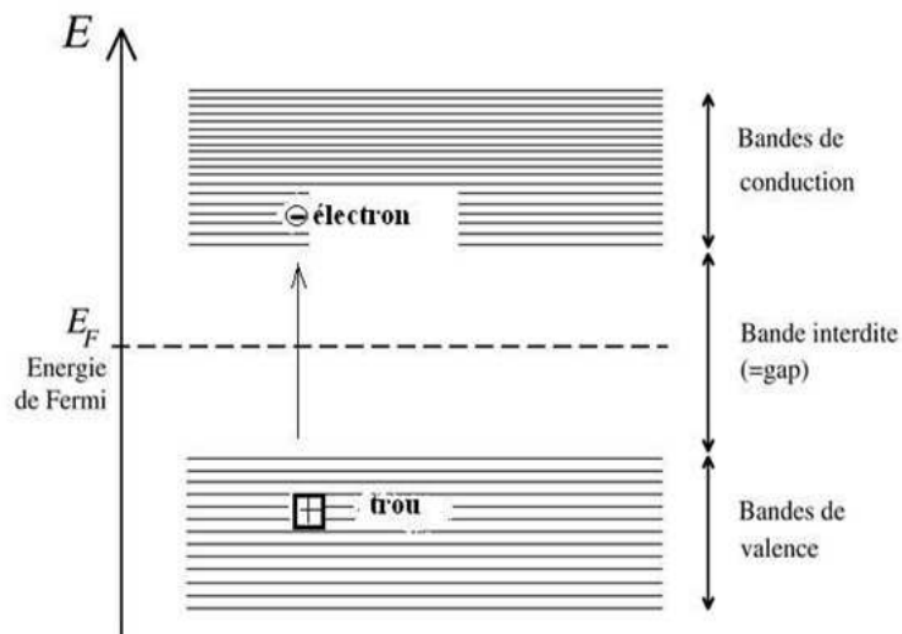


Figure I-3 diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs

I-8-1 Gap direct – Gap indirect [15]

Considérons le gap des différents semi-conducteurs. Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence. Les structures de bande représentées dans la figure I-4 font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteur. Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des k et les semi-conducteurs à gap direct pour lesquels ces extrema sont situés au même point de l'espace des k (au centre de la zone de Brillouin, en $k=0$).

Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre ceux qui ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité ci-dessous.

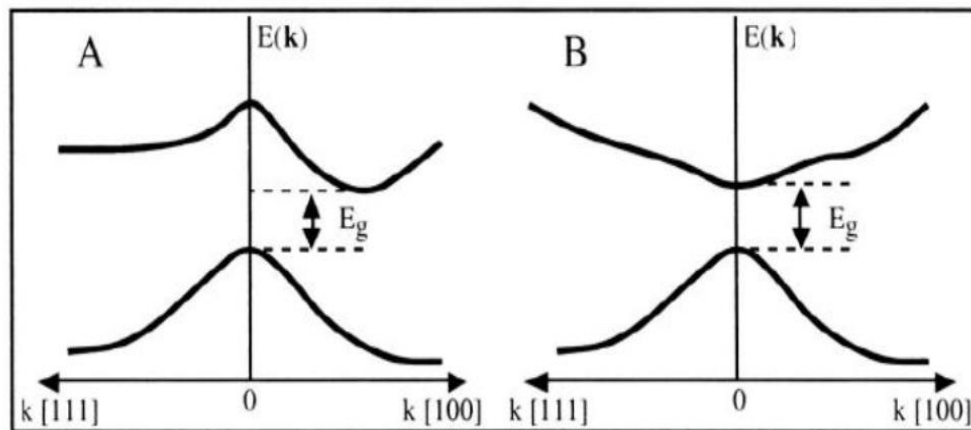


Figure I-4 Structure de bande d'énergie du : A-gap indirect et B-gap direct [15]

I-9 Applications technologiques d'un alliage semi-conducteur ternaires $Ga_xIn_{1-x}As$

L'arséniure d'indium et gallium InGaAs a connu un intérêt croissant dans ces dernières années, vu que son gap et son paramètre cristallin peuvent être variés systématiquement par le choix de composition de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As$, il présente de multiples applications, par exemple l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$ préparé par épitaxie, a été employé comme couche active dans les lasers et des détecteurs photoélectriques, ainsi il est utilisé comme détecteur de rayonnement dans les systèmes de télécommunication optique. En outre, c'est un très bon candidat pour les transistors à grand vitesse [16]. Il est couramment préparé sur des substrats d'InP (phosphore d'indium).

Pour les cellules solaires triple jonction, l'InGaAs est implanté comme sous-cellule du milieu pour couvrir la partie du spectre.

I-10 Conclusion

Dans le premier chapitre nous avons donné des notions fondamentales des matériaux semi-conducteurs que nous allons étudier en insistant sur les semi-conducteurs III-V des alliages ternaires.

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.



Chapitre II:

***Méthode de calcul de la structure de
bande d'énergie des composés semi-
conducteurs***

Chapitre II: Méthode de calcul de la structure de bande d'énergie des composés semi-conducteurs

II-1 Introduction

L'étude des structures de bandes permet d'interpréter plusieurs phénomènes physiques, qui se déroulent dans les corps solides. Dans ces corps, cette structure peut être obtenue en tenant compte de toutes les interactions existant entre les noyaux et les électrons. Les résolutions des équations générales sont impossibles, mais on peut toujours adopter des modèles simplifiés pour pouvoir obtenir des solutions approchées.

Dans ce chapitre, on expose d'une manière générale les différentes méthodes de calcul des structures de bandes.

II -1-1 L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin

Tout corps cristallin peut être considéré comme un système unique composé de particules légères (électron) et lourds (noyaux). Désignons Les électrons par r_1, r_2, \dots et R_1, R_2, \dots celle de noyaux.

Le problème théorique fondamental de la physique des solides est de comprendre l'organisation intime de ces particules à l'origine de leurs propriétés, mais dans ce cas la mécanique classique s'avère être insuffisante et il faut faire appel à la mécanique quantique dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger:

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{II -1})$$

Où H est l'hamiltonien du cristal résulte de la présence des forces électronique d'interaction: répulsion ou attraction suivant la charge des particules (ions, électrons).

$$H_{\text{total}} = T_e + T_n + V_{e-e} + V_{n-n} + V_{n-e} \quad (\text{II-2})$$

Où T_e et T_n sont les énergies cinétiques des électrons et des noyaux.

V_{e-e} , V_{e-n} , V_{n-n} sont les énergies potentielles d'interaction électron-électron, électron noyau, noyau-noyau respectivement.

$$T_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i \quad (\text{II-3})$$

$$T_n = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_K \Delta_K \quad (\text{II-4})$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} U_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II-5})$$

$$V_{e-n} = \sum_{i,k} U_{ik} = -\sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_K - \vec{r}_i|} \quad (\text{II-6})$$

$$V_{n-n} = \frac{1}{2} \sum_{k,l \neq k} U_{kl} = \frac{1}{2} \sum_{k,l \neq k} \frac{e^2 Z_k Z_l}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_k - \vec{R}_l|} \quad (\text{II-7})$$

Il est plus évident qu'on ne va pas obtenir une solution générale à cette équation. Car il s'agit d'un problème à N corps qui n'est résolu qu'en moyennant certaines approximations, parmi celle-ci:

II -1-2 L'approximation de Born – Oppenheimer

L'approximation de Born–Oppenheimer appelée aussi approximation adiabatique, une des plus appréciables approximations utilisées, lorsqu'on veut résoudre l'équation de Schrödinger pour un système plus complexe comportant un ou deux électrons, est l'approximation adiabatique dite l'approximation de Born-Oppenheimer [17]. Elle sépare le mouvement de l'électron de celui du noyau en se basant sur la notion que la masse du noyau est plus grande que celle de l'électron, pour cela les

noyaux sont fondamentalement .En adoptant cette hypothèse on simplifie notablement l'équation de Schrödinger puisque:

- l'énergie cinétique des noyaux devient nulle, $T_{nn}=0$.
- L'énergie d'interaction des noyaux devient constante, mais que l'on peut pas un choix convenable de l'origine tout aussi bien rendre nulle $V_{nn}=0$.

Nous pouvons définir un nouvel l'hamiltonien, c'est l'hamiltonien des électrons H_e

$$H_e = T_{ee} + V_{ee} + V_{en} \quad (\text{II -8})$$

L'équation de Schrödinger peut s'écrire:

$$[T_{ee} + V_{ee} + V_{en}] \Psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_e(\mathbf{r}) \Psi_e(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (\text{II-9})$$

Cette équation transcrit l'évolution d'un système à N corps et demeure un problème très difficile non résolu, à cause de la complexité des interactions électron-électron, pour simplifier ce problème, on se place dans l'approximation à un électron qui est appelée l'approximation de Hartree-Fock.

II -1-3 Approximation à un électron

Cette approximation ramène le problème à N corps au problème à un électron. Elle consiste à supposer que chaque électron évoluent dépendamment dans un potentiel moyen crée par les noyaux et l'ensemble des autres électrons.

L'hamiltonien peut alors être écrit comme une somme d'hamiltonien décrivant un seul électron comme suit:

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

Avec:

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

$\Omega_i(r_i)$ représente l'énergie potentielle de l'électron i soumis à l'action du champ produit par tous les autres électrons, et $V_i(r_i)$ représente son énergie potentielle dans le champ produit par tous les noyaux du cristal.

Puisque l'hamiltonien ne renferme plus de termes représentant les énergies d'interaction des électrons, La fonction d'onde du système électronique entier, quant à elle, a la forme d'un produit de fonctions d'ondes de chacun des électrons, et l'énergie de ce système est égale à la somme des énergies de tous les électrons, soit:

$$\Psi_e(r_1, r_2, \dots) = \prod_i \Psi_i(r_i) \quad (\text{II-12})$$

$$E_E = \sum_i E_i \quad (\text{II-13})$$

Avec

$$H_i \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (\text{II-14})$$

Ceci montre que la mise en œuvre du champ self-consistent permet de réduire le problème pour les électrons multiples à celui pour l'électron unique.

Tel que:

$$\Omega_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right|} \quad (\text{II-15})$$

Si nous reportons l'expression de $\Omega_i(r_i)$ dans l'équation de Schrödinger nous obtenons ce qu'on appelle l'équation de Hartree:

$$-\frac{\hbar}{2m} \Delta_i \Psi_i(\vec{r}_i) + \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right|} \right] \Psi_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i, R_1, R_2, \dots) \Psi_i(\vec{r}_i) = E_i \Psi_i(\vec{r}_i) \quad (\text{II-16})$$

Le calcul de $\Omega_i(r_i)$ se fait par une méthode self-consistent, c'est-à-dire, en adoptant pour approximation d'ordre zéro certaines fonctions $\Psi_j(r_j)$, on les utilise pour calculer les $\Omega_i(r_i)$. En reportant les valeurs de $\Omega_i(r_i)$ calculées dans l'équation de Hartree on déterminera de nouvelles fonctions $\Psi_j(r_j)$ à l'aide desquelles on calculer des nouvelles valeurs de $\Omega_i(r_i)$ et

ainsi de suite. Ce processus devra être poursuivi jusqu'à ce que la $(n+1)^{\text{ième}}$ approximation ne se confonde avec la $n^{\text{ième}}$ approximation avec un degré de précision fixé à l'avance.

Le principal défaut de l'équation de Hartree est qu'elle ne tient pas compte du principe de Pauli. Si on fait intervenir le principe de Pauli, on aboutit à l'équation de Hartree-Fock. Selon le principe de Pauli la fonction d'onde des électrons doit être antisymétrique par rapport à toute permutation de deux électrons, compte tenu de leurs coordonnées et des projections de leurs spins. Or le produit $\prod_i \Psi_i(\vec{r}_i)$ ne peut satisfaire à cette condition. Une combinaison convenable des fonctions d'onde d'électrons pris à part est décrite par le déterminant de Slater [18]:

$$\Psi_e(q_1, q_2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(q_1) \Psi_1(q_2) \dots \\ \Psi_2(q_1) \Psi_2(q_2) \dots \\ \dots \end{vmatrix} \quad (\text{II-17})$$

Où N est le nombre d'électrons et q_i représente une combinaison de quatre variables x_i , y_i , z_i , s_{z_i} .

Utilisant le déterminant de Slater, nous trouvons l'expression définissant l'énergie E_i (l'équation de Hartree-Fock):

$$E_i = \int \Psi_e^*(q_1, \dots) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(r_i, \dots, R_1, \dots) \right] \Psi_e(q_1, \dots) dq_e + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \int \Psi_e^*(q_1, \dots) \frac{e^2}{\left| \begin{matrix} \vec{r}_i - \vec{r}_j \\ i \quad j \end{matrix} \right|} \Psi_e(q_1, \dots) dq_e \quad (\text{II-18})$$

dq_e représente un élément de volume dans l'espace de configuration du système d'électrons comprenant la variable spin électronique.

II -1-4 Méthode du Pseudo-potentiel

La théorie du pseudo-potentiel a été mise au point par Herring en 1940 [19], 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.

L'approche du pseudo-potentiel est actuellement l'approche la plus utilisée pour la

détermination des structures de bandes électroniques et d'autres propriétés telles que la bande interdite, la dépendance de la température et de la pression avec la structure électronique, les propriétés chimiques...etc.

II -1-4-1 Méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M)

C'est une autre variante de la méthode du pseudo-potentiel, elle est utilisée 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 de la constante 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, et aussi pour les semi-conducteurs de structure diamant et zinc blende [20]. 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 .

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 théorique aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux [21].

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 [22], avec :

$$V_P = \sum_G V_\alpha(r - R - \tau) \quad (\text{II-19})$$

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 [23]:

$$V_P(r) = \sum_{G \in G} V(G) \exp(iG \cdot r) \quad (\text{II-20})$$

Avec

$$V(G) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(G) V_{\alpha}(G) \quad (\text{II-21})$$

$V_{\alpha}(G)$ 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 [24]:

$$S_{\alpha}(G) = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_r \exp(iG \cdot r) \quad (\text{II-22})$$

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:

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) + V_B(G)] \quad (\text{II-23})$$

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

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

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

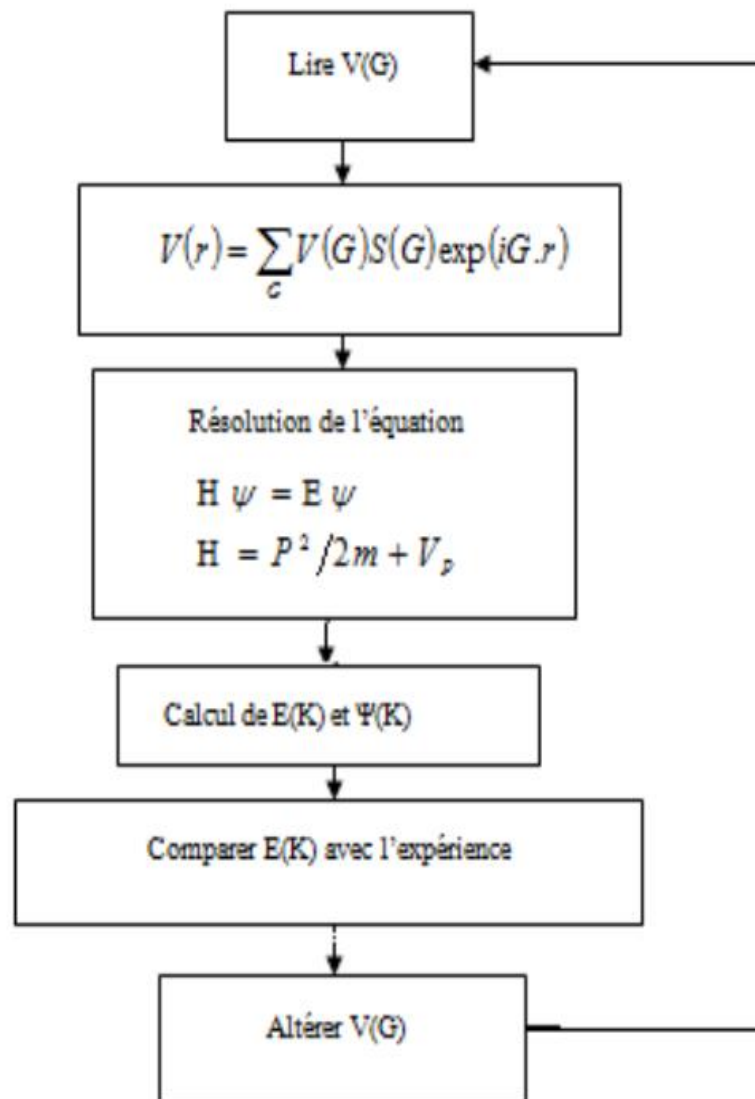


Figure II-1 Diagramme de la procédure de calcul par EPM

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' à la convergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées. Généralement, un nombre réduit de cycles est nécessaire, pour obtenir un bon accord entre la théorie et l'expérience pour les propriétés optiques, la densité de charge et la structure de bandes. Aussi un nombre réduit de facteurs de forme est suffisant pour déterminer chaque potentiel atomique. Pour nos calculs, la procédure d'ajustement des facteurs de forme se base sur la méthode non-linéaire des moindres carrés. Elle suppose que la déviation (rms) des énergies calculées par rapport aux énergies observées soit minimale.

$$\delta = \left[\frac{\sum_{i,j} [\Delta E^{(j)}]^2}{(m-N)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II-25})$$

$$\Delta E \uparrow ((i, j)) = E \downarrow \text{exp} \uparrow ((i, j)) - E \downarrow \text{calc} \uparrow ((i, j)) \quad (\text{II-26})$$

Ou E_{exp} et E_{calc} sont, respectivement, les énergies observées et calculées entre le $i^{\text{ème}}$ état de vecteur d'onde $K=K_i$ et le $j^{\text{ème}}$ état $K=K_j$, respectivement; dans la $m^{\text{ème}}$ paire (i, j) , N est le nombre de paramètres.

II-2 L'approximation du cristal virtuel (VCA)

II-2-1 Le cas d'un alliage ternaire

L'approximation du cristal virtuel (VCA) est la proche le plus simple, elle considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen. Cet alliage ternaire de la forme $A_x B_{(1-x)} C$ est composé des molécules AC avec une fonction molaire $(1-x)$ et des molécules BC avec une fonction molaire (x) [25].

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter

cet alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [26].

La valeur moyenne $\overline{F(X)}$ de la propriété physique de l'alliage ternaire, peut être liée linéairement à la concentration stœchiométrique (x) par la relation suivante:

$$\overline{F(x)}_{A_{1-x}B_xC} = x F_{BC} + (1-x) F_{AC} \quad (\text{II-27})$$

Certaines propriétés suivant une interpolation linéaire, comme le paramètre de réseau donné par la loi de Végard [27]:

$$\overline{a(x)}_{A_{1-x}B_xC} = x a_{BC} + (1-x) a_{AC} \quad (\text{II-28})$$

a_{BC} est la constante du réseau du composé BC.

a_{AC} est la constante du réseau du composé AC.

X est la concentration molaire.



Chapitre III :

*Propriétés élastiques et vibrationnelle
des semi-conducteurs*

Chapitre III : Propriétés élastiques et vibrationnelle des semi-conducteurs

III-1 Les propriétés élastiques

III-2 Introduction

Les physiciens ont été, depuis des siècles, tentés de mettre en équations, le comportement élastique de la matière. Plus ou moins générales, précises ou robustes, ces modélisations s'appuient sur la représentation du phénomène à l'aide de champs vectoriels et de tenseurs. Ceux-ci décrivent, en particulier, la déformation de l'objet ainsi que les contraintes internes qu'ils subissent.

III-3 Le tenseur de déformation

Les déformations d'un objet sont mesurées à partir d'une position initiale, qui est généralement, la position de repos de l'objet dans laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet.

Pour exprimer la déformation uniforme d'un cristal sous l'effet d'une contrainte, considérons un repère orthonormé par trois vecteurs u_1 , u_2 et u_3 liés au solide non déformé. Après une déformation supposée assez petite pour respecter le domaine élastique, ces trois vecteurs changent d'orientation et de longueur (figure III.1).

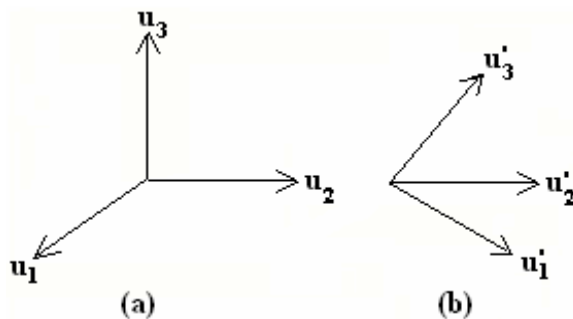


Figure III-1 Axe de coordonnées : (a) état initial, (b) état déformé

Le solide pouvant se déformer dans les trois directions de l'espace. Un développement de R en série Taylor avec $R(O) = 0$ donnera alors :

$$\mathbf{X}_{\varepsilon_{xx}} = \mathbf{X} \frac{\delta U}{\delta X} \quad \mathbf{Y}_{\varepsilon_{xx}} = \mathbf{X} \frac{\delta U}{\delta Y} \quad (\text{III-29})$$

Les composantes de la déformation seront définies par les relations suivantes:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial u_j} + \frac{\partial u_j}{\partial u_i} \right) \quad (\text{III-30})$$

Avec ($\mathbf{X}_1 = X, \mathbf{X}_2 = Y, \mathbf{X}_3 = Z$)

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\delta u_x}{\delta X} \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\delta u_y}{\delta Y} \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\delta u_z}{\delta Z} \quad (\text{III-31})$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial u_y} + \frac{\partial u_y}{\partial u_x} \right) \quad \varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial u_z} + \frac{\partial u_z}{\partial u_y} \right) \quad \varepsilon_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial u_z} + \frac{\partial u_z}{\partial u_x} \right) \quad (\text{III.32})$$

Le tenseur de déformation symétrique $\overline{\varepsilon}$ s'écrit :

$$\overline{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{III-34})$$

III-4 Le tenseur des contraintes

Après la description de la déformation, nous introduisant ici le tenseur des contraintes qui va décrire en chaque point de l'espace la répartition des forces internes. Rappelons que la contrainte, est la force qui s'exerce sur l'unité de surface du solide.

III-4-1 Définition

Le tenseur des contraintes, noté $\overline{\sigma}$ est une matrice symétrique 3x3. C'est tout comme le tenseur des déformations, une approximation assez grossière de ce qui se passe en chaque point du matériau Figure (II-2).

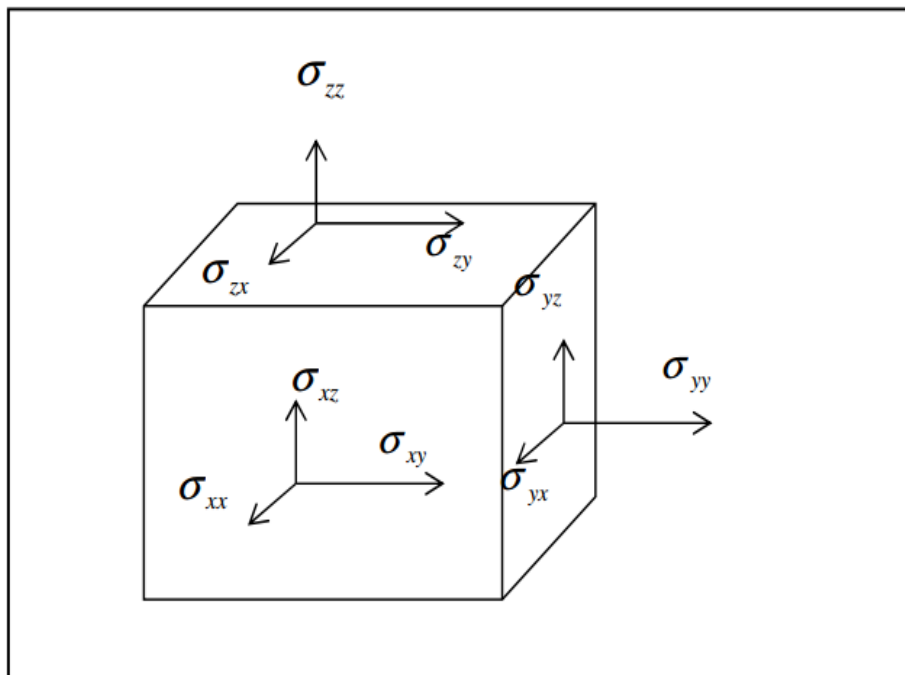


Figure III-2 Les composantes du tenseur des contraintes

Ces composantes, notées σ_{ij} , sont les éléments du tenseur $\overline{\sigma}$, l'indice i repérant la direction dans laquelle s'exerce la contrainte et l'indice j se référant à la face sur laquelle elle s'exerce. Chaque élément σ_{ij} , représente alors une force par unité

de surface ou bien une pression. Les éléments σ_{ij} , sont appelés contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement à la face. Les éléments $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, avec $i \neq j$ sont les contraintes tangentielles puisqu'elles agissent sur le plan de la surface, Le tenseur des contraintes est symétrique et s'écrit:

$$\overline{\sigma} = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_{XX} & \mathcal{E}_{XY} & \mathcal{E}_{XZ} \\ \mathcal{E}_{XY} & \mathcal{E}_{YY} & \mathcal{E}_{YZ} \\ \mathcal{E}_{XZ} & \mathcal{E}_{YZ} & \mathcal{E}_{ZZ} \end{bmatrix} \quad (\text{III-35})$$

III-5 La loi de Hooke

Le tenseur des contraintes $\overline{\sigma}$ (la cause) et le tenseur des déformations $\overline{\varepsilon}$ (l'effet) sont liés par le tenseur des constantes élastiques \overline{C} par:

$$\overline{\sigma} = \overline{C} \overline{\varepsilon} \quad (\text{III-36})$$

La notation en indice contracté permet d'écrire cette relation:

$$\sigma_{ij} = C_{i,j,k,l} \varepsilon_{k,l} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \sigma_{ij} : \text{est un element de tenseur de rang 2} \\ \varepsilon_{k,l} : \text{est un element de tenseur de rang 2} \\ C_{i,j,k,l} : \text{est un element de tenseur de rang 4} \end{cases}$$

Dans le cas d'une symétrie cubique [100], et en utilisant un repère dont les axes sont parallèles aux directions cristallographiques [100], [010] et [001] dans le système cubique, il ne reste que trois éléments indépendants $C_{\alpha\beta}$ non nuls: C_{11} , C_{12} et C_{44} pour déterminer les propriétés élastiques du milieu. La matrice \overline{C} s'écrit:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{III-37})$$

Avec C_{11} , C_{12} , C_{44} les 3 composantes indépendantes non nulles.

III-6 Les propriétés Vibrationnelles (phonons)

III-6-1 Introduction

Les propriétés vibrationnelles d'un solide ont un grand impact sur ses caractéristiques physiques, comme par exemple l'évolution de la chaleur spécifique en fonction de la température ou les effets de dilatation thermique [28].

Les atomes vont vibrer autour de leurs positions d'équilibre. L'énergie d'une vibration est quantifiée et le quanta d'énergie est appelé phonon (par analogie avec les photons). Cependant, pour la plupart des applications, un phonon se comporte comme si sa quantité de mouvement était $\hbar k$, parfois appelée quantité de mouvement du cristal.

III-6 -2 Vibrations des réseaux monoatomiques

Considérons les vibrations élastiques d'un cristal dont la maille primitive contient un Atome. Nous voulons déterminer la fréquence de l'onde en fonction du vecteur d'onde qui décrit cette onde et des constantes élastiques [28].

La solution mathématique la plus simple pour un cristal cubique correspond aux directions de propagation [100], [110] et [111]. Ces directions sont associées respectivement aux arêtes du cube, aux diagonales des faces et à la diagonale principale. Quand une onde se propage dans une de ces directions, des plans entiers se déplacent en phase ; le mouvement est parallèle ou perpendiculaire au vecteur d'onde. Nous pouvons décrire par une seule coordonnée U_s , le déplacement du plan s par rapport à sa position d'équilibre. Le problème est alors unidimensionnel. A' chaque vecteur d'onde

correspondent trois modes : un mode de polarisation longitudinale (fig. III -3) et deux modes de polarisation transverse (Fig. III -4).

L'équation de mouvement du plan s est :

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \tag{III-38}$$

où M est la masse d'un atome.

Nous cherchons des solutions telles que tous les déplacements aient une dépendance en temps de la forme $e^{-i\omega t}$. On obtient alors $\frac{d^2 u_s}{dt^2} = -\omega^2 u_s$, et équation (III-38) donne :

$$-M \omega^2 u_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \tag{III-39}$$

Cette équation ne contient que des combinaisons linéaires des déplacements. Elle admet pour solutions des ondes de propagation de la forme :

$$u_{s\pm 1} = u \exp(isqa) \exp(\pm iqa) \tag{III-40}$$

Où a est la distance entre plans et q le vecteur d'onde.

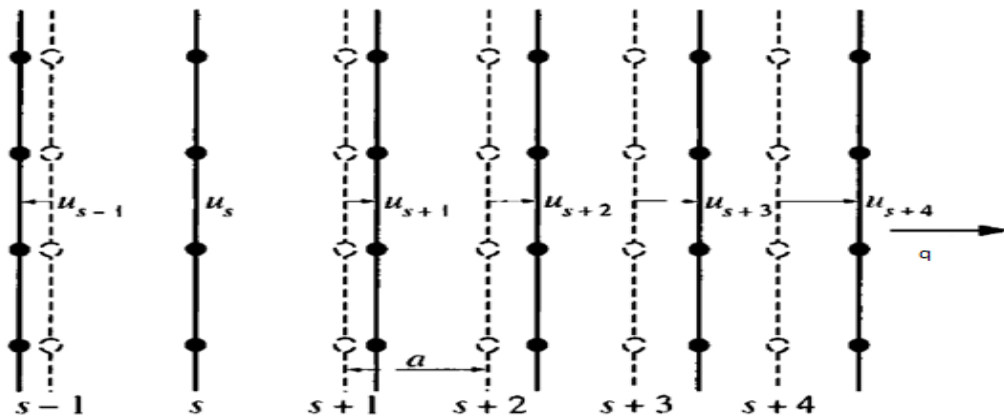


Figure III-3 (En pointillés) plans d'atomes à l'équilibre. (En traits pleins) plans d'atomes déplacés par une onde longitudinale. La coordonnée u mesure le déplacement des plans [28].

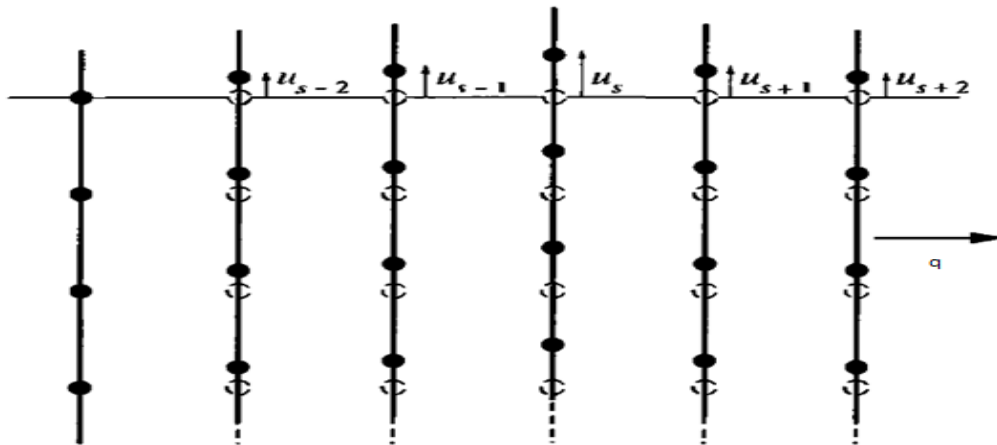


Figure III-4 Plans d'atomes déplacés par le passage d'une onde transverse [28].

III-6-3 Cas d'un cristal à une dimension

On considère un cristal à une dimension géométrique et ayant 2 atomes par maille élémentaire tel que décrit sur la Figure III.5 :

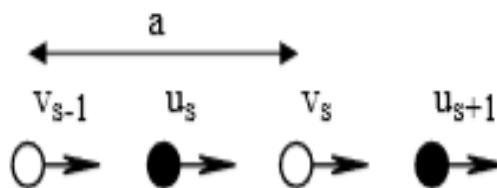


Figure III -5 Schéma d'un cristal à une dimension [29].

On suppose que les atomes "noirs" ont une masse M_1 et on note $u_s, u_{s+1} \dots$ leurs déplacements par rapport à leurs positions à l'équilibre. Les atomes "blancs" ont une masse M_2 et on note $v_s, v_{s-1} \dots$ leurs déplacements. De plus, on suppose que les atomes "blancs" et les atomes "noirs" sont couplés par une constante de rappel C. Si on suppose que chaque plan n'interagit qu'avec ses plus proches voisins, on a :

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \quad (\text{III-41})$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = c(u_s + u_{s+1} - 2v_s) \quad (\text{III-42})$$

Nous allons chercher des solutions sous la forme d'une onde de propagation :

$$u_s = u e^{is\bar{q}a} e^{-i\omega t} \quad \text{Et} \quad v_s = v e^{is\bar{q}a} e^{-i\omega t} \quad (\text{III-43})$$

Ce qui, par substitution dans (III-41) et (III-42), conduit à :

$$\begin{bmatrix} 2c - M_1 \omega^2 - c(1 + e^{-i\bar{q}a}) \\ -c(1 + e^{i\bar{q}a})2c - M_2 \omega^2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{III-44})$$

Le système de deux équations linéaires à deux inconnues n'a une solution non triviale que si le déterminant est nul, soit:

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2c(M_1 + M_2) \omega^2 + 2c(1 + \cos(qa)) = 0 \quad (\text{III-45})$$

Les deux solutions du polynôme (III.16) en ω^2 sont données par :

$$\omega^2 = c \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{2}{M_1 M_2} (1 + \cos(qa))} \quad (\text{III-46})$$

(On peut démontrer facilement que l'argument de la racine carrée dans (III-45) est bien positif). Cette relation est paire et $2\pi/a$ - périodique, on peut se contenter de la tracer sur une demi -zone de Brillouin :

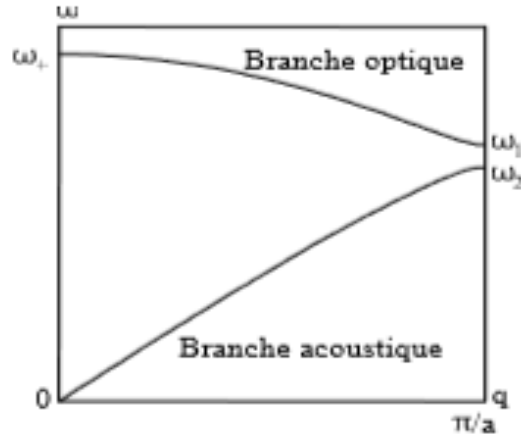


Figure III-6 Courbes de dispersion des vibrations dans un réseau linéaire de 2 atomes par maille primitive

On remarque deux branches distinctes avec une bande interdite en fréquence. La branche supérieure correspond au signe + et la branche inférieure au signe -. Près de l'origine, $qa \approx 0$ et les deux solutions de (III-46) sont :

$$\omega^2_+ = 2c \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{III-47})$$

$$\omega^2_- = \frac{c}{2(M_1 + M_2)} q^2 a^2 \quad (\text{III-48})$$

Notons que l'énergie $\hbar\omega_+$ est de l'ordre de 30 MeV dans les semi-conducteurs "usuels". La première solution correspond à la branche supérieure. Dans ce cas, on obtient en la reportant dans (III-44) que $\frac{u}{v} = -M_1/M$: les atomes vibrent en opposition de phase (Figure III.6). Une vibration de ce type pourrait être engendrée par le champ électrique d'une onde lumineuse, c'est pourquoi cette branche est appelée "optique".

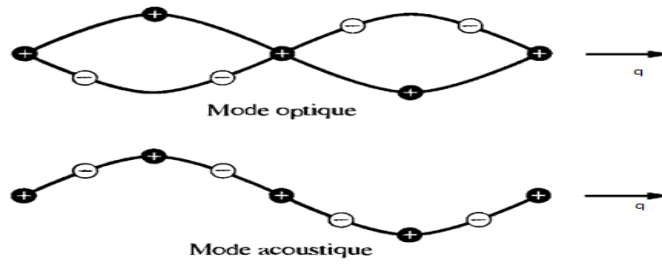


Figure III-7 Vibrations à une dimension transverses selon les branches acoustiques et optiques.

La seconde racine correspond à la branche inférieure. Dans ce cas, $u/v=1$ et les atomes vibrent en phase comme pour une excitation acoustique (Figure III-7) : c'est la branche "acoustique", dont le nom peut se justifier également par le fait que c'est la branche à basse fréquence.

Pour les grandes longueurs d'onde ($qa \approx \pi$), les deux racines pour les deux branches sont données par (avec $M_1 > M_2$) :

- Branche optique : $\omega_1^2 = \frac{2C}{M_2}$ (III-49)

- Branche acoustique : $\omega_2^2 = \frac{2c}{M_1}$ (III-50)

III-2-2 Généralisation à un cristal tridimensionnel

Dans un cristal tridimensionnel, l'espace réciproque devient également à trois dimensions et aux modes longitudinaux (acoustiques et optiques) que l'on a en a une dimension s'ajoute dans chaque cas deux modes transverses polarisés à 90° l'un de l'autre, comme illustré sur la Figure (III-8).

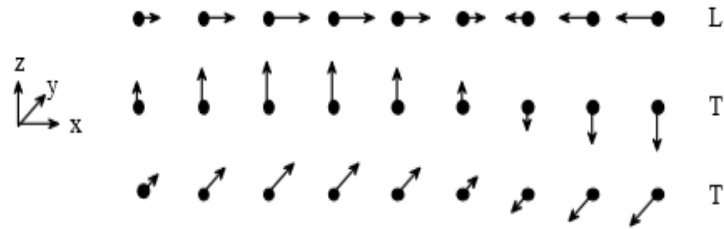


Figure III-8 Le mode de vibration longitudinal (L) et les 2 modes transverses (T) d'un réseau à trois dimensions.

On montre d'une manière générale que si la maille élémentaire contient p atomes, les courbes de dispersion sont constituées de $3p$ branches, dont 3 branches acoustiques et $(3p-3)$ branches optiques. Cela donne bien, pour $p = 2$, il y a donc 3 branches acoustiques et 3 branches optiques.

Les courbes de dispersion dépendent maintenant de la direction de propagation. Une allure typique est représentée sur la figure II.9 dans la direction $[100]$. En raison de la symétrie cristalline dans cette direction (ainsi que dans la direction $[111]$), les modes transversaux sont dégénérés, aussi l'on ne voit que 4 branches : longitudinale optique (LO), transverse optique (TA), longitudinale acoustique (LA) et transverse acoustique (TA) [29].

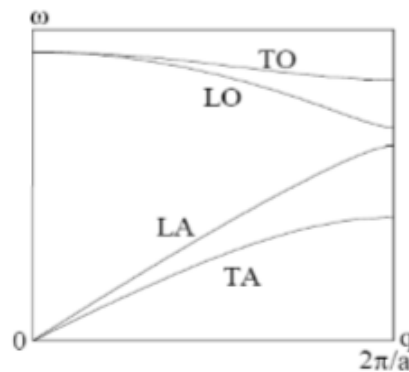


Figure III-9 Allure des courbes de dispersion dans un cristal pour de vibrations se propageant dans la direction $[100]$.



Chapitre IV :
Résultats et discussion

IV -1 Introduction

Des méthodes diverses ont été adoptées pour l'investigation des propriétés des matériaux semi-conducteurs. Dans ce présent travail, nous avons opté pour l'utilisation de la méthode empirique des pseudo potentiels (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA).

IV -2 Structure de bande des alliages ternaires $Ga_xIn_{1-x}As$

La structure de bandes d'énergie des semi-conducteurs étudiés ainsi que leurs alliages ternaire, dans la structure Zinc blende, a été calculé.

Les facteurs de formes (Ry) ajustés des semi-conducteurs parents GaAs et InAs ainsi que le paramètre de réseaux a (Å), sont illustrés dans le tableau IV -1.

Composé	Les facteurs de forme (Ry)						
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	a (Å)
							a (u.a)
GaAs	-0.235393	0.0126	0.057018	0.073883	0.05	0.01	5.653
							10.68419
InAs	-0.182147	0.00	0.047107	0.094714	0.05	0.03	6.058
							11.44963

Tableau IV -1 Facteurs de formes (Ry) et paramètres de réseaux. du GaAs et InAs

En utilisant ces facteurs de formes, le calcul des gaps d'énergies pour les composés binaires de notre alliage ternaire sont illustrés dans le tableau (IV -2). Nos résultats sont en très bonne accord avec l'expérience.

Composé	E_F^{Γ} (eV)	E_F^X (eV)	E_F^L (eV)
GaAs	1.42 ^a	1.90 ^a	1.71 ^a
	1.43 ^b	1.911 ^b	1.72 ^b
InAs	0.36 ^a	1.37 ^a	1.07 ^a
	0.359 ^b	1.37 ^b	1.07 ^b

Tableau IV -2 Gaps énergétiques des composés zinc-blende GaAs et InAs

^aNos calcul

^bRef. [30].

IV -3 Structure de bande de GaAs et InAs

IV -3-1 Le composé GaAs

Comme tous les semi-conducteurs composés III-V, le GaAs cristallise dans une structure de type zinc-blende. Il est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes de gallium Ga, l'autre les atomes de l'arsenic As. Le décalage entre les deux réseaux est d'un quart de la diagonale principale du cube. On a donc quatre paires d'atomes par cellule conventionnelle. Les liaisons tétraédriques covalentes telles que les liaisons Si-Si par exemple ou partiellement ioniques et partiellement covalentes telles que les liaisons Ga-As dans le cas qui nous concerne sont la base de la structure zinc-blende. En effet, chaque atome est l'origine de quatre liaisons orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier.

D'un point de vue énergétique, la relation de dispersion $E(k)$, présentant l'énergie en fonction du vecteur d'onde, montre que contrairement au silicium et au germanium où la transition est indirecte, le GaAs est un matériau à transition directe (Figure IV -1).

Avec un gap $E_g = 1,42$ eV à 300 K

IV -3-2 Le composé InAs

Comme tous les semi-conducteurs composés III-V, le InAs cristallise dans une structure de type zinc-blende. Il est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes d'indium In, l'autre les atomes de l'arsenic As.

D'un point de vue énergétique, la relation de dispersion $E(k)$, présentant l'énergie en fonction du vecteur d'onde, montre que contrairement au silicium et au germanium où la transition est indirecte, le InAs est un matériau à transition directe (Figure IV -2).

avec un gap $E_g = 0.36$ eV à 300 K.

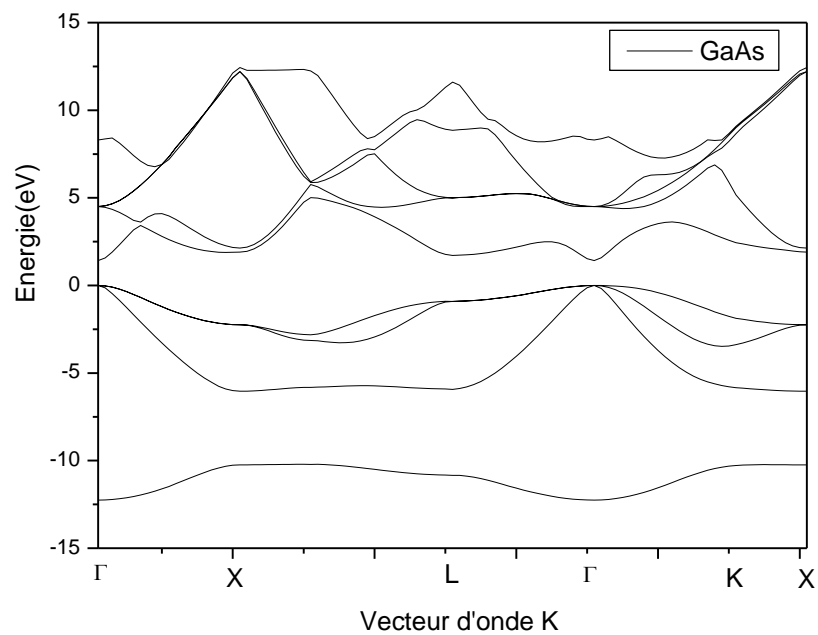


Figure IV -1 Structure de bande de composé GaAs

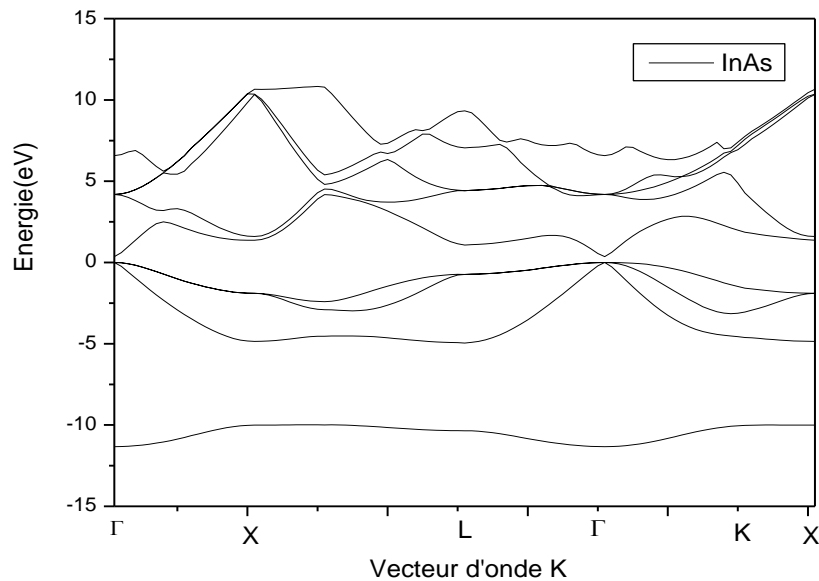


Figure IV -2 Structure de bande de composé InAs

Les spectres d'énergies obtenus pour $GaxIn_{1-x}As$ à différentes valeurs de x sont représentés sur les figures : IV -3, IV -4.

Le sommet de bande de valence pour tous les alliages semi-conducteurs et leurs parents est pris comme origine des énergies. On remarque que le maximum de la bande de valence est au point Γ dans la centre de la zone de Brillouin et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ . Ce résultat est remarqué pour tous les alliages ternaires étudiés. On peut conclure donc que tous ces matériaux sont des semi-conducteurs à gaps directs (la transition se fait du point Γ au point). On note aussi la présence de quatre bandes de valences distinctes. La plus basse des bandes de valence présente la forme habituelle attendue pour les semi-conducteurs qui cristallisent dans la structure zinc blende [31]. On remarque que les bandes de valences sont moins dispersives que les bandes de conduction. Cela est dû au fait que les électrons des bandes de conduction sont délocalisés. La première bande de conduction est surtout à caractère ionique.

Qualitativement, la structure des bandes électroniques des alliages étudiés sont presque similaire a ceux des composés binaires GaAs et InAs. Du point de vue qualitative la principale différence réside dans le changement de la valeur du gap énergétique fondamental.

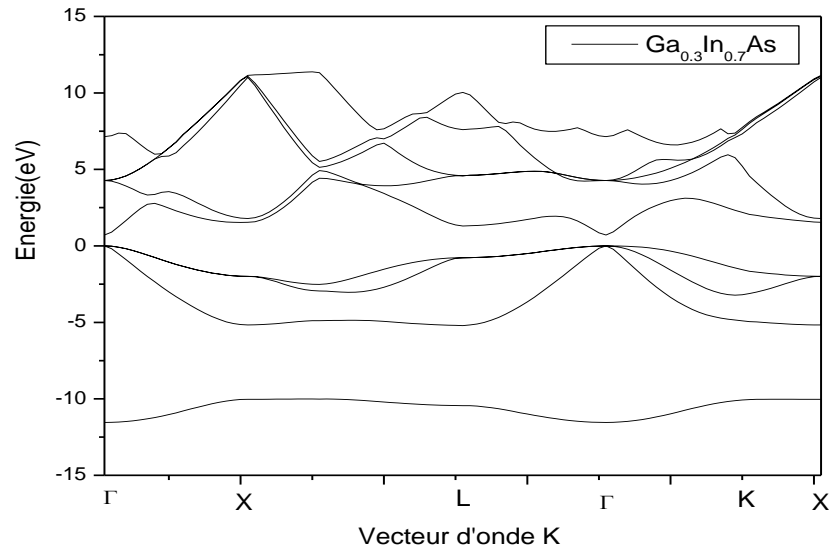


Figure IV -3 Structure de bande de composé $Ga_{0.3}In_{0.7}As$

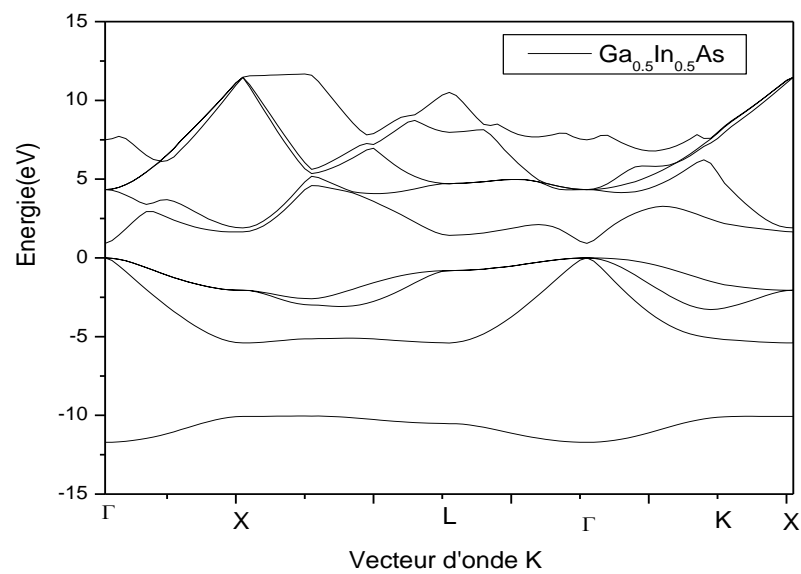


Figure IV -4 Structure de bande de composé $Ga_{0.5}In_{0.5}As$

IV -4 Variation du gap de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la concentration x

Les variations des gaps énergétique de la bande interdite directe (E_F^{Γ}) et indirecte (E_F^X), (E_F^L) calculées en fonction de la concentration x des alliages ternaires $Ga_xIn_{1-x}As$ est représentée sur les figures IV-5, IV-6, IV-7, IV-8. On note que la concentration x varie en allant de x=0,1 a x=0,9 on note que le gap énergétique varie d'une façon monotone avec un faible paramètre de courbure (la variation est presque linéaire).

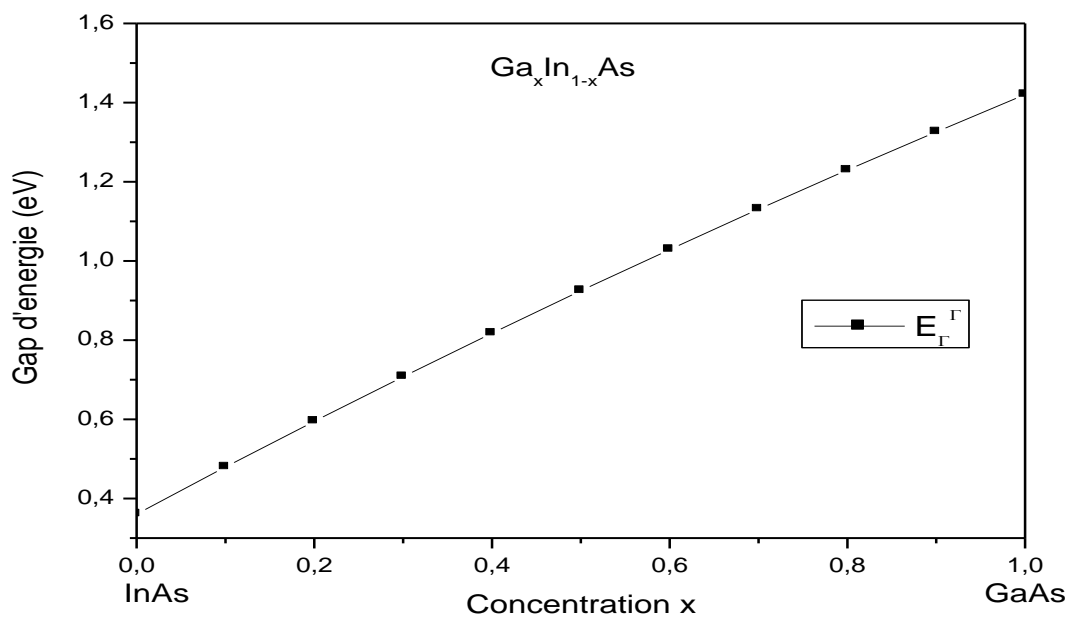


Figure IV-5 La variation du gap direct (E_F^{Γ}) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$.

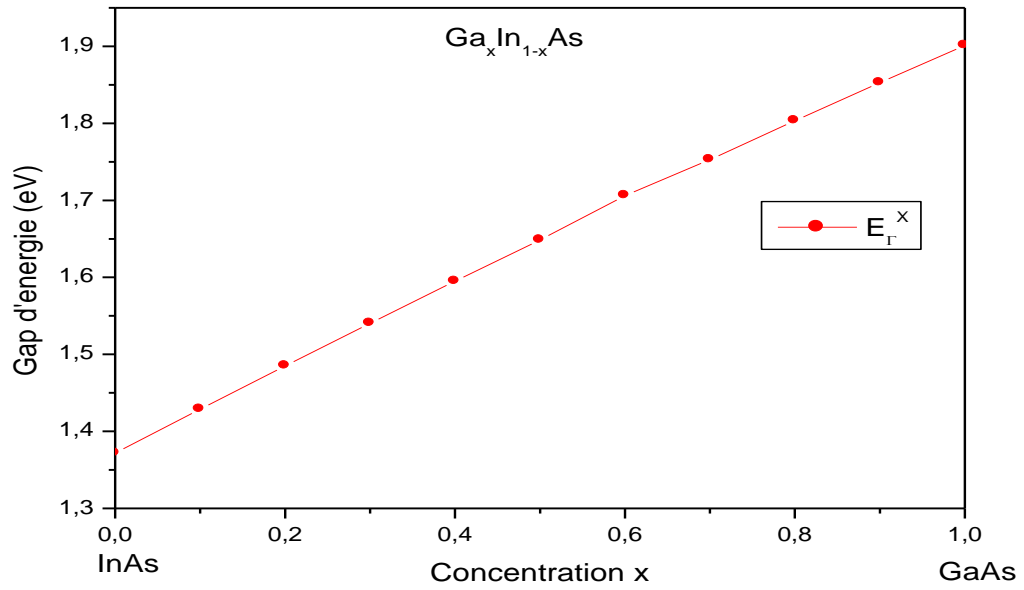


Figure IV-6 La variation du gap indirect (E_{Γ}^X) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$

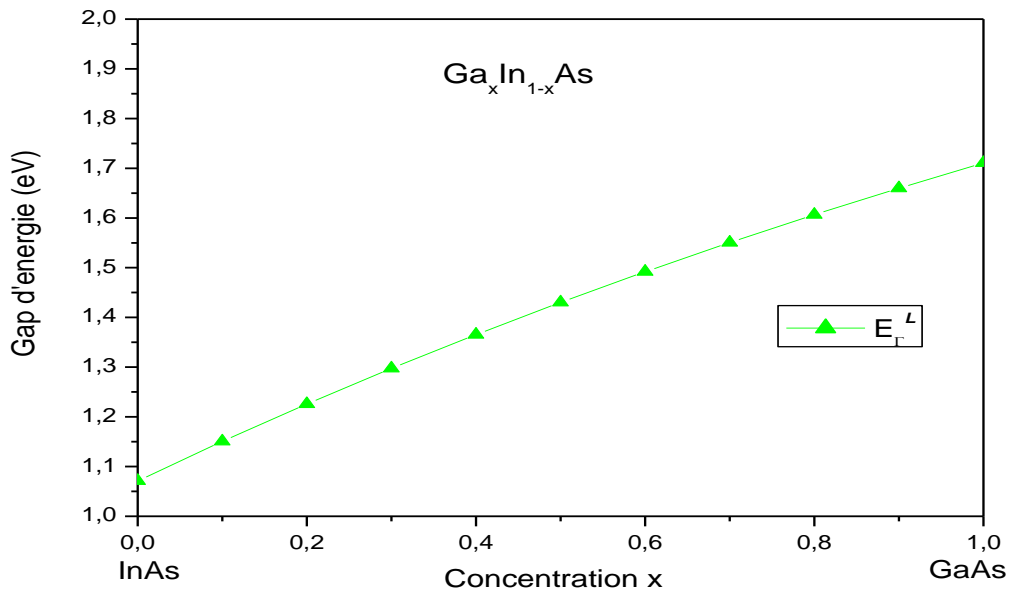


Figure IV-7 La variation du gap indirect (E_{Γ}^L) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $Ga_xIn_{1-x}As$

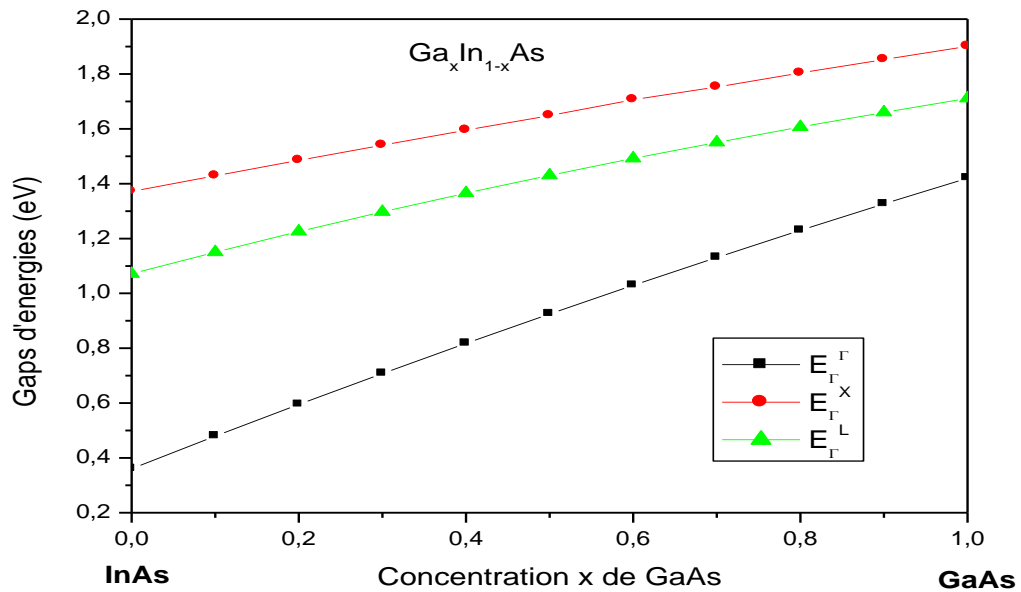


Figure IV-8 La variation du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) et des gaps indirects (E_{Γ}^X) et (E_{Γ}^L) en fonction de la concentration x de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As$

La Figure (IV-8) représente les courbes de la variation des gaps énergétiques E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X et E_{Γ}^L en fonction de la concentration x. On constate qu'il n'y a pas des transitions entre les gaps énergétiques. Ce qui confirme nos résultats précédents, que notre alliage à un gap direct en allant de x=0 vers x=1.

Les gaps sont exprimés par les relations analytiques suivantes :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 0,36 + 1,19x - 0,13x^2 \quad (\text{IV-51})$$

$$E_{\Gamma}^X = 1,37 + 0,58x - 0,053x^2 \quad (\text{IV-52})$$

$$E_{\Gamma}^L = 1,072 + 0,79x - 0,16x^2 \quad (\text{IV-53})$$

IV-5 Les propriétés élastiques

Les propriétés élastiques des solides ont un grand intérêt pour connaître des informations importantes sur la mécanique et les propriétés dynamiques des matériaux. Les propriétés élastiques sont également liées thermodynamiquement avec la chaleur spécifique, la température de Debye, point de fusion, etc. Elles jouent un rôle très important dans la détermination de la résistance des matériaux [32].

IV-5-1 Les Constants élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44}

En raison de symétrie, dans les structures zinc-blende (cubique), il existe uniquement trois constantes élastiques indépendante, à savoir : C_{11} , C_{12} et C_{44} dans ce présent travail les constantes élastiques C_{11} , C_{12} ont été calculé selon le modèle de Bouarissa [33], ou les constants élastique sont exprimée par :

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{4d^5m} (1 - \alpha_p^2)^{1/2} [4.37(5 + \lambda)(1 - \alpha_p^2) - 0.6075] \quad (\text{IV-54})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{4d^5m} (1 - \alpha_p^2)^{1/2} [4.37(3 - \lambda)(1 - \alpha_p^2) + 0.6075] \quad (\text{IV-55})$$

Ou : la polarité $\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)}$

m est la masse d'électron et d la distante entre les plus proches voisin, tel que : $d = \frac{\sqrt{3}a}{4}$, λ est un paramètre sans dimension qui a une valeur de 0,738 [34].

La constante élastique C_{44} a été déterminée on utilisant l'expression suivante, qui a été obtenue du modèle du champ de la force de valence [35, 36] :

$$C_{44} = \frac{3(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}{7C_{11}+C_{12}} \quad (\text{IV-56})$$

Nos résultats concernant, C_{11} , C_{12} et C_{44} des composés semi-conducteurs d'intérêt sont présentés dans le tableau (IV-3), qui contient aussi les résultats expérimentaux des semi-conducteurs. On remarque d'après ce tableau que nos valeurs des constantes élastiques sont en bon accord avec les valeurs de l'expérience [37].

Composé	C_{11} (10^{11} dyn /cm ²)	EXP (10^{11} dyn /cm ²)	C_{12} (10^{11} dyn /cm ²)	EXP (10^{11} dyn /cm ²)	C_{44} (10^{11} dyn /cm ²)	EXP (10^{11} dyn /cm ²)
InAs	6,43 ^a	8.329 ^b	2,84 ^a	4.526 ^b	2,58 ^a	3.959 ^b
$Ga_{0.1}In_{0.9}As$	7,03	-	3,09	-	2,82	-
$Ga_{0.2}In_{0.8}As$	7,62	-	3,35	-	3,06	-
$Ga_{0.3}In_{0.7}As$	8,21	-	3,55	-	3,29	-
$Ga_{0.4}In_{0.6}As$	8,81	-	3,85	-	3,54	-
$Ga_{0.5}In_{0.5}As$	9,41	-	4,10	-	3,788	-
$Ga_{0.6}In_{0.4}As$	10,02	-	4,36	-	4,02	-
$Ga_{0.7}In_{0.3}As$	10,64	-	4,62	-	4,29	-
$Ga_{0.8}In_{0.2}As$	11,27	-	4,89	-	4,55	-
$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	11,92	-	5,16	-	4,81	-
GaAs	12,57 ^a	11.88 ^b	5,44 ^a	5.38 ^b	5,08 ^a	5.94 ^b

Tableau IV-3 Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} des alliages semi-Conducteurs $Ga_xIn_{1-x}As$

^a Nos calculs.

^b Ref. [37].

Afin d'essayer de trouver une relation entre les constantes élastiques et la concentration x , nous avons tracé la variation de chaque constante élastique en fonction de la concentration $x = 0$ à 1 sur les figures (IV-9)-(IV-12). On remarque que toutes les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} augment d'une manière monotone avec l'augmentation de la concentration x . Qualitativement, ces constantes élastiques montrent un comportement similaire. Ces courbes sont interpolées par les équations suivantes :

$$C_{11}(10^{11} \text{ dyn/cm}^2) = 6.44 + 5.75x + 0.36x^2 \quad (\text{IV-57})$$

$$C_{12}(10^{11} \text{ dyn/cm}^2) = 2.84 + 2.42x + 0.16x^2 \quad (\text{IV-58})$$

$$C_{44}(10^{11} \text{ dyn/cm}^2) = 2.57 + 2.34x + 0.14x^2 \quad (\text{IV-59})$$

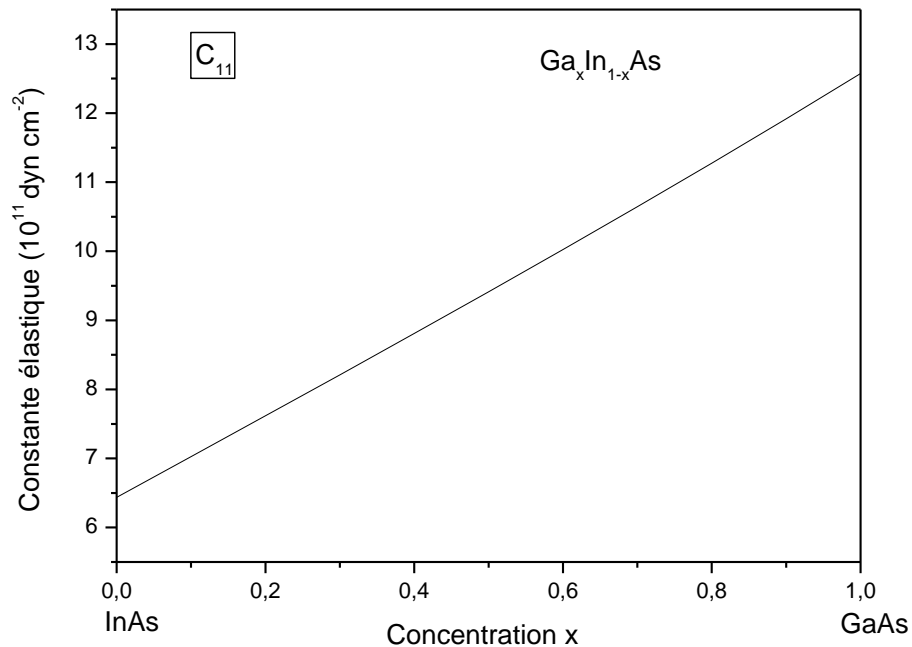


Figure IV-9 Constante élastique C_{11} de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la concentration x

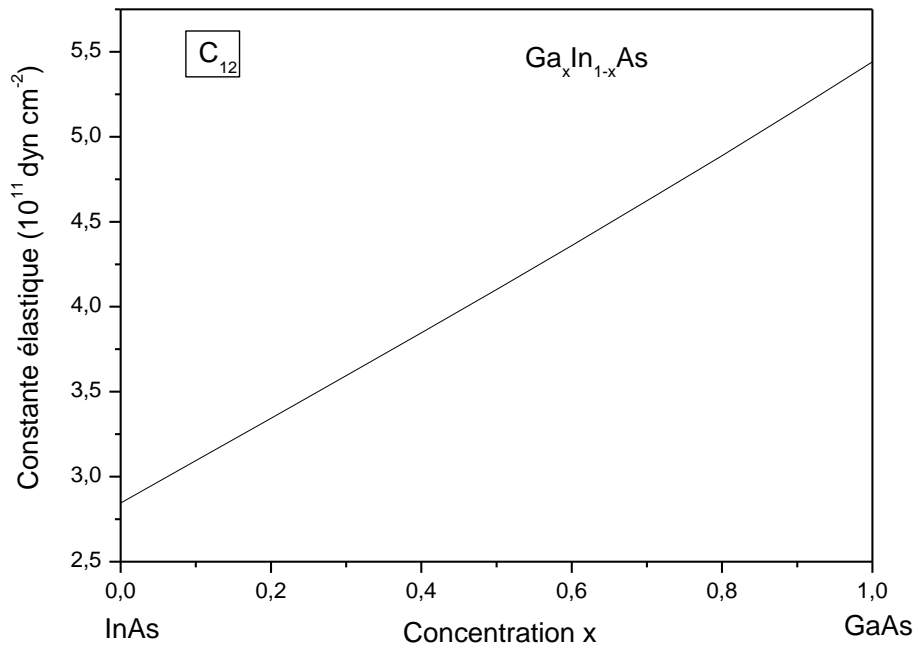


Figure IV-10 Constante élastique C_{12} de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la concentration x

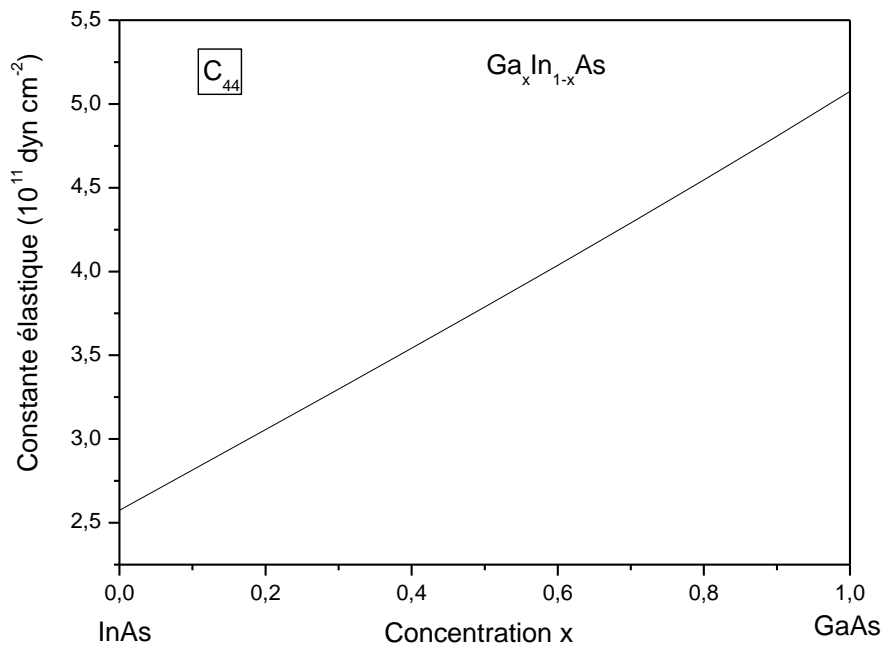


Figure IV-11 Constante élastique C_{44} de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la concentration x

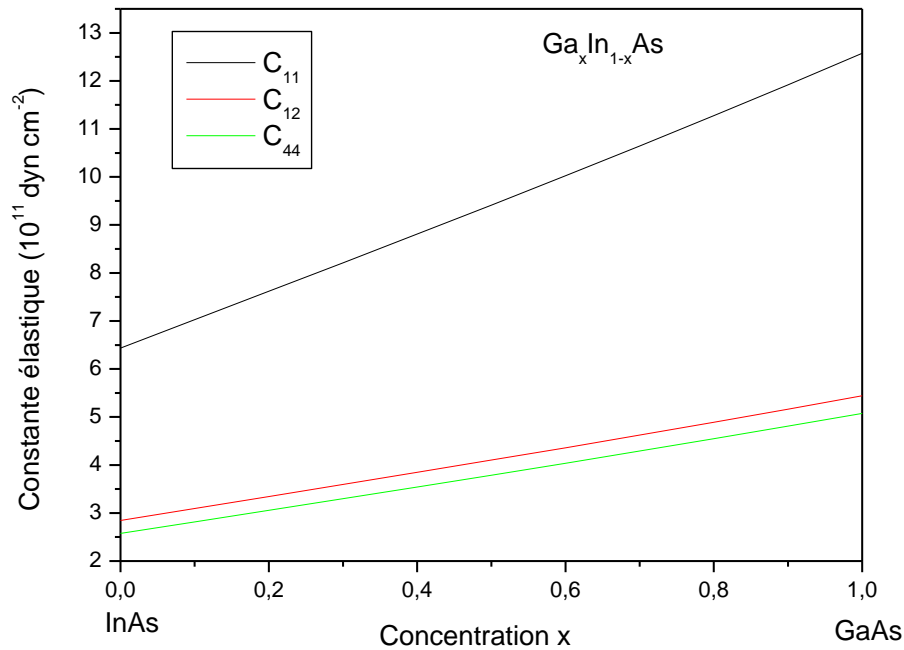


Figure IV-12 Constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de $Ga_xIn_{1-x}As$ en fonction de la concentration x

IV-6 Les propriétés Vibrationnelles (phonons) de $Ga_xIn_{1-x}As$

Dans cette partie, la détermination de la constante élastique permet de procéder à la vitesse du son global en utilisant les (Eqs.(IV-60) ,(IV-61)et (IV-62)). Les valeurs calculées numériquement de la vitesse en mode onde longitudinale (V_L) et de l'onde transversale (V_T) dans l'alliage ternaire semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans les directions [100], [110] et [111] ont été calculées en fonction de la concentration x en Ga, allant de 0 à 1, de la formules et présentes dans le tableau (IV-4). Nos résultats sont en très bonne accord avec l'expérience.

Direction de propagation de l'onde [100].

$$V_L = \left(\frac{C_{11}}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-60a})$$

$$V_T = \left(\frac{C_{44}}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-60b})$$

Direction de propagation de l'onde [110].

$$V_L = \left[\left(C_{11} + C_{12} + 2C_{44} / 2\rho \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-61a})$$

$$V_{T//} = V_T = \left(C_{44} / \rho \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-60b})$$

$$V_{T\perp} = \left[\left(C_{11} - C_{12} / 2\rho \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-61b})$$

Direction de propagation de l'onde [111].

$$V_L = \left[\left(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} / 3\rho \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-62a})$$

$$V_T = \left[\left(C_{11} - C_{12} + C_{44} / 3\rho \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-62b})$$

En

ρ : est le densité volumique, C_{ij} constante élastique des solides.

composé	[100]		[110]			[111]	
	V_L (10^5 cm/s)	V_T (10^5 cm/s)	V_L (10^5 cm/s)	$V_{T//} = V_T$ (10^5 cm/s)	$V_{T\perp}$ (10^5 cm/s)	V_L (10^5 cm/s)	V_T (10^5 cm/s)
InAs	3.37 ^a	2.09 ^a	3.5 ^a	2.09 ^a	1.78 ^a	3.62 ^a	1.9 ^a
	3.83 ^c	2.64 ^c	4.28 ^c	2.64 ^c	1.83 ^c	4.42 ^c	2.14 ^c
$Ga_{0.1}In_{0.9}As$	3.53	2.25	3.75	2.25	1.87	3.81	2.00
$Ga_{0.2}In_{0.8}As$	3.68	2.34	3.9	2.34	1.95	3.97	2.09
$Ga_{0.3}In_{0.7}As$	3.84	2.43	4.06	2.43	2.03	4.13	2.17
$Ga_{0.4}In_{0.6}As$	3.98	2.53	4.22	2.53	2.12	4.30	2.26
$Ga_{0.5}In_{0.5}As$	4.13	2.63	4.38	2.63	2.2	4.46	2.35
$Ga_{0.6}In_{0.4}As$	4.28	2.72	4.54	2.72	2.28	4.61	2.43
$Ga_{0.7}In_{0.3}As$	4.42	2.81	4.69	2.81	2.35	4.78	2.52
$Ga_{0.8}In_{0.2}As$	4.57	2.9	4.84	2.9	2.43	4.92	2.6
$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	4.71	3.00	5.00	3.00	2.51	5.07	2.68
GaAs		3.09 ^a				5.24 ^a	2.76 ^a
	4.87 ^a	3.35 ^b	5.14 ^a	3.09 ^a	2.58 ^a	5.40 ^b	2.80 ^b
	4.73 ^{b,c}	3.34 ^c	5.24 ^c	3.34 ^c	2.47 ^c	5.39 ^c	2.79 ^c

Tableau IV -4 Vitesses calculées des ondes acoustiques se propagent dans les directions [100], [110] et [111] pour $Ga_xIn_{1-x}As$ à ($0 \leq x \leq 1$).

V_L et V_T Correspondent aux vitesses du mode des ondes longitudinales et transversales respectivement.

^anos calculs, ^bRef [38], ^cRef [37].

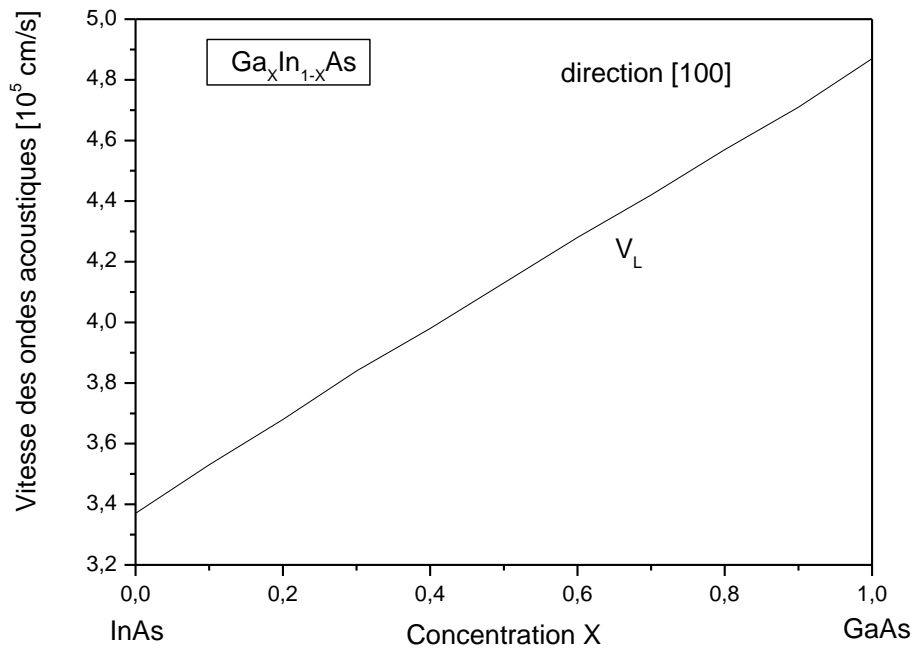


Figure IV-13 Vitesse du mode longitudinal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [100] en fonction de la concentration x

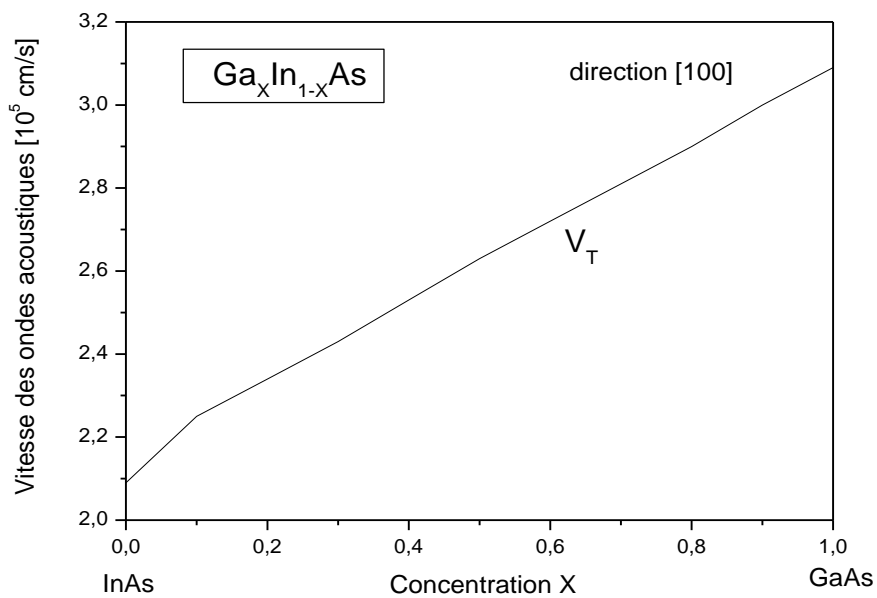


Figure IV-14 Vitesse du mode transversal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [100] en fonction de la concentration x

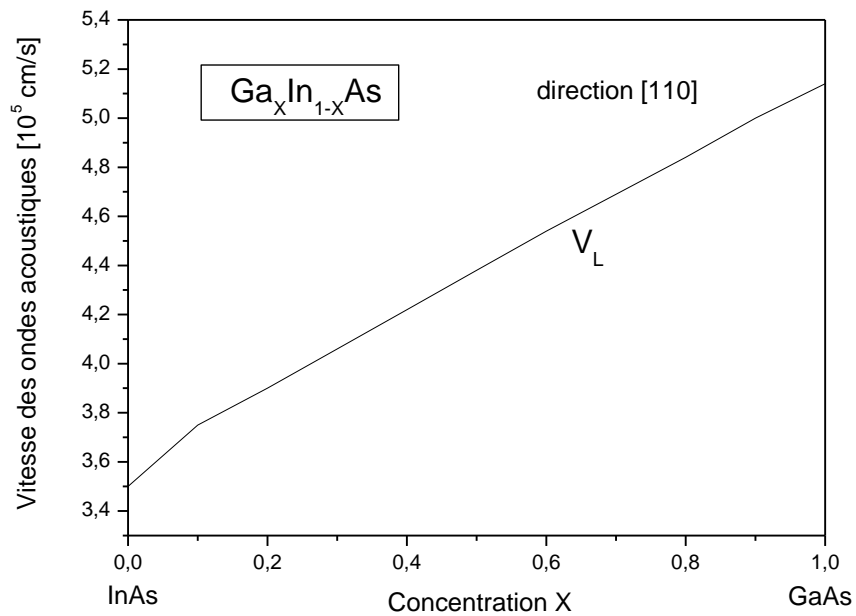


Figure IV-15 Vitesse du mode longitudinal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [110] en fonction de la concentration x

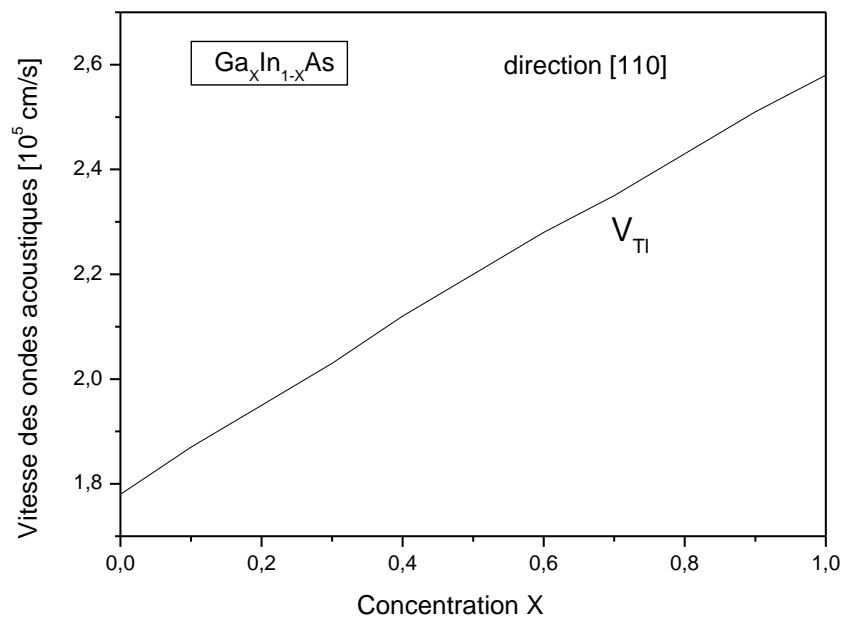


Figure IV-16 Vitesse du mode transversal vertical dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [110] en fonction de la concentration x

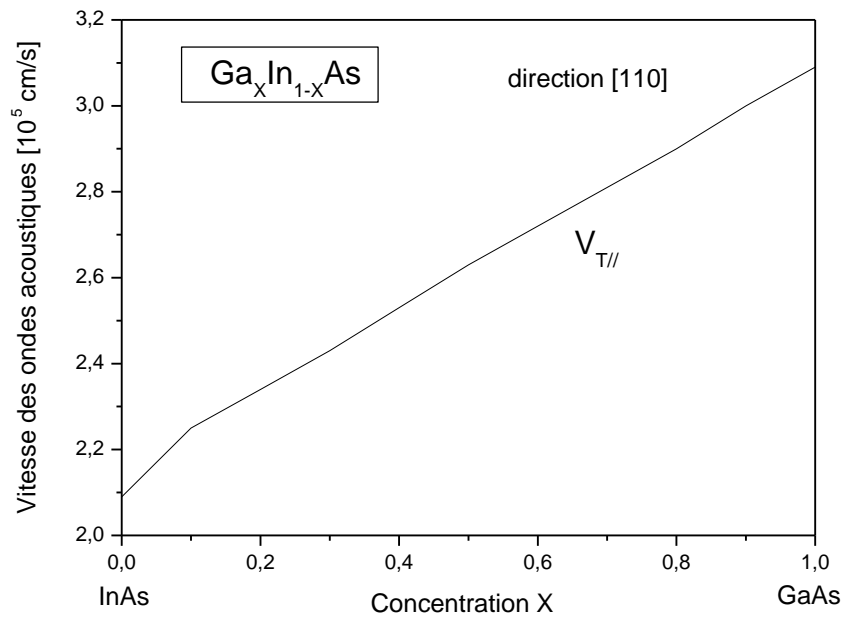


Figure IV-17 Vitesse du mode transversal parallèle dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction $[110]$ en fonction de la concentration x

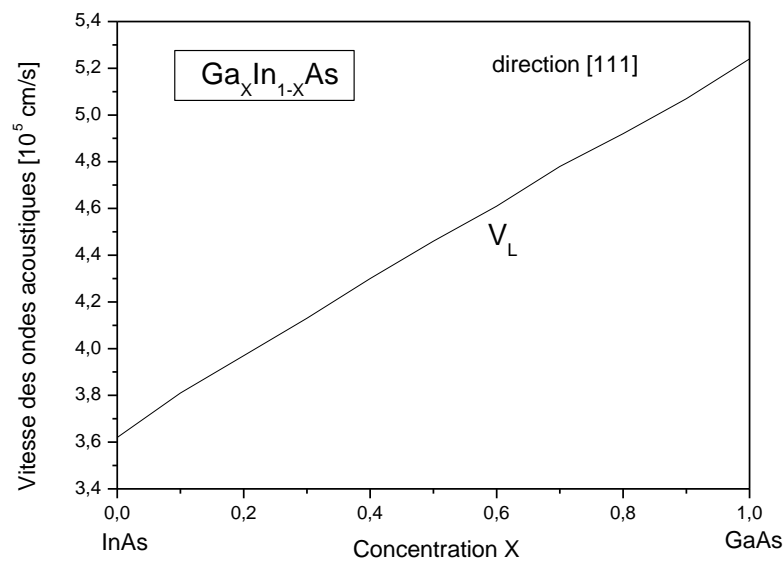


Figure IV-18 Vitesse du mode longitudinal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction $[111]$ en fonction de la concentration x

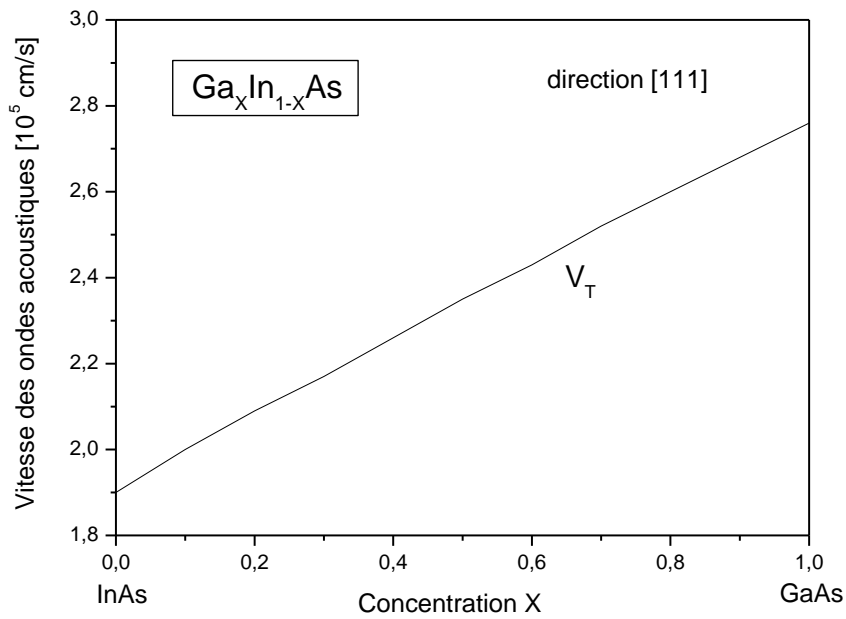


Figure IV-19 Vitesse du mode transversal dans $Ga_xIn_{1-x}As$ se propageant dans la direction [111] en fonction de la concentration x

Selon les figures (IV-13) - (IV-19), les mode vitesse V_L et V_T augmentent de façon monotone avec l'augmentation de la concentration x sur intervalle 0-1, ce qui indique de faibles paramètres de flexion (Eqs.(IV-63),(IV-64)et (IV-65)).

ces équations représentent les courbes expression analytique comme suit :

Direction [100] :

$$V_L (x 10^5 \text{cm/s}) = 3,37 + 1,53 x - 0,04 x^2 \quad (\text{IV-63a})$$

$$V_T (x 10^5 \text{cm/s}) = 2,12 + 1,08 x - 0,12 x^2 \quad (\text{IV-63b})$$

Direction [110] :

$$V_L (x 10^5 \text{cm/s}) = 3,53 + 1,81x - 0,216x^2 \quad (\text{IV-64a})$$

$$V_{T//} (x 10^5 \text{cm/s}) = 2,12 + 1,09x - 0,12x^2 \quad (\text{IV-63b})$$

$$V_{T\perp} (x 10^5 \text{cm/s}) = 1,78 + 0,87x - 0,07x^2 \quad (\text{IV-64c})$$

Direction [111] :

$$V_L (x 10^5 \text{cm/s}) = 3,63 + 1,712x - 0,112x^2 \quad (\text{IV-65a})$$

$$V_T (x 10^5 \text{cm/s}) = 1,903 + 0,92x - 0,066x^2 \quad (\text{IV-65b})$$



Conclusion générale

Conclusion générale

En conclusion, dans ce présent travail nous avons étudié les propriétés électroniques, élastiques, et ondes acoustiques des semi-conducteurs GaAs et InAs ainsi que leur alliage ternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ dans la phase zinc-blende. Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la concentration x allant de 0 à 1.

Les principaux résultats de notre investigation se résument ainsi :

- ❖ Le gap énergétique directe E_g^F augmente non-linéairement lorsque la concentration x augmente.
- ❖ Le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ est gap direct pour toutes les concentrations x allant de 0 à 1.
- ❖ Toutes les constantes élastiques du semi-conducteur $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ augmentent avec l'augmentation de la concentration x du gallium allant de 0 à 1. montrent que le semi-conducteur est élastiquement stable à l'équilibre thermodynamique de pression et de température.
- ❖ L'effet de concentration x sur les fréquences de phonons dans ces composés, Les fréquences des modes de vibrationnelles augmentent avec l'augmentation de la concentration x allant de 0 à 1 pour tous les éléments, III-V étudiés dans ce travail.

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

Bibliographie

- [1] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et composants électroniques »
édition Dunod, Paris (2001).
- [2] J. Chelikowsky and M. L Cohen Phys. Rev B14, 552 (1976).
- [3] M. Gell and *al.* Phys. Rev. B35, 1196 (1987).
- [4] Benatmane Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V.Mémoire de
magister
Université de Batna, (2011).
- [5] J. Chelikowsky and M. L Cohen Phys. Rev B14, 552 (1976).
- [6] M. Gell and *al.* Phys. Rev. B35, 1196 (1987).
- [7] S. Laval .Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été
d'optoélectronique(2002).
- [8] J.C. Phillips, Rev. Mod. Phys.42, 311 (1970).
- [9] R. Castagné et *all.* Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique,
technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [10] Henry Mathieu. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques,
Masson, (1987)
- [11] Gerald Bastard, Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures,
Les éditions de physique, paris, (1988).
- [12] John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors, Cambridge
University Press, (1998).
- [13] CAPPY. A, Propriétés physiques et performances potentielles des composants
submicroniques à effet de champ : structures conventionnelles et à gaz d'électrons,
Thèse d'état, Université de Lille France, (1986).

- [14] A.BECHRI, « effets de désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V », Thèse de Doctorat, Université de Constantine, 2006.
- [15] B.de Cremoux, Las diodes laser ;des principes aux développements récents.
- [16] S. Bacha, A. Bechiri, F. Benmakhlouf, N. Bouarissa, “Effects of substrate and compositional disorder upon optical and lattice vibration properties of quaternary semiconductor ” , Infrared physics & technology, Vol 63, 2014, P.22.
- [17] M.Born,J.R.Oppenheimer,Ann.Phys.87,457 (1927).
- [18] P. Kiréev. La physique des semiconducteurs. 2e édition, édition Mir. Moscou, (1975)
- [19] C. Herring, Phys. Rev. 57, 1169 (1940).
- [20] N. Y. Aouina, Thèse de magister, Université de M'sila, Algérie (2003).
- [21] D. Brust, Phys. Rev. 134, A1337 (1963); D. Brust and J. C. Phillips, Phys. Rev. Lett. 9, 94 (1962).
- [22] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [23] P. Vogl, J. Phys. C11 (1978) 251.
- [24] S. Zerroug, Mémoire de Magister, Institut de physique, Université Ferhat Abbas Setif (2004).
- [25] N. Bouarissa, Matter. Chem. Phys. 72 (2001) 387.
- [26] J.E. Bernard, A. Zunger, Phys. Rev. B36, 3199 (1987).
- [27] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [28] C.Kittel, Physique de l'état solide, Dunod, 1998.
- [29] Hassina LANGUEUR, Propriétés structurales, élastiques et dynamiques des semiconducteurs IV-IV ,p66-67, Thèse de doctorat, Université de Sétif, 2014
- [30] S.Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, John Wiley and Sons Ltd. Publication, 2009.

- [31] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.
- [32] : S Aouadi ; thèse doctorat ; Université de Annaba ; calcul ab initio des Propriétés Structurales, Élastiques, Électroniques, Optiques et dynamiques des semi-conducteurs III-V à base de phosphore ; (2009).
- [33] N. Bouarissa, Master. Che.Phys. 100 (2006) 41.
- [34] J. M. Baranowski, J. Pys. C 17 (1984) 6287.
- [35] W.A. Harrison, Electronic Structure and the proprieties of solids, Freeman, NewYork,1980.
- [36] S. G. Shen, J. Phys. Condens. Matter. 6 (1994) 8733.
- [37] S. Adachi, Properties of Groups IV, III-V, and II-VI Semiconductors, Wiley, Chichester, 2005.
- [38] M.Levinshtein, S, Rumyantsev, M. Shur(Eds.), Handbook Series on Semi-conductor parameters, vol. 2, World Scientific,Singapore, 1999.

Résumé

L'approche pseudo-potentielle empirique dans l'approximation des cristaux virtuels (VCA) est réalisée pour les propriétés structurales, les constantes élastiques et les vitesses du son acoustique se propageant dans les directions [100], [101] et [111] de la blende de zinc Dans $Ga_xIn_{1-x}As$, alliages semi-conducteurs dans la plage de concentration 0–1.

Nos résultats ont montré que toutes les propriétés d'intérêts varient d'une façon presque linéaire avec la concentration x , Cela va nous permettre d'avoir des nouveaux matériaux avec de nouvelles propriétés désirées.

Abstract

The empirical pseudo-potential approche within the virtual crystal approximation (VCA), is carried out for the structural properties, elastic constants and acoustic sound velocities propagating in the [100],[101] and [111] directions for zinc blende $Ga_xIn_{1-x}As$ semi-conducting alloys in the composition range 0–1.

Our results showed that all studied properties vary almost linearly with the concentration x , This gives the opportunity to have new materials with new desired properties.

ملخص

بدراسة الخواص البنوية، الثوابت المرنة والسرعات صوتية في الاتجاهات [100],[101] [111] للخلاتنظ الثلاثية $Ga_xIn_{1-x}As$ داخل بنية ZnS في مجموعة تركيز 0-1 من الحسابات شبه الكمون داخل تركيب البلورة الافتراضية (VCA).

بينت نتائجنا ان كل الخصائص المدروسة تتغير تقريبا خطيا مع ازدياد التركيز x . كل هذا يسمح لنا

بايجاد مواد جديدة بخصائص مرغوبة