

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° : PhAPP 07/2020



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique Appliquée

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: HENNI DJAHIDA

Intitulé

**Les constantes élastiques et les propriétés
mécaniques liées des alliages ternaires
semiconducteurs CdS_xTe_{1-x}**

Soutenu le / /2020 devant le jury composé de:

S. BOUNAB	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Président
F. MEZRAG	Université Mohamed Boudiaf- M'sila	Rapporteur
N. MEGAG	Université Mohamed Boudiaf-M'sila	Examineur

Année universitaire : 2019/2020

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions Dieu Tout-Puissant qui nous a donné la santé, le bien-être, le courage, la patience et la force de volonté qui nous ont permis d'achever le travail en cours.

*Nous remercions très sincèrement mon encadreur **Dr. Mezrag Fadila** d'avoir proposé et dirigé ce travail, mais surtout d'avoir ménagé son temps pour mettre à ma disposition tous les moyens nécessaires.*

*Je tiens à remercier, le président de jury, **Dr Bounab Sabrina** et l'examinatrice, **Dr Megag Nafissa**, pour l'honneur qu'elles m'ont fait en acceptant de juger ce travail.*

Mes remerciements vont également à tous les enseignants du département de physique.

Nous ne laisserons pas cette occasion passer, sans remercier tous les enseignants et le personnel de section de physique au cours des cinq années passées pour leurs aides et leurs précieux conseils et pour l'intérêt qu'ils portent à notre formation.

Enfin, nous remercions tous ceux qui ont contribué de près ou de loin au bon déroulement de ce projet.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à:

Mon père en particulier, qui m'a soutenu dans cette vie

Ma mère, qui dieu ait pitié d'elle

Mes frères, Mourad et Ismail

Mes sœurs, leurs filles, et je mentionne particulièrement Hadil et Malika.

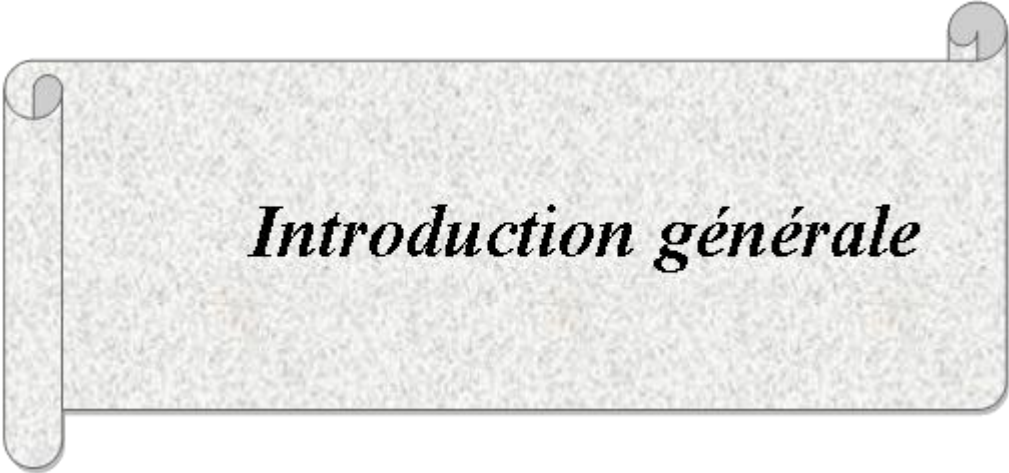
Mes amis, Achwaq et Soumia.

HENNI DJAHIDA

N°	Titre	Page
	Remerciement	i
	Dédicace	ii
	Tables des matières	iii
	Introduction Générale	1
	Références bibliographiques	3
Chapitre I : Propriétés physiques des semiconducteurs		
I.1	Introduction	4
I.2	Les propriétés électroniques	5
I.2.1	Bandes d'énergie	5
I.2.2	Structure de bandes électroniques	5
I.2.3	Gap direct-Gap indirect	5
I.3	Les propriétés structurales	6
I.3.1	La constante de maille	7
I.4	Les propriétés élastiques	8
I.4.1	Les tenseurs des contraintes	9
I.4.2	Les tenseurs de déformations	10
I.4.3	Les constantes élastiques	12
I.5	Les propriétés mécaniques	13
I.5.1	Module d de Young	13
I.5.2	Coefficient de Poisson	13
I.5.3	Modules de compression et de compressibilité	14
I.5.4	Module de cisaillement	15
I.5.5	Facteur d'anisotropie	15
I.6	Les applications des matériaux II-VI	15

I.7	Conclusion	16
Références bibliographiques citées dans le chapitre I		17
Chapitre II : Les alliages des semiconducteurs		
II.1	Introduction	19
II.2	Définition d'un semiconducteur	20
II.3	Les différents types des semiconducteurs	20
II.3.1	Semiconducteur intrinsèque	20
II.3.1.1	Semiconducteur intrinsèque à gap direct	21
II.3.1.2	Semiconducteur intrinsèque à gap indirect	22
II.3.2	Semiconducteur extrinsèque	23
II.3.2.1	Semiconducteur extrinsèque de type N	23
II.3.2.2	Semiconducteur extrinsèque de type P	24
II.4	Les composés semiconducteurs	25
II.5	Les alliages semiconducteurs	25
II.5.1	Les alliages semiconducteurs binaires	27
II.5.2	Les alliages semiconducteurs ternaires	27
II.5.2.1	Constante du réseau de l'alliage ternaire	27
II.5.2.2	Gap d'énergie de l'alliage ternaire	28
II.5.3	Les alliages semiconducteurs quaternaires	29
II.5.4	Les alliages semiconducteurs pentaires	31
II.6	L'approximation du cristal virtuel (VCA)	32
II.6.1	Cas d'un alliage ternaire II-VI	32
II.7	L'approximation du cristal virtuel améliorée	32
II.8	Conclusion	33
Références bibliographiques citées dans le chapitre II		34

Chapitre III : Résultats et discussion		
III.1	Introduction	35
III.2	Étude des propriétés électroniques	35
III.2.1	Structure de bandes des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}	35
III.3	Structure de bandes de CdS et CdTe	36
III.3.1	Le composé CdS	36
III.3.2	Le composé CdTe	36
III.4	Gap énergétique des alliages ternaires	38
III.5	Les propriétés élastiques	43
III.5.1	Constantes élastiques	43
III.5.2	Paramètres mécaniques	47
III.5.2.1	Module de compressibilité	47
III.5.2.2	Module de cisaillement	48
III.5.2.3	Module de Young	49
III.5.2.4	Coefficient de poisson	51
III.5.2.5	Fraction d'anisotropie	52
III.6	Conclusion	54
Références bibliographiques citées dans le chapitre III		55
Conclusion générale		56
Liste des figures		
Liste des tableaux		
Résumé		



Introduction générale

Introduction générale

La Physique des Matériaux a joué et continue à jouer un rôle fondamental dans le développement de notre société moderne en permettant l'avènement de nombreuses applications technologiques. L'électronique, le stockage de données, les communications, les capteurs et les transducteurs requièrent l'utilisation de matériaux aux propriétés spécifiques qui, à travers leur comportement particulier, vont pouvoir jouer un rôle actif au sein des dispositifs et y assurer une certaine fonction. L'existence même de nombreux dispositifs ainsi que l'évolution récurrente de leurs performances (rapidité, sensibilité, diminution de taille) reposent souvent de manière cruciale sur la découverte de nouveaux matériaux aux propriétés uniques ou exacerbées [1].

Les composés semiconducteurs sont considérés comme une classe bien définie des matériaux et cela grâce à la richesse de leur propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectrique qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectroniques [2].

Les Propriétés des alliages s'étendent sur un intervalle de valeurs de la composition x allant du premier composé jusqu'au deuxième, permettant ainsi, un choix de roi des paramètres voulus selon l'application donnée [3].

Le travail présenté porte sur l'étude des propriétés électroniques et élastiques ainsi que les paramètres mécaniques reliés des composés semiconducteurs II-VI CdS et CdTe ainsi que leurs alliages ternaires CdS_xTe_{1-x} , 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 [4, 5].

Quoique plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel reste la méthode la plus simple et rapide, ainsi elle donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience, cependant l'approximation du cristal virtuel VCA est connue pour rendre les paramètres du bowing (courbure) du gap fondamental aussi faible que les résultats trouvés expérimentalement [6].

Pour ce faire, nous avons subdivisé ce manuscrit en trois chapitres:

Après une introduction générale, dans le premier chapitre sera présentés les propriétés physiques des semiconducteurs (électroniques, structurales et élastiques et paramètres mécaniques reliés).

Dans le deuxième chapitre nous essayerons de donner des notions sur les alliages semiconducteurs.

Enfin nous présentons au dernier chapitre les résultats obtenus dans cette étude leurs interprétations et leur comparaison aux travaux théoriques et expérimentaux.

Finalement, nous terminerons par une conclusion générale.

Références bibliographiques citées dans l'introduction générale

- [1] P. Arnaud, "chimie physique" édition Dunod, (2001).
- [2] B. Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V. Mémoire de magister. Université de Batna, (2011).
- [3] K. Mohamed Wahiba, Thèse de doctorat Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [4] J. Chelikowsky and M. L Cohen Phys. Rev B14, 552 (1976).
- [5] M. Gell and *al.* Phys. Rev. B35, 1196 (1987).
- [6] K. Kassali, Thèse de magister, Univ. de Sétif ,Algeria (1996), and references cited therein.



Chapitre I

Propriétés physiques des
semiconducteurs

Chapitre I Propriétés physiques des semiconducteurs

I.1 Introduction

Les propriétés des matériaux sont souvent les limites de performances des systèmes conçus. La conscience de ces propriétés s'avère capitale mais il faut nécessairement savoir que ces propriétés macroscopiques sont très liées aux structures élémentaires de ces matériaux, c.à.d. descendre jusqu'à l'échelle atomique. [1]

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.

De plus on constate que la quantité de déformation est proportionnelle aux contraintes appliquées. Au niveau microscopique cela implique que le tenseur des déformations d'un cristal peut être relié aux tenseurs des contraintes par une loi linéaire (loi de Hooke). [2]

Dans ce chapitre, nous donnons les définitions de quelques propriétés physiques électroniques structurales et élastiques : déformation, contrainte et constantes élastiques, loi de Hooke avec les paramètres élastiques (module de compressibilité, module de cisaillement, module d'Young, coefficient de poisson, facteur d'anisotropie).

I.2 Les propriétés électroniques

I.2.1 Bandes d'énergie

Les électrons dans un atome isolé ont des niveaux d'énergie bien définis. Les électrons d'un matériau de réseau cristallin périodique génèrent une interaction entre les niveaux permis. Cette interaction entraîne des états quasi continus très proches appelés bandes d'énergie. Les électrons dans un matériau sont circonscrits dans des bandes d'énergie séparées par des domaines d'énergie ne contenant plus d'orbitale ondulatoire d'électrons appelés bandes interdites ou trous d'énergie. La plus haute bande permise occupée et remplie est la bande de valence, celle la plus basse permise et vide est la bande de conduction [3].

Les semiconducteurs II-VI ont longtemps constitué le prototype de matériaux radiatifs, grâce à leur bande interdite directe qui leur confère une forte efficacité radiative ainsi qu'à leur grande énergie du gap, conduisant à l'émission de photons situés dans le spectre du visible [4].

Les propriétés électroniques des semiconducteurs sont dirigées par celles des électrons qui sont soumis à un potentiel périodique généré par les ions situés aux nœuds du réseau cristallin. Dans un cristal infini les porteurs de charge sont libres de se mouvoir dans les trois directions de l'espace et le vecteur d'onde \vec{k} de l'électron peut prendre toutes les valeurs possibles dans la première zone de Brillouin [5].

I.2.2 Structure de bandes électronique

La structure de bandes d'un semiconducteur permet de déterminer la nature du gap et sa valeur, ainsi que les transitions optiques possibles. On représente le diagramme énergétique en étudiant l'énergie E comme fonction du vecteur d'onde \vec{k} dans une direction cristallographique du réseau réciproque. Ce diagramme définit les extrema des bandes de conduction et de valence et montre les différents points de symétrie de la première zone de Brillouin.

I.2.3 Gap direct – Gap indirect

Pour un cristal semiconducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un

vecteur d'onde \vec{k} . Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} : on dit que le semiconducteur est à gap direct.

Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{k} différentes : on dit que le semiconducteur est à gap indirect; c'est le cas du silicium et du germanium. Cette distinction entre matériaux semiconducteurs à gap direct ou indirect est importante, particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons. La figure (I.1) représente La relation entre la structure cristalline et la structure de bandes des matériaux semiconducteurs.

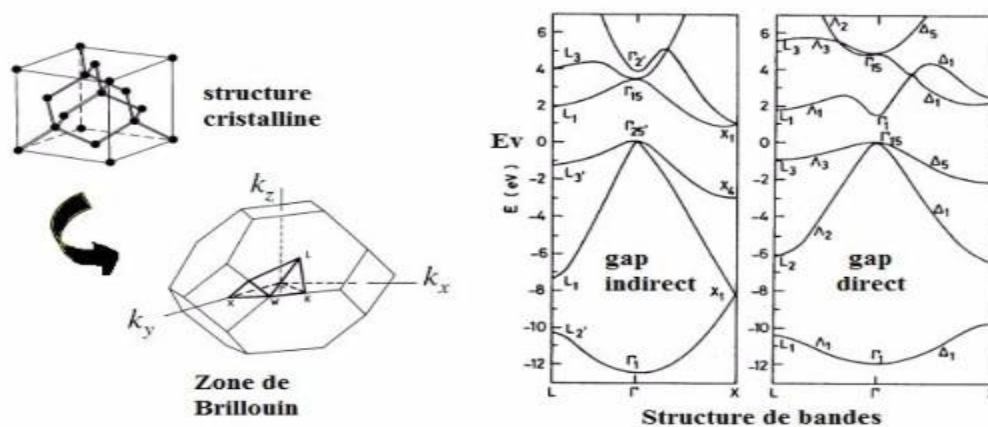


Figure (I.1) : La relation entre la structure cristalline et la structure de bandes des matériaux semiconducteurs.

I.3 Les Propriétés structurales

L'état cristallin se distingue des autres états solides par le fait que, les atomes s'organisent suivant un ordre défini.

Cet état est engendré par la répétition périodique d'atomes ou de groupement d'atomes (de même nature ou de nature différente) appelé motif du cristal ou maille suivant les trois directions de l'espace et qui permet, par translation, de générer la structure cristalline. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes.

L'immense majorité des semiconducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si,Ge) ou optoélectroniques (GaAs, InP), sont basés sur la même

structure cristalline, celle de diamant (Si , Ge) ou la structure Zinc blende (GaAs, InP). Ces deux structures sont présentées sur la figure (I.2) si contre [6] :

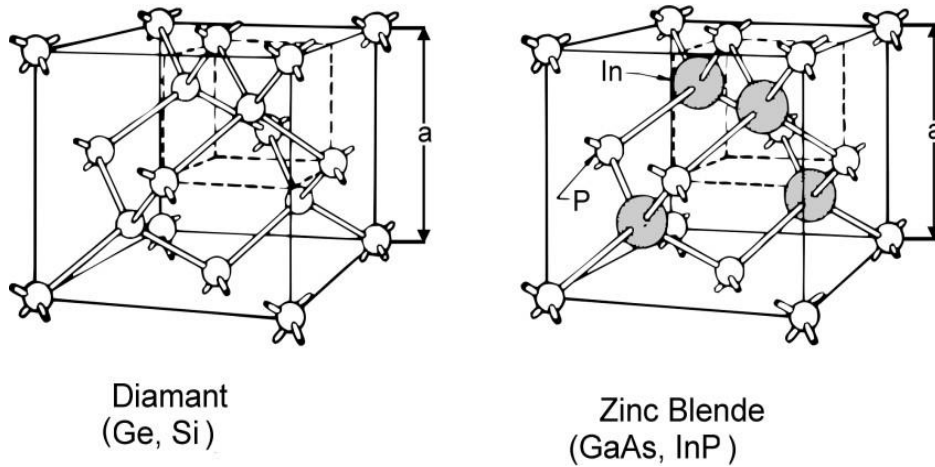


Figure (I.2) : Structure cristalline Diamant et Zinc Blende

I.3.1 La constante de maille

La maille cristalline est définie par trois paramètres a , b , c et par trois angles qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (I.3), suivant les valeurs relatives de six grandeurs on définit les différentes structures cristallines.

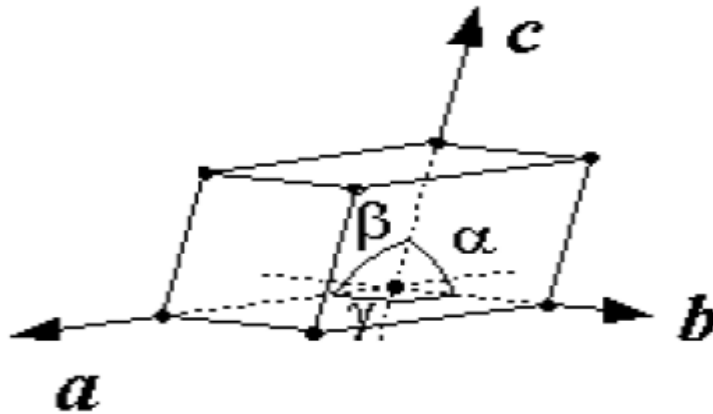


Figure (I.3): Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel

La constant de maille est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives, notée a [7]. Sa détermination est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. La connaissance de cette constante de maille permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique, il peut varier

en fonction de la température et de la pression [8]. Les tableaux suivants présentent la structure cristalline et la constante de maille des matériaux semiconducteurs des groupes II-VI et III-V :

Tableau(I.1) : Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-VI [9].

Matériau	a (Å)	Structure
ZnSe	5,6692	Zb
ZnTe	6,1037	Zb
CdS	4,1367	Zb
CdSe	4,2999	W
CdTe	6,481	Zb
HgS	5,852	Zb
HgSe	6,084	Zb

Tableau(I.2) : Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs III-V [9].

Matériau	a(Å)	Structure
GaP	5,4508	Zb
GaN	3,1896	Zb
GaAs	5,65330	Zb
InN	3,548	W
InP	5,8690	Zb
InSb	6,47937	Zb
InAs	6,0583	Zb

I.4 Les propriétés élastiques

Les propriétés élastiques des solides traduisent leurs réactions à l'intervention de certains facteurs extérieurs. Dans le cas le plus simple de tels facteurs sont les actions mécaniques : compression, traction, flexion, choc, torsion .Outres les interventions mécaniques, elles peuvent être thermiques, magnétiques, etc. Ces propriétés sont

déterminées, en premier lieu, par les forces de liaisons qui interviennent entre les atomes ou les molécules constitutives d'un solide.

I.4.1 Les tenseurs des contraintes

La notion de contrainte résulte de la réflexion des forces intérieures qui naissent dans un objet lorsqu'on le déforme. Une contrainte est une force divisée par une surface, est donc homogène à une pression et exprimée en pascal. Le tenseur des contraintes noté σ , est une matrice 3×3 symétrique [10].

Les neuf composantes σ_{ij} du tenseur de contrainte σ sont représentées sur la figure I.4.

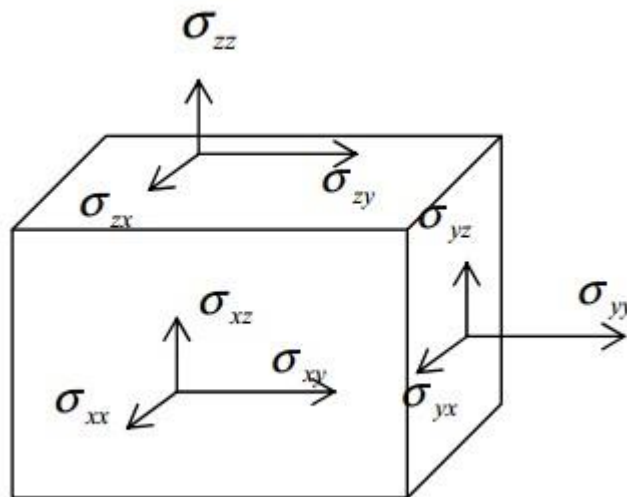


Figure (I.4) : Composantes normales et tangentielles d'un tenseur de contraintes.

Dans cette notation, le premier indice (i) indique la direction de la force et le deuxième indice (j) indique la normale au plan sur lequel s'applique la force.

Les composantes σ_{ii} sont appelés contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement aux différentes faces du cube (figure I.4). Les éléments σ_{ij} avec $i \neq j$ sont les contraintes tangentielles puisque elles agissent sur les plans des surfaces. Les composantes de la contrainte ont la dimension d'une force par unité de surface ou d'une énergie par unité de volume.

Le tenseur des contraintes est symétrique et il s'écrit:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{I.1})$$

I.4.2 Les tenseurs de déformation

Sous l'action de forces appliquées, les corps solides se déforment [11]. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position de repos de l'objet dans laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet.

Pour représenter les déformations que subit un matériau sous l'action d'une contrainte supposons que trois vecteurs orthogonaux \vec{x} , \vec{y} , \vec{z} de longueur unité soient liés au solide non déformés. Une petite déformation uniforme du solide fait changer l'orientation et la longueur des axes (figure I.5). Les nouveaux axes peuvent être exprimés en fonctions des anciens :

$$\vec{x}' = (1 + \varepsilon_{xx}) \vec{x} + \varepsilon_{xy} \vec{y} + \varepsilon_{xz} \vec{z} \quad (\text{I.2})$$

$$\vec{y}' = \varepsilon_{yx} \vec{x} + (1 + \varepsilon_{yy}) \vec{y} + \varepsilon_{yz} \vec{z} \quad (\text{I.3})$$

$$\vec{z}' = \varepsilon_{zx} \vec{x} + \varepsilon_{zy} \vec{y} + (1 + \varepsilon_{zz}) \vec{z} \quad (\text{I.4})$$

Les $\varepsilon_{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta \rightarrow x, y, z$ définissent la déformation.

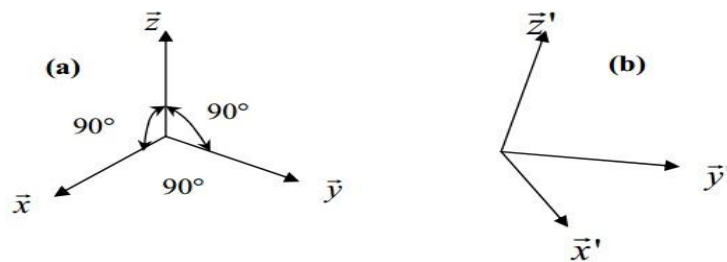


Figure (I.5): Positions des axes de coordonnées : (a) état initial, (b) état déformé

Si la déformation est uniforme [11], le point initialement en $\vec{r} = x\vec{x} + y\vec{y} + z\vec{z}$ occupera la position $\vec{r}' = x\vec{x}' + y\vec{y}' + z\vec{z}'$

Le déplacement \vec{R} de la déformation est défini par :

$$\vec{R} = \vec{r}' - \vec{r} = x (\vec{x}' - \vec{x}) + y (\vec{y}' - \vec{y}) + z (\vec{z}' - \vec{z}) \quad (\text{I.5})$$

Soit, d'après (I.2), (I.3) et (I.4) :

$$\begin{aligned} \vec{R} = & (x\varepsilon_{xx} + y\varepsilon_{yx} + z\varepsilon_{zx}) \vec{x} + (x\varepsilon_{xy} + y\varepsilon_{yy} + z\varepsilon_{zy}) \vec{y} + \\ & (x\varepsilon_{xz} + y\varepsilon_{yz} + z\varepsilon_{zz}) \vec{z} \end{aligned} \quad (\text{I.6})$$

Sous une forme plus générale :

$$\vec{R} = u(r) \vec{x} + v(r) \vec{y} + w(r) \vec{z} \quad (\text{I.7})$$

A partir des équations (I.6) et (I.7), un développement de \vec{R} en série de Taylor donnera alors [11] :

$$x\varepsilon_{xx} \approx x \frac{\delta u}{\delta x} \quad (\text{I.8-a})$$

$$y\varepsilon_{yx} \approx x \frac{\delta u}{\delta y} \dots \text{etc.} \quad (\text{I.8-b})$$

On définit la déformation ε de la manière suivante [12]:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{I.9})$$

Avec ($x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$) et ($u_1 = u$, $u_2 = v$, $u_3 = w$)

$$\text{Donc : } \varepsilon_{xx} = \frac{\delta u}{\delta x} ; \varepsilon_{yy} = \frac{\delta v}{\delta y} ; \varepsilon_{zz} = \frac{\delta w}{\delta z} \quad (\text{I.10})$$

$$\varepsilon_{yx} = \varepsilon_{xy}$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \text{ et } \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \quad (\text{I.11})$$

Le tenseur des déformations, est un tenseur symétrique d'ordre 2 servant à décrire l'état de déformation local résultant de contraintes. Les composantes sont notées ε_{ij} , avec :

- Les termes diagonaux ε_{ii} sont les allongements relatifs dans la direction i (selon l'axe x_i).
- Les autres termes ε_{ij} ($i \neq j$) sont les demi-variations de l'angle droit (en supposant un petit volume de matière cubique avant déformation).

Donc le tenseur de déformation s'écrit comme suit :

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{I.12})$$

Après la description des déformations, nous verrons ensuite comment relier le tenseur des contraintes au tenseur de déformation par la loi de comportement.

I.4.3 Les Constantes élastiques

L'application d'une contrainte σ sur un matériau anisotrope induit une déformation ε proportionnelle à cette contrainte dans les limites d'élasticité. La méthode de Nilson et Martin [13] montre que les composantes σ_{ij} du tenseur contrainte sont des fonctions linéaires des composantes du tenseur déformation ε_{kl} . La constante de proportionnalité définit le tenseur constantes élastiques C_{ijkl} . La symétrie du tenseur contrainte et celle de la déformation permettent d'écrire la loi de Hooke comme suit [14, 15]:

$$\sigma_{ij} = \sum_{ijkl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{I.13})$$

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{I.14})$$

$$[\varepsilon_{kl}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{I.15})$$

$$(C_{ijkl}) = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{I.16})$$

Dans les matériaux à symétrie cubique, on distingue deux constantes élastiques de rigidité C_{11} et C_{12} et une constante de cisaillement C_{44} donnée par:

$$C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (\text{I.17})$$

Ces constantes élastiques sont exprimées en fonction des coefficients de Lamé λ et $C_{11} = \lambda + 2\mu$, $C_{12} = \lambda$ et $C_{44} = \mu$ (I.18)

- Calcul de C_{11} et C_{12}

On utilise dans le calcul des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} la méthode développée par Nielsen et Martin [13]. Les déformations ε_1 et ε_2 qui en résultent de l'application d'une contrainte σ_1 le long de la direction [100] donne

$$C_{11} = \frac{\sigma_1}{\varepsilon_1} \quad (\text{I.19})$$

et

$$C_{12} = \frac{\sigma_1}{\varepsilon_2} \quad (\text{I.20})$$

- Calcul de C_{44}

L'application d'une contrainte σ le long de la direction [111] induit des déformations $\varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6$ dans une structure zinc blende. La constante élastique qui en résulte de cette déformation est:

$$C_{44} = \frac{\sigma}{\varepsilon_4} \quad (\text{I.21})$$

I.5 Les paramètres mécaniques

I.5.1 Le module d'Young

Le module de Young (Y_0) ou module d'élasticité longitudinale ou encore module de traction, est la constante qui relie la contrainte de traction ou de compression (σ) et la Déformation (ε) pour un matériau élastique isotrope. Ce paramètre s'exprime en fonction des coefficients de Lamé λ et μ et des constantes élastiques par [16]:

$$Y_0 = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{(\lambda + \mu)} = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (\text{I.22})$$

I.5.2 Coefficient de Poisson

Le coefficient de Poisson σ_0 caractérise la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué [17].

$$\sigma_0 = \frac{(l_0 - l)/l_0}{(L_0 - L)/L_0} = - \frac{\Delta l/l_0}{\Delta L/L_0} \quad (\text{I.23})$$

La variation relative du volume $\frac{\Delta V}{V}$ due aux petites déformations est donnée par:

$$\frac{\Delta V}{V_0} = (1 - 2\sigma_0) \frac{\Delta L}{L_0} \quad (\text{I.24})$$

Le coefficient de Poisson s'exprime en fonction des coefficients de Lamé λ , μ et les constantes élastiques par :

$$\sigma_0 = - \frac{\Delta l/l_0}{\Delta L/L_0} = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} = \frac{c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})} \quad (\text{I.25})$$

La figure (I.6) représente Le schéma qui montre la contraction du matériau perpendiculairement à l'effort est illustré

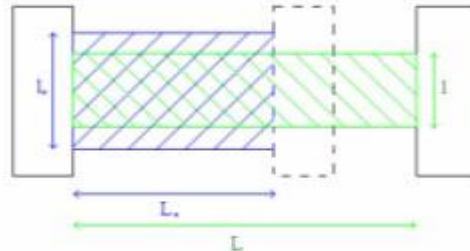


Figure (I.6) : Illustration de la contraction d'un matériau.

I.5.3 Modules de compression et de compressibilité

Le module de compression d'un matériau est défini comme étant la variation relative de son volume V par unité de la pression hydrostatique appliquée P [18]:

$$K = - \frac{1}{V} \frac{dV}{dP} \quad (\text{I.26})$$

L'obtention de la compressibilité K d'un matériau anisotrope nécessite la connaissance du changement de volume par unité de volume [19]:

$$\varepsilon_{ii} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = - \frac{3}{c_{11} + 2c_{12}} P = - \frac{3(1 - 2\sigma_0)}{Y_0} P \quad (\text{I.27})$$

$$K = \frac{3}{c_{11} + 2c_{12}} = \frac{3(1 - 2\sigma_0)}{Y_0} \quad (\text{I.28})$$

Le module de compressibilité s'exprime en fonction des constantes élastiques et en fonction du module d'Young et du coefficient de Poisson par:

$$B_S = 1/K = \frac{1}{3}(c_{11} + 2c_{12}) = \frac{Y_0}{3(1-2\sigma_0)} \quad (\text{I.29})$$

I.5.4 Module de cisaillement

Le module de cisaillement ou de rigidité C' est le rapport entre la contrainte de cisaillement appliquée et l'angle de déformation résultant. Le module de cisaillement, aussi appelé module de glissement, module de Coulomb ou second coefficient de Lamé, est une grandeur propre à chaque matériau et intervient dans la caractérisation des déformations causées par les efforts de cisaillement. On l'exprime en fonction des constantes élastiques et en fonction du module de Young et du coefficient de Poisson par l'expression [17]:

$$C' = \frac{\sigma}{\theta} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2} = \frac{Y_0}{2(1+\sigma_0)} \quad (\text{I.30})$$

La figure (I.7) représente le schéma d'une déformation par effet de cisaillement.



Figure (I.7) : Un essai de cisaillement.

I.5.5 Facteur d'anisotropie

L'anisotropie est la propriété d'une grandeur physique de dépendre de la direction, et représente le rapport entre la constante élastique et le module de cisaillement. On l'exprime en fonction des constantes élastiques par la relation [19]:

$$A = 2C_{44} / (C_{11} - C_{12}) \quad (\text{I.31})$$

Pour un matériau isotrope, $A = 1$, alors que toute valeur différente de l'unité indique une anisotropie et l'écart traduit le degré d'anisotropie.

I.6 Les applications des matériaux semiconducteurs II-VI

Jusqu'à présent, les applications des matériaux semiconducteurs II-VI se focalisent principalement sur les détecteurs des radiations dans la région proche infrarouge, ce qui est particulièrement intéressant, puisque la grande partie des émissions de radiation thermiques est dans cette région pour un large intervalle de température. Un semiconducteur de cette classe de matériaux, est le CdS, qui possède de bonnes propriétés photoélectriques.

Les matériaux II-VI luminescent tous dans le visible (à l'exception des semimétaux HgSe et HgTe et ce, à cause de l'atome lourd de mercure ($Z = 80$) : du rouge avec le CdTe à l'infrarouge grâce à l'incorporation de mercure (en se servant du fait que le CdTe et le HgTe aient quasiment le même paramètre de maille, respectivement de $6,480 \text{ \AA}$ et de $6,460 \text{ \AA}$).

C'est en particulier dans l'infrarouge que les tellures ont trouvé leurs principales applications (militaires). Quant au visible, les récentes diodes électroluminescentes LED vertes à base de ZnTe [20, 21] et les diodes lasers jaune-vertes à base de ZnSe [22] conquièrent un marché encore vierge puisqu'au contraire du rouge et du bleu il n'existe pas encore de diodes lasers commercialisées dans la gamme des $550 \sim 590 \text{ nm}$.

Les semiconducteurs II-VI sont aussi des matériaux très prometteurs pour la fabrication des cellules solaires tels que le CdS et le CdTe, à cause de la bonne adaptation de la bande interdite qui se situe au milieu du spectre solaire. Des efficacités de conversion de l'ordre de 20.4% - 21% en laboratoire [23, 24] sont régulièrement atteintes avec les cellules CdS-CdTe, qui concurrencent les autres matériaux prometteurs comme CuInGaSe₂ (20.5%) ou le silicium amorphe (13.4%). Une couche mince de CdTe avec une épaisseur d'environ de $2 \mu\text{m}$ absorbera presque 100% du rayonnement solaire incident [25].

I.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons regroupé quelques propriétés physiques des semiconducteurs. électroniques, structurales et élastiques : déformation, contrainte et constantes élastiques, loi de Hooke avec les paramètres élastiques (module de compressibilité, module de cisaillement, module d'Young, coefficient de poisson et facteur d'anisotropie).

Références bibliographiques citées dans le chapitre I:

- [1] Francis Lévy, " physique et technologie des semiconducteurs ", édition première, 1995, lausanne.
- [2] H. Rachida, Magister, Université Ferhat Abbas de Setif (2011).
- [3] S. Bouras, Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas de Setif (2015).
- [4] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [5] M. Labidi, Thèse de Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011).
- [6] Q. Tridoan, thèse de doctorat, Université de Reims, Champagne-Ardenne, (2011).
- [7] bechiri. abderrachid. Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V, thèse doctorat. Université mentouri. Umc (Algerie).(2006).
- [8] Bahi Wafa. Les semi-conducteurs binaires utilisés dans la composante optoélectronique.
- [9] S. Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur », Wiley, Chichester, (2009).
- [10] R. E. Newnham, Properties of Materials, Anisotropy, Symmetry, Structure, (Oxford University Press, 2005).
- [11] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th edition (John Wiley & Sons, New York, 2005).
- [12] V. Trinite, Thèse de Doctorat en physique, Ecole Polytechnique, France (2006).
- [13] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Phylos. Soc. 24, (1928) 89.
- [14] Nederveen, C.J. et van der Wal, C.W., A torsion pendulum for the determination of shear modulus and damping around 1 Hz, Rheol. Acta, 6 (4), p. 316 (1967).
- [15] Read, B.E. et Dean, G.D., The determination of dynamic properties of polymers and composites, 207 p., Adam Hilger, Bristol, (1978).
- [16] Read, B.E. et Dean, G.D., The determination of dynamic properties of polymers and composites, 207 p., Adam Hilger, Bristol, (1978).
- [17] Nederveen, C.J. et van der Wal, C.W., A torsion pendulum for the determination of shear modulus and damping around 1 Hz, Rheol. Acta, 6 (4), p. 316 (1967).
- [18] P. Germain, Mécanique des milieux continus, Cours à l'usage de la licence, (1962), Masson et Cie.

- [19] S. C. Stiros, P. A. Pirazzoli, J. Laborel, F. Laborel-Deguen, The 1953 earthquake in Cephalonia (western Hellenic Arc): coastal uplift and halotectonic faulting, *Geophysical Journal International*, Volume 117, Issue 3, (1994) 834–849.
- [20] Rolf Enderlein, NommJ. M. Horing, "Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices", World Scientific Publishing (1997) ISBN 981-02-2387-0.
- [21] J.H. Chang, J.S. Song, K. Godo, M.Y. Shen, T. Goto, T. Yao, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001) 566-568.
- [22] M. Klude, G. Alexe, C. Kruse, T. Passow, H. Heinke, D. Hommel, *Phys. Stat. Sol. (b)* 229 (2002) 935-942.
- [23] C. Walkons, B. Guralnick, B. M. Candless and R. Birkmire, *IEEE*, 1567 (2014).
- [24] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta and E. D. Dunlop, *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 23, 1 (2015).
- [25] C. S. Ferekides, U. Balasubramanian, R. Mamazza, V. Viswanathan, H. Zhao, D. L. Morel, *Solar Energy* 77, 823 (2004).



Chapitre II

Les alliages semiconducteurs

Chapitre II Les alliages semiconducteurs

II.1 Introduction

Les matériaux sont présentés dans de multiples domaines et prennent une place plus importante dans le système que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour.

Trois types de matériaux que nous pouvons envisager : les isolants, les conducteurs et les semiconducteurs, ces derniers sont intermédiaires entre les métaux et les isolants : à $T = 0$ un semiconducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente, la résistivité des semiconducteurs varie entre $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ et $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$, alors que celle des métaux est de l'ordre de $10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$ et celle des isolants peut atteindre $10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$ [1]. Une structure de bandes comparative des trois types de matériaux métal, semiconducteur et isolant est représentée sur la figure (II.1).

Dans ce chapitre nous allons donner une définition de semiconducteur et les composés semiconducteurs, ainsi que les alliages semiconducteurs et nous terminerons par une conclusion.

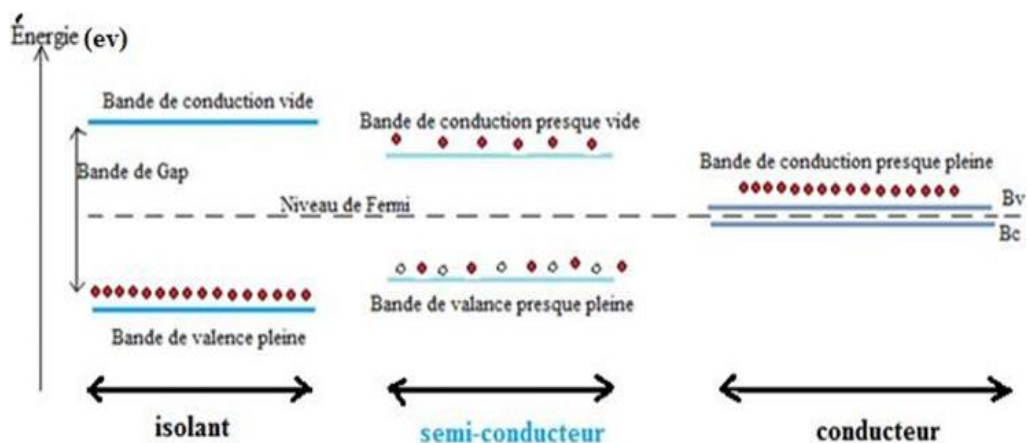


Figure (II.1): Structure de Bandes d'énergie pour les isolants, les semiconducteurs et les conducteurs.

II.2 Définition d'un semiconducteur

Un semiconducteur 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]

Tableau (II.1) : Les groupes des semiconducteurs

III-V				
Groupe II	Groupe III	Groupe IV	Groupe V	Groupe VI
	B	C	N	O
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te
Hg	Ti	II-VI		

II.3 Les différents types des semiconducteurs

II.3.1 Semiconducteur intrinsèque

Pour les semiconducteurs, la définition se complique un peu. A l'état fondamental, c'est-à-dire au zéro absolu (0°K), les semiconducteurs sont des isolants : La dernière bande remplie et présence d'une bande interdite. Mais celle-ci est très petite comparée à celle des isolants, elle est de l'ordre de quelques milli-eV (à plusieurs centaines de μeV). Donc en chauffant le matériau (à température ambiante par exemple), des électrons vont naturellement acquérir de l'énergie, et passer dans la bande de conduction : le matériau va se mettre à conduire le courant.

II.3.1.1 Semiconducteur intrinsèque a Gap direct

Schématiquement, l'absorption (ou l'émission) d'un photon entraîne des montées (ou respectivement, des descentes) en énergie verticales des électrons. Or, un gap direct signifie que le minimum de la bande de conduction est situé juste au-dessus du maximum de la bande de valence, après l'absorption (ou émission) de photon, l'électron arrive donc directement dans sa position d'énergie la plus favorable, il n'a aucune relaxation à effectuer. Ceci assure d'excellentes propriétés optiques, et l'on peut se servir de tels matériaux comme détecteurs de lumière, ou bien comme émetteurs de lumière (diodes électroluminescentes, lasers...).

Ci-dessous, la structure de bandes d'un semiconducteur à gap direct, le Germanium (Ge). Avec son gap de 0,744 eV (valeurs expérimentales, voir Ref . [3], il s'agit d'un semiconducteur intrinsèque : son gap est suffisamment faible pour qu'à température ambiante, des électrons soient dans la bande de conduction. Ses propriétés semiconductrices sont dues à sa structure intrinsèque. De plus on voit bien qu'il s'agit d'un semiconducteur à gap direct : le minimum de la bande de conduction est situé juste au-dessus du maximum de la bande de valence.

Ainsi, si un électron de la bande de valence capte un photon d'énergie supérieure à l'énergie de gap ($E(\text{photon}) > 0,744 \text{ eV}$) alors il peut passer dans la bande de conduction et conduire le courant.

La figure (II.2) représente A gauche :La structure de bandes électronique du germanium Ge. A droite : transition électronique possible autour d'un gap direct.

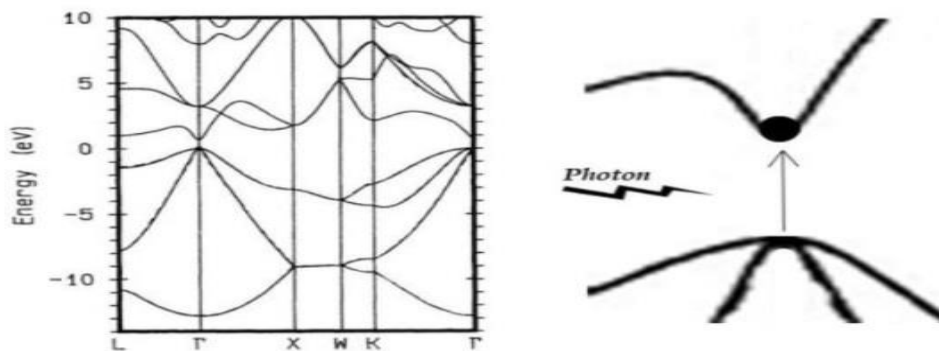


Figure (II.2): A gauche : Structure de bandes électronique du germanium Ge. A droite : transition électronique possible autour d'un gap direct.

II.3.1.2 Semiconducteur intrinsèque à gap indirect:

Un gap indirect entraîne des phénomènes complexes : en cas d'absorption d'un photon, l'électron va d'abord monter verticalement dans la bande de conduction, puis descendre en énergie en émettant des phonons [4] qui vont chauffer le matériau. Les semi-conducteurs à gap indirect ne peuvent donc pas interagir avec la lumière sans chauffer, ce qui va fortement perturber les propriétés électroniques et entraîner des interactions électron/phonon, ils font donc de très mauvais émetteurs de lumière, et sont plus utilisés pour leurs propriétés conductrices à haute température.

Le mieux connu des semiconducteurs à gap indirect est aussi le plus utilisé dans l'industrie est le silicium. Avec un gap indirect de 1,17 eV (résultats expérimentaux, voir Réf. [3]), le silicium fait un très mauvais photorécepteur. Sur la figure (II.3) ci-dessous, nous avons représenté la structure de bandes du silicium, ainsi que le schéma des transitions inter bandes possibles autour d'un gap indirect..

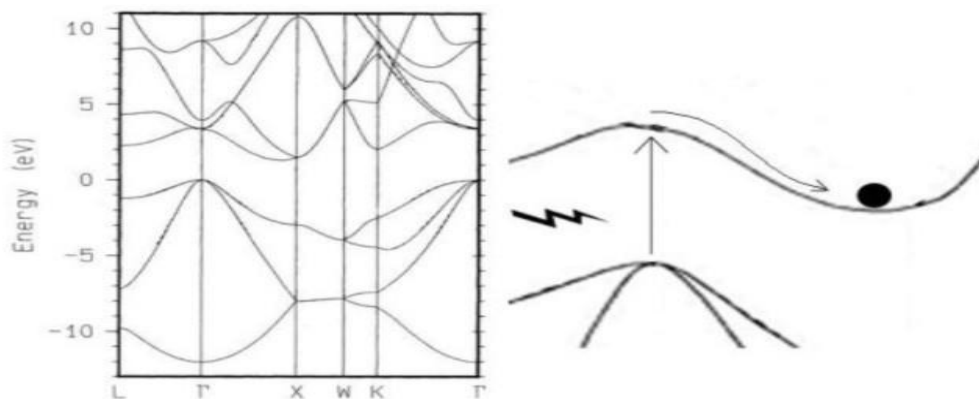
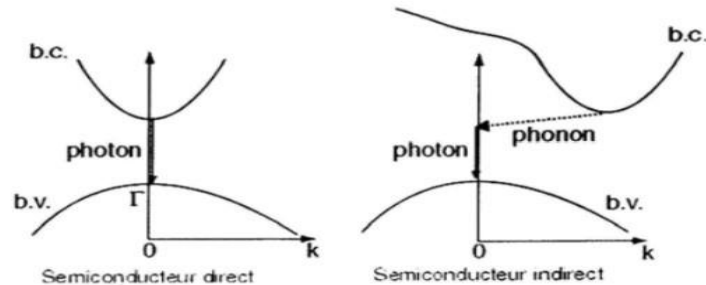


Figure (II.3): A gauche : Structure de bandes électronique du silicium (Si). A droite : transition électronique suivie d'une relaxation par émission de phonon .

La figure (II.4) représente la structure de bande schématique d'un semiconducteur direct et indirect .



Figure(II.4) : Structure de bande schématique d'un semiconducteur direct et indirect .

II.3.2 Semiconducteur extrinsèque

Un semi-conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semiconducteur intrinsèque (un atome pour 15atomes de l'élément semiconducteur). Selon la nature des impuretés il existe deux types des semiconducteurs : type n et type p.

II.3.2.1 Semiconducteur extrinsèque de type N :

Considérons par exemple les semiconducteurs 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 à un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semiconducteur est dit de type n [5].

La figure (II.5) représente le silicium dopé au phosphore (a) à $T = 0 \text{ }^\circ\text{K}$ et, (b) à $T \neq 0 \text{ }^\circ\text{K}$.

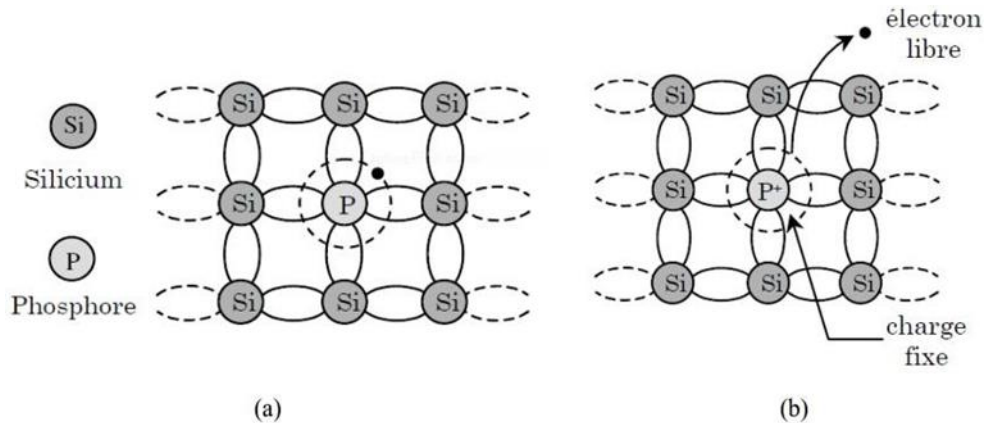


Figure (II.5): Silicium dopé au phosphore (a) à $T = 0 \text{ }^\circ\text{K}$ et, (b) à $T \neq 0 \text{ }^\circ\text{K}$.

II.3.2.2 Semiconducteur extrinsèque de type p

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

La figure (II.6) représente le silicium dopé au Bore (a) à $T = 0 \text{ K}$ et, à (b) $T \neq 0 \text{ K}$.

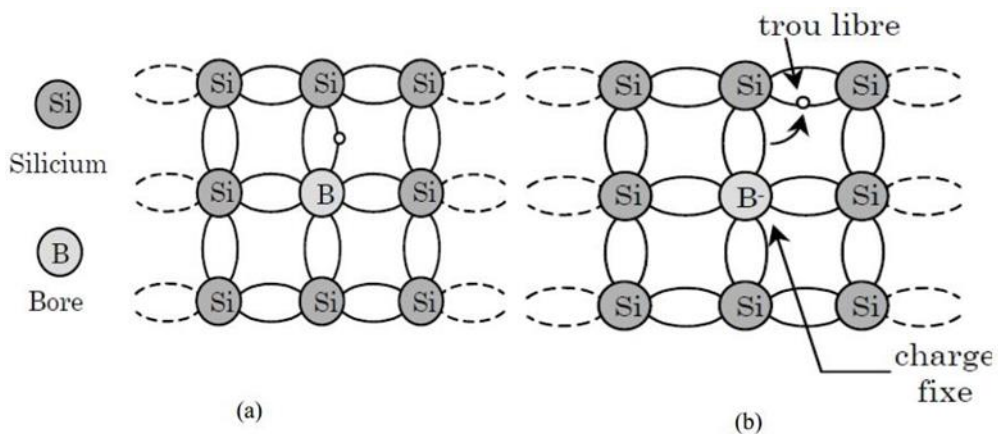


Figure (II.6) : Silicium dopé au Bore (a) à $T = 0 \text{ K}$ et, à (b) $T \neq 0 \text{ K}$.

II.4 Les composés semiconducteurs

Les composés semiconducteurs sont des matériaux très importants pour leurs propriétés électroniques (mobilité des charges) et optoélectroniques (gap direct). Pour faire varier ces propriétés, il faut jouer sur la structure électronique et convenir à la largeur de la bande interdite. Ceci est réalisé à l'aide d'alliages. Les domaines étendus de la composition chimique variable sont des atouts pour la réalisation de dispositifs adaptés aux exigences.

La liste complète des semiconducteurs II-V et II-VI peut être obtenue à partir de l'extrait du tableau de Mendeleïev suivant :

Tableau(II.2) : Semiconducteurs du type III-V et II-VI et ceux du groupe IV.

II	III	IV	V	VI
Zn	Al	Si	P	S
Cd	Ga	Ge	As	Se
	In	α -Sn	Sb	Te

Semiconducteurs
élémentaires groupe IV.

Chaque III avec chaque V.

Semiconducteurs III-V

Chaque II avec chaque VI : Semiconducteur II-VI

II.5 Les alliages semiconducteurs

- Définition des alliages

Le terme alliage désigne un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux, ce terme était réservé durant une bonne période aux métaux, cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux. Le développement rapide des techniques de la croissance cristalline a permis la réalisation de plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires. Un alliage est un matériau qui offre la possibilité de moduler l'amplitude du gap et d'autres paramètres physiques afin de mieux optimiser et étendre

le domaine d'application, notamment en micro- électronique et optoélectronique. En effet, le progrès fait par les chimistes, les physiciens et technologues à contribuer efficacement à l'étude et l'élaboration de nouveaux matériaux parmi eux les alliages semiconducteurs [6]. Le tableau II-3 nous donne un aperçu sur l'ensemble des composés et alliages semiconducteurs.

Tableau (II.3): La liste de certains semiconducteurs.

Colonne	Semiconducteur
IV	Ge, Si
III-V	binaire GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb
	ternaire $Al_xGa_{1-x}As, GaAs_yP_{1-y}$
	quaternaire $Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$
II-VI	binaire CdS, HgTe, CdTe, ZnSe, ZnS,
	ternaire $Cd_xHg_{1-x}Te$
III-V / II-VI	quasi $(GaP)_{1-x}(ZnSe)_x$
III-V / III-V	binaires $(GaAs)_{1-x}(InAs)_x$

- Classification des alliages semiconducteurs

Les alliages semiconducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant les nombres de constituants [7] :

- Alliages binaires de la forme $A^N B^{8-N}$:

AgCl, CuBr, KBr, LiF,...

$A^{II} B^{VI}$: CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnO, ZnSe, HgTe, HgSe,...

$A^{III} B^V$: Les antimoniures, les arséniures, les phosphures, et les nitrures des éléments : Aluminium, Gallium, Indium et Bore (GaAs, InSb, BInP,.....).

$A^{IV} B^{IV}$: SiC, SiGe,...

- Alliage binaire de la forme $A_N B_{10-N}$:

$A^{IV} B^{VI}$: PbS, PbSe, PbTe, ...

- Alliage binaire de la forme $A_N B_{7-N}$:

$A^I B^{VI}$: CuS, CuO, Cu₂O, ...

Lorsque les éléments binaires $A_N B_{8-N}$ et $A_N C_{8-N}$ sont associés, l'alliage formé peut être soit :

- Alliage ternaire anionique : $A^N B_x^{8-N} C_{x-1}^{8-N}$

- Alliage ternaire cationique : $A_x^N B_{1-x}^N C^{8-N}$

Ces alliages sont caractérisés par la présence du coefficient stœchiométrique

II.5.1 Les alliages semiconducteurs binaires

Ils sont de la forme $A^N B^{8-N}$

II.5.2 Les alliages semiconducteurs Ternaires

Les alliages semiconducteurs ternaires II-VI de la forme $AB_x C_{1-x}$ sont composés de molécules AB avec une fraction molaire (x) et des molécules AC avec une fraction (1-x) [8]. En raison de la variation de la largeur de bande, ces matériaux sont utilisés dans de nombreuses applications optoélectroniques [9].

II.5.2.1 Constante du réseau de l'alliage ternaire

La constante du réseau ou paramètre de maille est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires (AB et AC) formant l'alliage.

a_{AB} , a_{AC} sont les constantes du réseau des composés binaires AC et BC respectivement, la constante du réseau de l'alliage est donnée par :

$$a_{AB_x C_{1-x}}(x) = \overline{a(x)} = x a_{AB} + (1-x) a_{AC} \quad (\text{II.1})$$

a_{AB} est paramètre du réseau du composé AB

a_{AC} est paramètre du réseau du composé AC

x est la concentration molaire.

La Figure(II.7) [12] présente les différents paramètres du réseau en fonction de la bande interdite et la longueur d'onde pour quelques composés binaires.

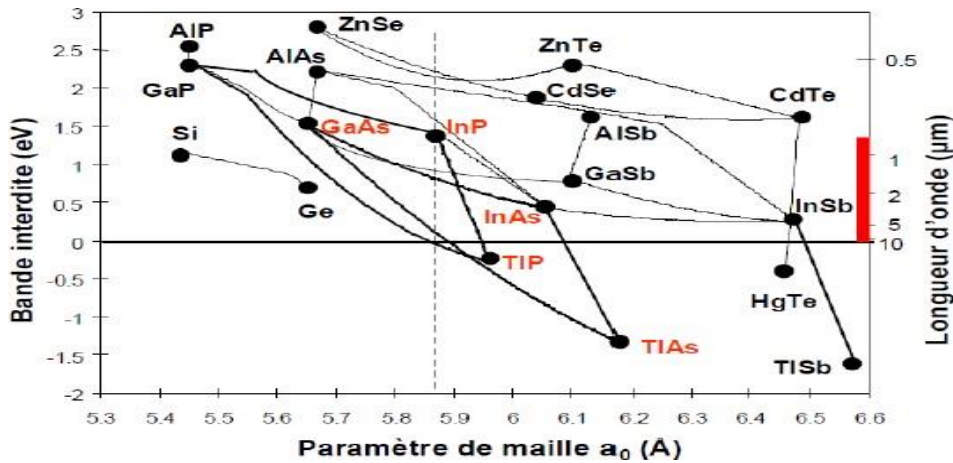


Figure (II .7) : Paramètre de réseau de quelques composés binaires.

II.5.2.2 Gaps d'énergie de l'alliage ternaire

Il existe une grande quantité de données expérimentales sur la structure de bandes des alliages semiconducteurs, mais pratiquement il n'y a que deux approches théoriques expliquant ces données.

Le modèle diélectrique a été utilisé par Van- Vechten et Bergstresser (1970) [11] pour prédire la dépendance de la bande interdite dans les alliages, tandis que Jones et Lettington (1969) [12], et Richardson (1971,1972) [13-14] ont développé un modèle de calcul des structures de bandes pour les alliages en utilisant la méthode du pseudo potentiel.

Un grand intérêt a été accordé aux énergies de la bande interdite des alliages, et très spécialement au gap direct $E_{\Gamma-\Gamma}(E_0)$ ceci, est en raison de l'utilisation de ces alliages dans les dispositifs optoélectroniques. La transition $E_{\Gamma-\Gamma}(E_0)$, a lieu au centre de la zone de Brillouin.

Contrairement à la tendance de la constante du réseau $a(x)$ qui est une moyenne pondérée, on a constaté que les gaps d'énergies deviennent considérablement de la moyenne des gaps d'énergies de ces constituants.

$$E_{AB_xC_{1-x}}(x) = x E_{AB} + (1 - x) E_{AC} \tag{II.2}$$

En effet, plusieurs mesures expérimentales de l'énergie $E_g(x)$ peuvent être interpolées sous la forme quadratique suivante:

$$E_{AB_x C_{1-x}}(x) = x E_{AB} + (1-x)E_{AC} + c x (1-x) \quad (\text{II.3})$$

Avec :

E_{AB} est le gap énergétique du composé AB

E_{AC} est le gap énergétique du composé AC

C est appelé « paramètre de courbure » ou « Bowing » prouvé expérimentalement. Ce paramètre est une contribution du désordre du réseau généré dans l'alliage ternaire par suite de la distribution des atomes des composés AB et AC dans les sites des deux sous réseaux [15].

II.5.3 Les alliages semiconducteurs Quaternaires

Il existe également un autre type d'alliages semiconducteurs : il s'agit des matériaux "quaternaires". Ce type d'alliages semiconducteurs fait intervenir quatre composés binaires et il est caractérisé par la présence de deux coefficients stœchiométriques x et y .

Un intérêt particulier a été porté récemment aux alliages quaternaires principalement et cela est dû à l'avantage qu'ils offrent, car ses derniers permettent de concevoir des dispositifs avec les propriétés physiques souhaitées.

Ces alliages peuvent être divisés en deux classes [16,17]:

- Les solutions quadratiques : ces alliages ont la forme $A_{1-x}^N B_x^N C_y^{8-N} D_{1-y}^{8-N}$ -Les solutions triangulaires : dans cette classe, deux cas se présentent, les solutions purement anioniques $A^N B_x^{8-N} C_y^{8-N} D_{1-x-y}^{8-N}$ et les solutions purement cationiques $A_x^N B_y^N C_{1-x-y}^{8-N} D^{8-N}$.

La propriété physique $F(x, y)$ de ce type d'alliage est calculée par une interpolation linéaire des paramètres de ses composés binaires :

$$F_{ABCD}(x, y) = xy F_{AC} + (1-x)y F_{BC} + x(1-y)F_{AD} + (1-x)(1-y)F_{BD} \quad (\text{II.4})$$

Cet alliage quaternaire peut être aussi formé d'alliages ternaires et si les valeurs des ternaires sont disponibles, la propriété $F(x, y)$ aura cette expression :

$$F_{alliage}(x, y) = \frac{x(1-x)[(1-y)F_{ABD} + yF_{ABC}] + y(1-y)[xF_{ACD} + (1-x)F_{BCD}]}{x(1-x) + y(1-y)} \quad (\text{II.5})$$

Pour un système quaternaire, la constante du réseau est donnée par la loi de Vegard [14].

$$a_{alliage} = xy a_{AC} + (1-x)y a_{BC} + x(1-y)a_{AD} + (1-x)(1-y)a_{BD} \quad (\text{II.6})$$

a_{AC}, a_{BC}, a_{AD} et a_{BD} sont les constantes des réseaux des composés binaires formant l'alliage quaternaire.

Comme les alliages ternaires, le gap d'énergie de l'alliage quaternaire peut être aussi estimé comme étant la moyenne des gaps d'énergie de ses binaires [14, 18, 19].

Toutefois, Akio Sasaki [20] et ses collaborateurs ont proposé une interpolation pour le calcul de ce gap, en se basant sur la formule proposée par Thomson et Woolley appliquée aux ternaires [21] :

$$E_{alliage}(x, y) = E_{ABC} y + (1-y)E_{ABD} - \frac{\alpha_{ABCD}}{\sqrt{\frac{(E_{ABD} + E_{ABC})}{2}}} y(1-y) \quad (\text{II.7})$$

$$E_{ABC} = x E_{AC} + (1-x)E_{BC} - \frac{\alpha_{ABC}}{\sqrt{\frac{(E_{AC} + E_{BC})}{2}}} x(1-x) \quad (\text{II.8})$$

$$E_{ABD} = x E_{AD} + (1-x)E_{BD} - \frac{\alpha_{ABD}}{\sqrt{\frac{(E_{AD} + E_{BD})}{2}}} x(1-x) \quad (\text{II.9})$$

$$\alpha_{ABCD} = x\alpha_{ACD} + (1-x)\alpha_{BCD} \quad (\text{II.10})$$

Les E_{ijk} et les E_{ik} sont respectivement, les gaps d'énergie des alliages ternaires et des composés binaires qui rentrent dans la composition de l'alliage quaternaire, par contre les α_{ijk} sont les affaiblissements des gaps.

Comme exemple, Pour l'alliage quaternaire $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}_y\text{Te}_{1-y}$ formé des composés binaires ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe, les facteurs de forme symétriques V_S et antisymétriques V_A sont calculés relativement à l'aide de l'expression (II.4) donnant $V_S^{alliage} = xy V_S^{CdSe} + (1-x)y V_S^{ZnSe} + x(1-y)V_S^{CdTe} + (1-x)(1-y)V_S^{ZnTe}$ (II.11)

Et

$$V_A^{alliage} = xy V_A^{CdTe} + (1-x)y V_A^{ZnSe} + x(1-y)V_A^{CdTe} + (1-x)(1-y)V_A^{ZnTe} \quad (\text{II.12})$$

Pour trouver une relation entre les deux concentrations molaire x et y , il faut respecter l'accord de maille entre l'alliage quaternaire et son substrat, ce qui permet de trouver une relation entre les deux concentrations molaire x et y .

II.5.4 Les alliages semiconducteurs Penternaires

Un alliage penternaire est de la forme $A_x B_{1-x} C_y D_z E_{1-y-z}$, il est formé de six composés binaires AC, AD, AE, BC, BD et BE, la recherche de sa propriété physique revient à utiliser une interpolation des propriétés physiques de ses binaires, en utilisant trois concentrations molaires x , y et z , tout en se basant sur la théorie développée pour les alliages quaternaires.

La constante du réseau pour l'alliage penternaire est donnée par la loi de Vegard [22]:

$$a^{alliage}(x, y, z) = xy a_{AC} + xz a_{AD} + x(1-y-z)a_{AE} + (1-x)y a_{BC} + (1-x)z a_{BD} + (1-x)(1-y-z)a_{BE} \quad (\text{II.13})$$

Ou

a_{AC} , a_{AD} , a_{AE} , a_{BC} , a_{BD} et a_{BE} sont les constantes du réseau des composés AC, BC, AD, AE, BE et BD respectivement.

Dans le même formalisme, les facteurs de forme symétriques et antisymétriques de l'alliage penternaire sont calculés comme suit :

$$V^{S,A} VCA^{(G)} = xy V^{S,A} AC^{(G)} + xz V^{S,A} AD^{(G)} + x(1-y-x) y(1-x) V^{S,A} BC^{(G)} + z(1-x) V^{S,A} BD^{(G)} + (1-x)(1-y-z) V^{S,A} BE^{(G)} \quad (\text{II.14})$$

Avec

$$V^{S,A} AC^{(G)}, V^{S,A} AD^{(G)}, V^{S,A} AE^{(G)}, V^{S,A} BC^{(G)}, z V^{S,A} BD^{(G)} \text{ et } V^{S,A} BE^{(G)}$$

sont les facteurs de formes symétriques et antisymétriques des composés binaires de l'alliage ternaire. Les critères concernant l'accord des paramètres de maille entre l'alliage et le substrat restent toujours valables dans le cas des alliages ternaires, permettant ainsi, de trouver une relation entre les différentes fractions molaires x , y et z .

II.6 L'approximation du cristal virtuel (VCA)

La V.C.A considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique monoatomique (virtuel) avec un potentiel atomique moyen.

II.6.1 Cas d'un alliage ternaire II-VI

Un semiconducteur ternaire $A_x^{II} B_{1-x}^{II} C^{VI}$ est supposé uniforme, cependant, l'effet des fluctuations de la composition x est inévitable. Le désordre peut être dû à la différence des potentiels intrinsèques des atomes A et B qui se substituent mutuellement sur les sites correspondant aux atomes du groupe V dans la blende. La différence entre les potentiels intrinsèques des substituants (A et B) se traduit par des distorsions locales et les paramètres du nouveau matériau ainsi obtenu dépendront de l'amplitude de ces distorsions.

II.7 L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)

Dans les années soixante-dix, Baldereschi et Maschke ont traité l'effet du désordre compositionnel comme une perturbation mais restent toujours incapables d'expliquer le paramètre de courbure. Les efforts requis pour cette méthode sont importants rendant son application assez difficile. Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel dû au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système devient :

$$V(\mathbf{r}) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (\text{II.15})$$

$$V(\mathbf{r}) = V_{VCA} - p(x(1-x))^{1/2} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (\text{II.16})$$

avec

V_{VCA} le potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}$ le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel.

II.8 Conclusion

Les technologies semiconductrices ont connus la plus forte progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement des économies modernes, vus les multiples applications technologique, ils possèdent plusieurs propriétés qui peuvent être mises à profit pour des multiples applications surtout dans le domaine optoélectronique.

Les alliages des composés semiconducteurs sont aussi considérés comme une classe importante de ces matériaux, grâce à l'ajustement et le contrôle de leurs paramètres physiques en fonction de la composition, permettant ainsi, l'obtention d'un composant optoélectronique aux propriétés désirées.

Références bibliographiques citées dans le chapitre II :

- [1] A. Aouina, Mémoire de magister, « Rôle du rayonnement dans l'élaboration et l'étude de nano agrégats semi-conducteurs de ZnS », Université Constantine.
- [2] Q. Tridoan, thèse de doctorat, université de Reims, Champagne.Ardenne, (2011).
- [3] M. Rohlfing, P. Krüger, J. Pollmann, "*Quasiparticle band-structure calculation for C, Si, Ge, GaAs, and SiC using Gaussian-orbital basis set*", Phys. Rev. B 48, No.24 (1993), pp.17791-17805
- [4] Thèse de Stewart Clark, (1996).
- [5] B. Brahmi, Thèse de doctorat, Université abou bakre belkaid– tlemsen, (2013)
- [6] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod université (1983).
- [7] K. Schwarz, C. Ambrosch-Draxl, and P. Blaha, Phys. Rev. B 42, 2051 (1990).
- [8] N. Bouarissa, Matter. Chem. Phys. 72 (2001) 387.
- [9] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.
- [10] <http://ebookbrowse.com/ele101-cnam-7-2008> dispositifs optoélectroniques
- [11] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, Phys. Rev. B1, 3351 (1970).
- [12] D. Richardson, J. Phys.: Solid Stat. Phys. 4, L289 (1971).
- [13] D. Richardson, J. Phys.: Solid Stat. Phys. 5, 27 (1972).
- [14] R. Hill, J. Phys. C.: Solid. Stat. Phys. 7, 521 (1974).
- [15] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [16] F. Aymerich, Phys. Rev. B26, 1968 (1982).
- [17] H. Abid, Thèse de Doctorat d'état, Université de Sidi Bel-Abbes, (1997).
- [18] Y. P. Feng, K. L. Teo, M. F. Li, H. C. Poon, C.K. Ong and J. B. Xia, J. Appl. Phys. 74, 3948 (1993).
- [19] V. B. Gera, R. Gupta, and K. P. Jain, Phys. Rev. B36, 9657 (1987).
- [20] A. Sasaki, M. Nishiuma and Y. Takeda, Jpn. J. Appl. Phys. 19, 1698 (1980).
- [21] A. G. Thomson J. C. Wooly, Can. J. Phys. 45, 255 (1967).
- [22] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.



Chapter III

Résultats et discussion

Chapitre III : Résultats et discussion

III.1 Introduction

Le progrès scientifique est très lié au développement de la physique des semiconducteurs en mettant à profit leurs propriétés pour réaliser certains dispositifs électroniques et optoélectroniques.

Les composés semiconducteurs sont principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, structurales et élastiques.

Des méthodes diverses ont été adoptées pour l'investigation des propriétés des matériaux semiconducteurs. 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) pour étudier les propriétés électronique élastiques et les paramètres mécaniques des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x} cette étude a été faite sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

III.2 Étude des propriétés électroniques

III.2.1 Structure de bandes des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}

La structure de bandes d'énergie des semiconducteurs étudiés ainsi que leur Les facteurs de formes de pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires semiconducteurs CdS et le CdTe dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau (III.1)

Tableau (III.1) : Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs CdS et CdTe dans la phase zinc blende ainsi que les constantes du réseau a en (u.a).

Composés	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau a (en unité atomique)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
CdS	-0.23	0.01	0.06	0.134	0.096	0.019	11.0246
CdTe	-0.396388	0.198275	0.459548	0.1311	0.28	0.708145	12.2495

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 (III.2) Nos résultats sont en très bonne accord avec l'expérience .

Tableau (III.2) : Gaps énergétiques des composés zinc-blende CdS et CdTe .

Composé	E_r^r (ev)	E_r^X (ev)	E_r^L (ev)
CdS	2.38 ^a	3.63 ^a	3.50 ^a
	2.36 ^b	3.64 ^b	3.50 ^b
CdTe	1.50 ^a	3.47 ^a	2.46 ^a
	1.50 ^b	3.48 ^b	2.47 ^b

^a Nos calculs

^b Ref. [1]

III.3 Structure de bandes de CdS et de CdTe

III.3.1 Le composé CdS

Le sulfure de cadmium CdS est un semiconducteur à gap direct dont l'énergie est $E_g = 2.5$ eV formé d'un élément métallique, le cadmium ($Z = 48, 4d^{10}5s^2$) et d'un élément semimétallique, le sulfure ($Z = 16, 3S^23P^4$)

III.3.2 Le composé CdTe

Le Tellure de cadmium CdTe est un composé binaire de masse molaire 240 g.mol^{-1} formé d'un élément métallique, le cadmium ($Z = 48, 4d^{10}5s^2$) et d'un élément semimétallique, le tellure ($Z = 52, E_g = 0,33\text{eV}, 4d^{10}5s^25p^6$) [2].

Les structures de bandes du l'alliage CdS_xTe_{1-x} sont représentées dans les figures III.1, III.2 et III.3 pour $x=0$, $x=0.5$ et $x=1$ respectivement.

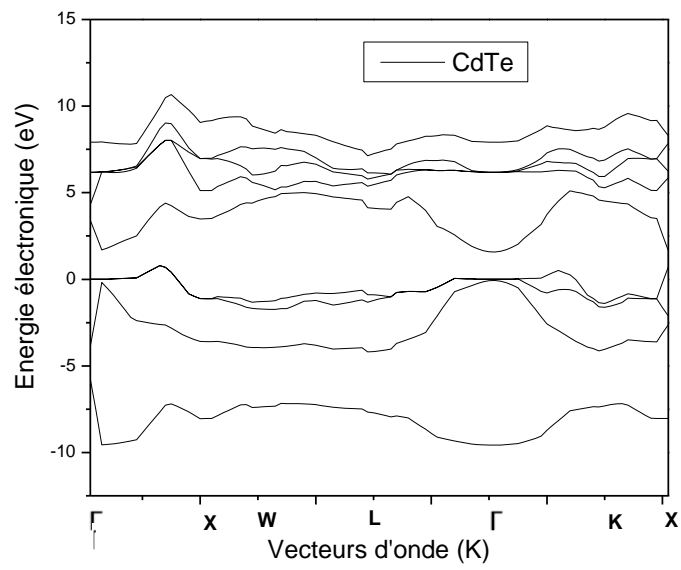


Figure (III.1) : La structure de bandes électronique de l'alliage CdS_xTe_{1-x} pour $x=0$

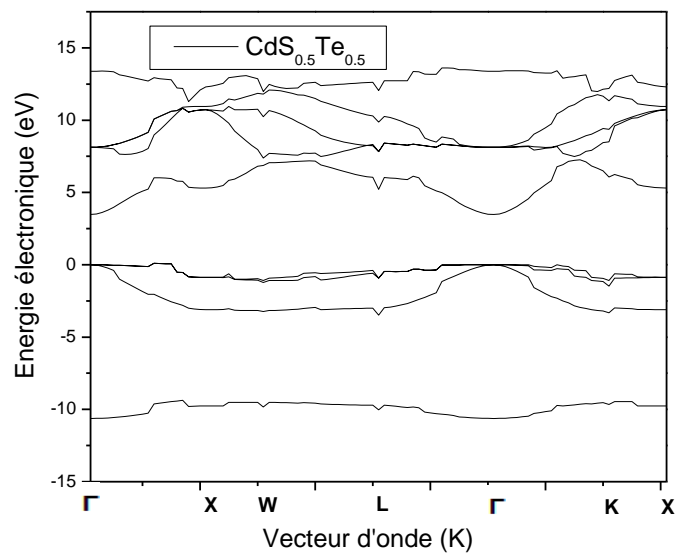


Figure (III.2) : La structure de bandes électroniques de l'alliage CdS_xTe_{1-x} pour $x=0.5$

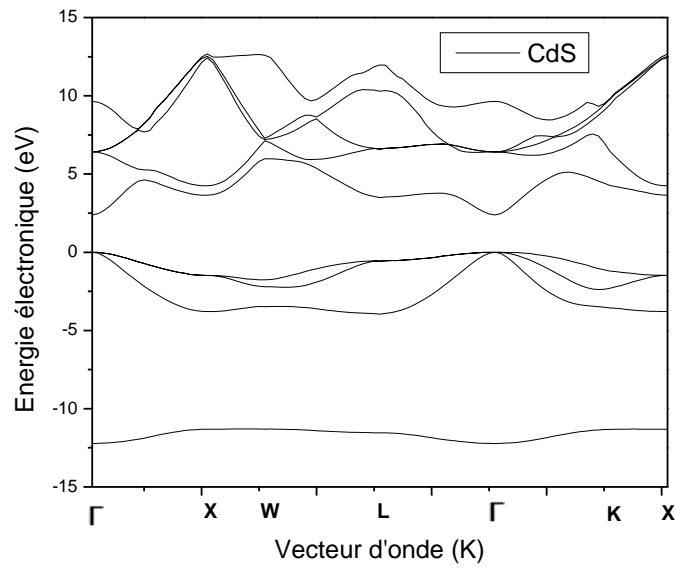


Figure (III.3) : la structure de bandes électronique de l'alliage CdS_xTe_{1-x} pour $x=1$

Le sommet de bandes de valence pour tous les alliages semiconducteurs et leurs parents est pris comme origine des énergies. On remarque que le maximum de la bande de valence est au point Γ dans le centre de la zone de Brillouin et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ . L'alliage CdS_xTe_{1-x} est un semiconducteur à gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ pour toutes les concentrations étudiées.

III.4 Gap énergétique des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x}

Les variations des gaps énergétiques direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{Γ}^X , E_{Γ}^L ont été calculées pour différentes compositions x des alliages ternaires CdS_xTe_{1-x} allant de 0 à 1, nos résultats sont présentés dans le tableau (III.3). Nos valeurs de gap des composés parents sont comparées à des données théoriques, ce qui montre le bon accord des résultats. Pour les alliages CdS_xTe_{1-x} nos résultats sont des prédictions.

Tableau (III.3) : Les variations des gaps énergétique de l'alliage CdS_xTe_{1-x} .

Composition x	E_r^F	E_r^X	E_r^L
0	1.50 ^a 1.5045 ^b	3.48 ^a 3.48 ^b	2.47 ^a 2.47 ^b
0.1	2.15	4.01	3.37
0.2	2.67	4.48	4.04
0.3	3.06	4.88	4.56
0.4	3.32	5.16	4.95
0.5	3.47	5.30	5.20
0.6	3.51	5.28	5.32
0.7	3.44	5.10	5.26
0.8	3.24	4.73	4.98
0.9	2.89	4.22	4.40
1	2.38 ^a 2.36 ^c	3.64 ^a 3.64 ^c	3.50 ^a 3.50 ^c

^aNos calculs

^bRef [3].

^cRef [4].

La variation des gaps énergétiques (E_r^F), (E_r^X) et (E_r^L) de l'alliage CdS_xTe_{1-x} en fonction de la composition x est présentée sur les figures (III.4), (III.5) et (III.6) respectivement :

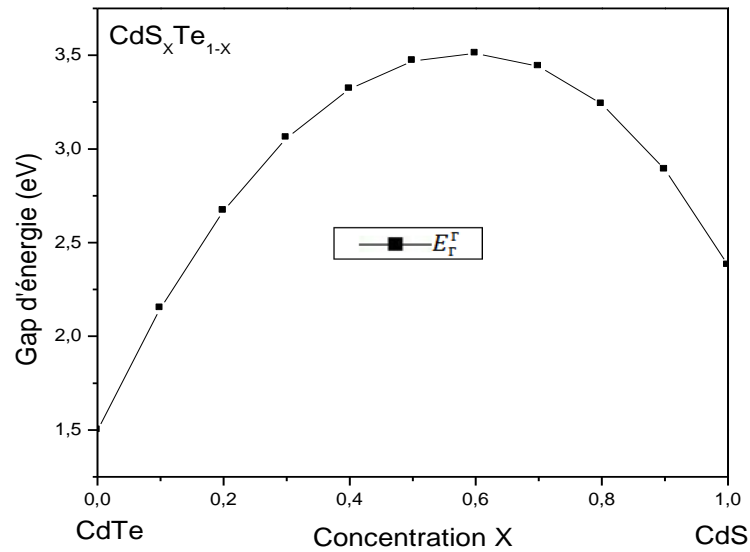


Figure (III.4) : La variation du gap direct (E_g^r) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (3.51 eV), puis diminue jusqu'à (2.38 eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'équation du fit quadratique est :

$$E_g^r(x) = 1.49972 + 7.04611 x - 6.1352 x^2 \quad (\text{III.1})$$

La figure (III.5) représente le gap d'énergie indirect E_g^X correspondant à la transition entre le minimum de la bande de valence au point de haute symétrie Γ dans la zone de Brillouin et le maximum de la bande de conduction au point de haute symétrie X

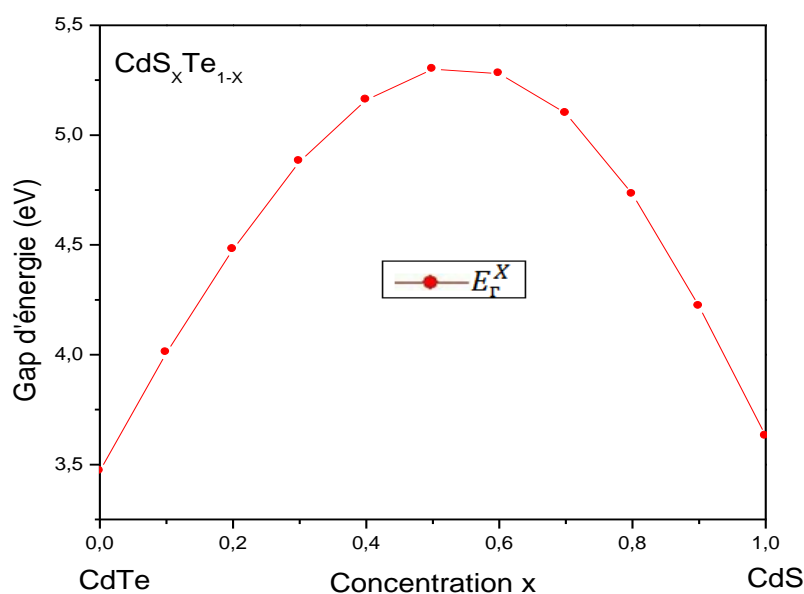


Figure (III.5) : La variation du gap indirect (E_r^X) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (5.30 eV), puis diminue jusqu'à (3.63eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'équation du fit quadratique est :

$$E_r^X(x) = 3.38308 + 7.281x - 7.01282x^2 \quad (\text{III.2})$$

La figure (III.6) représente le gap d'énergie indirect E_r^L correspondant à la transition entre le minimum de la bande de valence au point de haute symétrie Γ dans la zone de Brillouin et le maximum de la bande de conduction au point de haute symétrie L

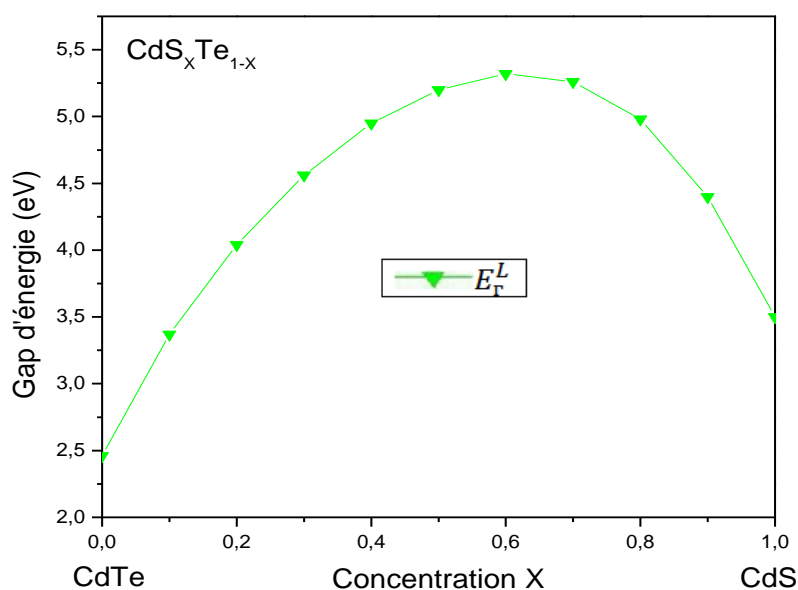


Figure (III.6) : La variation du gap indirect (E_r^L) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}

A travers cette figure, nous constatons que le gap augmente avec l'augmentation de la composition x jusqu'à (5.32 eV), puis diminuent jusqu'à (3.50 eV) cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'équation du fit quadratique est :

$$E_r^L(x) = 2.40021 + 10.16315 x - 8.8986 x^2 \quad (\text{III.3})$$

Pour une éventuelle transition Nous avons tracé les différentes courbes de variation des gaps énergétiques en fonction de la composition x sur la même figure (III.7).

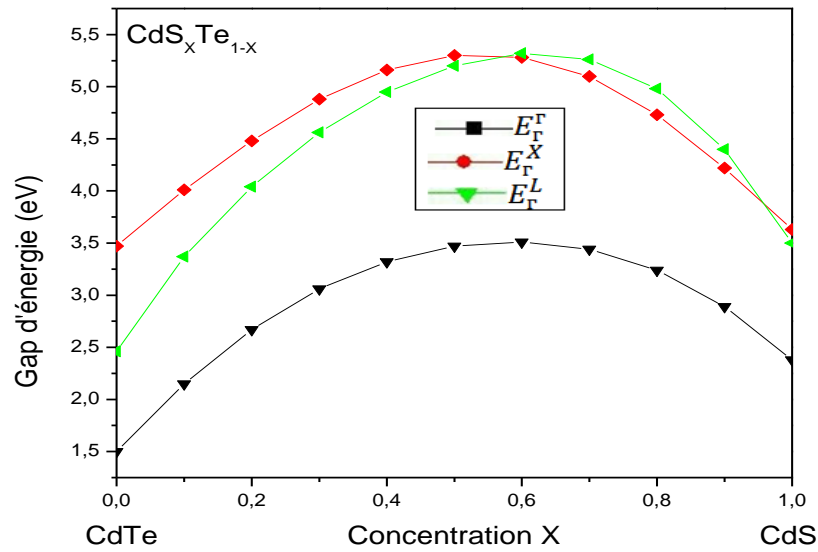


Figure (III.7) : La variation du gap direct (E_r^Γ) et des gaps indirects (E_r^X) et (E_r^L) en fonction de la concentration x de l'alliage CdS_xTe_{1-x} .

Nous constatons qu'il n'y a pas de transition entre les gaps énergétiques. Ce qui confirme nos résultats précédents, que notre alliage à un gap direct en allant de $x=0$ vers $x=1$ ce résultat est identique à la nature de gap de ses composés parents qui sont tous les deux à gap direct.

III.5 Les propriétés élastiques

III.5.1 Constantes élastiques

Les propriétés élastiques des matériaux semiconducteurs sont très importantes pour la Compréhension de beaucoup de leurs propriétés fondamentales pour les cristaux qui possèdent des éléments de symétrie, ce qui est exactement le cas des cristaux cubique, le nombre des constants élastiques est réduit et devient trois, C_{11} , C_{12} et C_{44} .

Les constantes élastiques C_{11} et C_{12} ont été calculé selon le modèle de Bouarissa [5], ou les constants élastique sont exprimée par :

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

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

Ou m est la masse de l'électron et d la distance entre les plus proches voisins, tel

$$\text{que : } d = \frac{\sqrt{3}a}{4}, \quad \alpha_p^2 \text{ est la polarité, } \alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)}$$

λ est le paramètre sans dimension qui a une valeur de 0.738[6].

La constante élastique C_{44} a été déterminée en utilisant la relation suivante, obtenue du modèle de champ de la force de valence [5] :

$$C_{44} = \frac{3(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}{7C_{11}+2C_{12}} \quad (\text{III.6})$$

Les résultats obtenus sont représentés dans le tableau (III.4) comparés à des données théoriques

Tableau (III.4) : Constantes élastiques (C_{ij}) de CdS et CdTe dans la phase zinc-blende comparés à des données théoriques.

Composants	Constantes élastiques (10^{11} dyn/cm^2)					
	C_{11}		C_{12}		C_{44}	
	Thé	Cal	Thé	Cal	Thé	Cal
CdS	6.72^b	6.69^a	5.57^b	2.99^a	2.93^b	2.67^a
CdTe	6.23^c	6.24^a	2.70^c	2.70^a	2.51^c	2.51^a

^aNos calculs

^bRef. [7].

^cRef. [8].

Afin 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 (III.8), (III.9), (III.10) et (III.11) nous remarquons que toutes les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} augment d'une manière non monotone et non linéaire avec l'augmentation de la concentration x .

Qualitativement, ces constantes élastiques montrent un comportement similaire. Ces courbes sont interpolées par les équations suivantes :

$$C_{11}(x) = 6.14182 + 3.46273 x - 2.77273 x^2 \quad (\text{III.7})$$

$$C_{12}(x) = 2.66203 + 1.4989 x - 1.11072 x^2 \quad (\text{III.8})$$

$$C_{44}(x) = 2.47726 + 1.39827 x - 1.15469 x^2 \quad (\text{III.9})$$

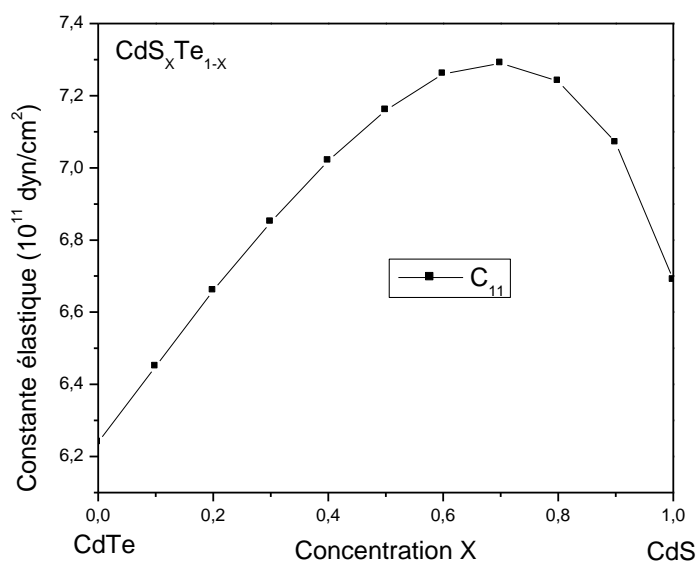


Figure (III.8) : La variation de la constante élastique C_{11} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}

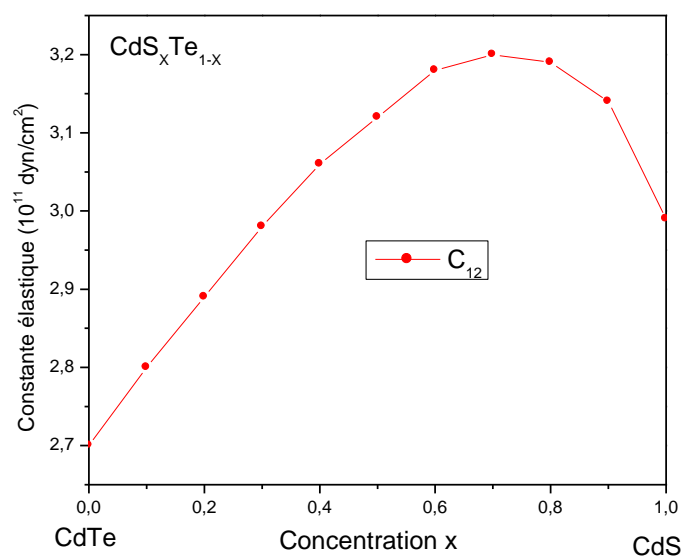


Figure (III.9) : La variation de la constante élastique C_{12} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .

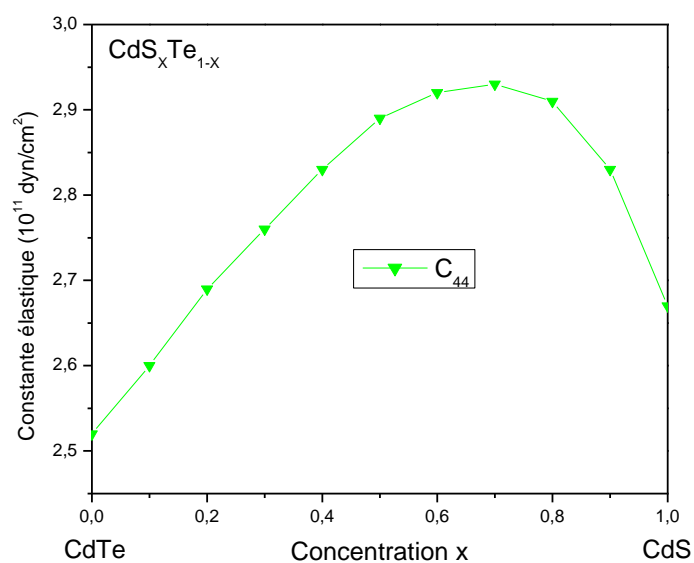


Figure (III.10) : La variation de la constante élastique C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .

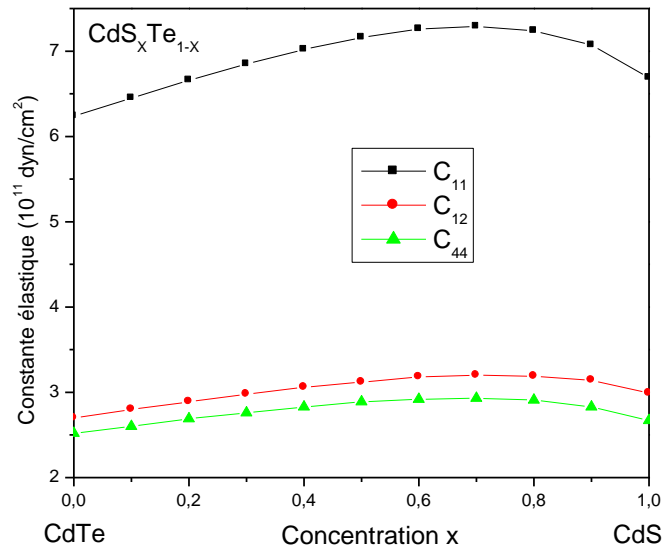


Figure (III.11) : La variation de la constante élastique C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .

La figure III.11 montre la variation des constantes élastiques C_{ij} en fonction de la concentration x , le comportement de tous les C_{ij} est non monotone. Néanmoins le taux de variation de la concentration dans C_{11} semble être plus important que ceux de C_{12} et C_{44} .

III.5.2 Paramètres mécaniques

III.5.2.1 Module de compressibilité

Le module de compressibilité B_S est un paramètre important qui donne une mesure de sa dureté. Pour les cristaux cubiques, on peut généralement obtenir B_S au moyen de l'expression [3].

$$B_S = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{III.10})$$

A concentration $x=0$ à $x=1$, notre valeur calculée de B_S est ($3.88 \cdot 10^{11}$ dyn/cm 2) à ($4.23 \cdot 10^{11}$ dyn/cm 2) cette valeur est en bon accord avec celle de l'expérience qui est de $4.22 \cdot 10^{11}$ dyn/cm 2) à ($6.84 \cdot 10^{11}$ dyn/cm 2) (voir tableau III.5)

La variation du module de compressibilité (B_S) en fonction de la concentration x est présentée sur la figure (III.12). nous constatons que Le module de compressibilité B_S augmente jusqu'à ($4.57 \cdot 10^{11}$ dyn/cm 2), avec l'augmentation de la composition x puis

diminue jusqu'à ($4.23 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'interpolation quadratique de nos données donne la relation suivante :

$$B_S(x) = 3.82192 + 2.15353 x - 1.66472x^2 \quad (\text{III.11})$$

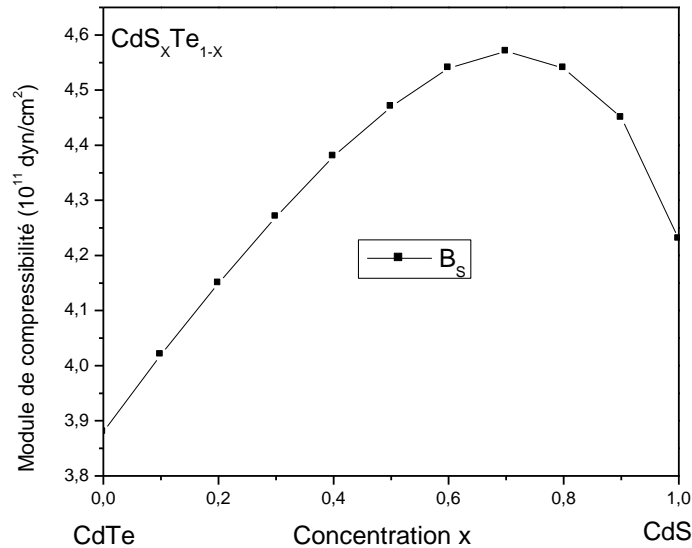


Figure (III.12) : Variation de module de compressibilité en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{CdS}_x\text{Te}_{1-x}$.

III.5.2.2 Module de cisaillement

Le module de cisaillement est une grande physique intrinsèque à chaque matériau et qui intervient dans la caractérisation des déformations causées par des efforts de cisaillement appelé C' , dans le présent document, ce dernier peut être obtenue à partir de la connaissance des constantes élastiques C_{11} et C_{12} en utilisant de la relation suivante [9]

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

A concentration ($x = 0$ à $x=1$), notre valeur calculé de C' est ($1.77 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) à ($1.85 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) cette valeur est en raisonnable accord avec celle de l'expérience qui de ($0.84 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) à ($1.88 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$) (voir tableau III.5).

La variation du module de cisaillement (C') en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} est montré sur la figure (III.13), nous constatons que Le module de cisaillement C' augmente jusqu'à $(2.04 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$, avec l'augmentation de la composition x puis diminue jusqu'à $(1.85 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$ cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'interpolation quadratique de nos données donne la relation suivante :

$$C'(x) = 1.7399 + 0.98191 x - 0.831 x^2 \quad (\text{III.13})$$

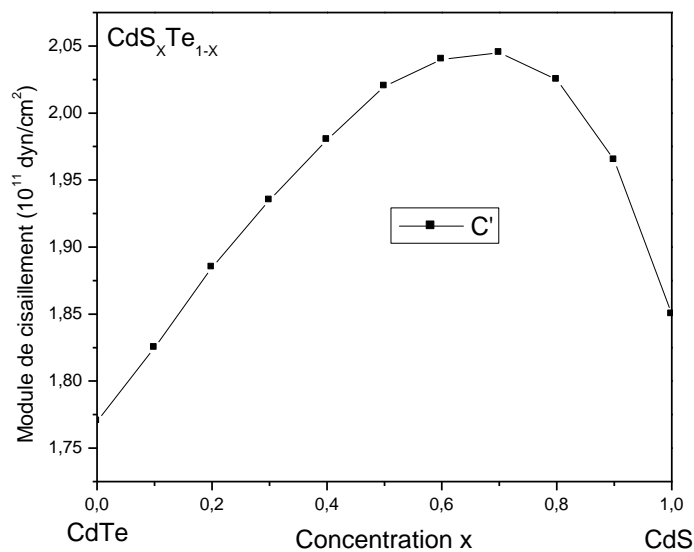


Figure (III.13) : Variation du module de cisaillement en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .

III.5.2.3 Module de Young

Le module de Young est la constante qui relie la contrainte de compression et le début de la déformation d'un matériau élastique isotrope. En utilisant la relation suivante [9] :

$$Y_0 = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (\text{III.14})$$

La figure (III.14) présente la variation du module de young (Y_0) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} , nous constatons que le module de

Young (Y_0) augmente jusqu'à ($5.34 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), avec l'augmentation de la composition x puis diminue jusqu'à ($4.85 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$), cette variation est donc non monotone et non linéaire.

L'interpolation quadratique de nos données concernant Y_0 est présentée par la relation suivante :

$$Y_0(x) = 4.53191 + 2.55793 x - 2.14095x^2 \quad (\text{III.15})$$

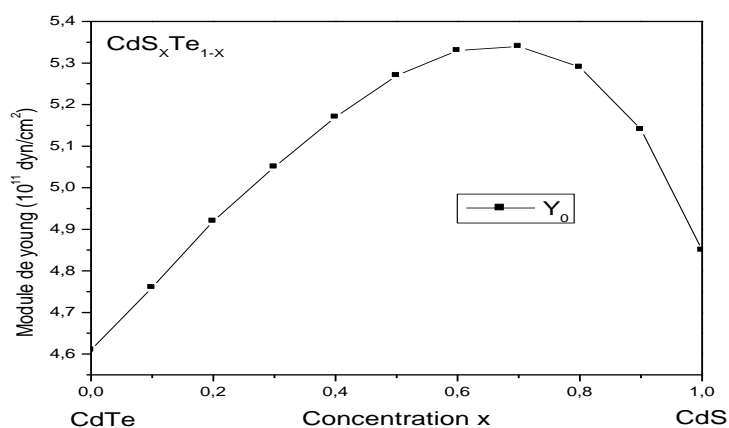


Figure (III.14) : Variation du module de Young en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .

Nos calculs concernant les paramètres mécaniques comparés à des données théoriques des composés parents sont illustrés dans le tableau III.5.

Tableau (III.5) : Module de compressibilité (B_S), module de cisaillement (C'), module de Young (Y_0) de zinc-blende pour les composés semiconducteurs CdS et CdTe.

Composé	$B_S(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$	$C'(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$	$Y_0(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$
CdS	4.22^a	1.85^a	4.84^a
	6.84^b	1.88^b	4.84^b
CdTe	3.88^a	1.77^a	4.60^a
	4.24^c	0.84^c	

^aNos calculs

^b Ref. [7], ^c Ref. [3].

III.5.2.4 Coefficient de poisson

Le Coefficient de poisson permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué. Il est exprimé par la relation suivante [10]:

$$\sigma_0 = \frac{c_{12}}{c_{11} + 2c_{12}} \quad (\text{III.16})$$

La figure (III.15) montre la variation du Coefficient de poisson (σ_0) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} . Il faut noter que lorsque la concentration augmente de ($x=0$ à $x=1$), la coefficient de poisson σ_0 augmente d'une façon monotone et linéaire.

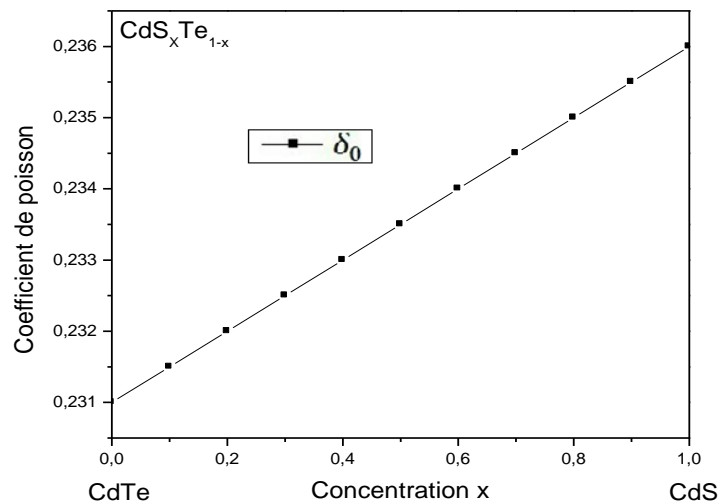


Figure (III.15) : Variation du coefficient de poisson en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .

Le coefficient de poisson a été utilisé par farmtsevich et al. [11], pour faire la distinction entre la ductilité et la fragilité des matériaux. La règle de farmtsevich est :

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

Dans nos calculs on a trouve $\sigma_0 = 0,23$; $0,23 < 0,33$

Donc on peut conclure que les composés semiconducteurs CdS et CdTe ainsi que les alliages d'intérêt se comportent de manière fragile. L'interpolation quadratique de nos données concernant σ_0 donne la relation suivante :

$$\sigma_0 = 0.231 + 0.005x - 4.42354 * 10^{-17} x^2 \quad (\text{III.17})$$

III.5.2.5 Fraction d'anisotropie

L'anisotropie élastique et la propriété mécanique de l'être dépendent de la direction. Le facteur d'anisotropie (A) est un paramètre mécanique utile, lié aux constants élastiques dans le cristal cubique [10].

$$A = \frac{c_{11} - c_{12}}{2c_{44}} \quad (\text{III.18})$$

La variation du facteur d'anisotropie (A) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} est montrée dans la figure (III.16) on remarque qu'en augmentant la concentration, la fraction d'anisotropie reste toujours constante à une valeur donnée de (0.70). En effet, un matériau semiconducteur isotrope doit avoir $A = 1$. Par conséquent, le degré d'anisotropie élastique dépend de la déviation de A par rapport à 1. Le matériau d'intérêt est donc caractérisé par une anisotropie de cisaillement pour la concentration variant de (x=0 à x=1), la variation de A s'avère très faible (négligeable). Ceci suggère que le degré d'anisotropie dans le matériau en question reste presque identique lorsque la concentration est appliquée. L'interpolation quadratique de nos données concernant A, donne la relation suivante :

$$A = 0.7$$

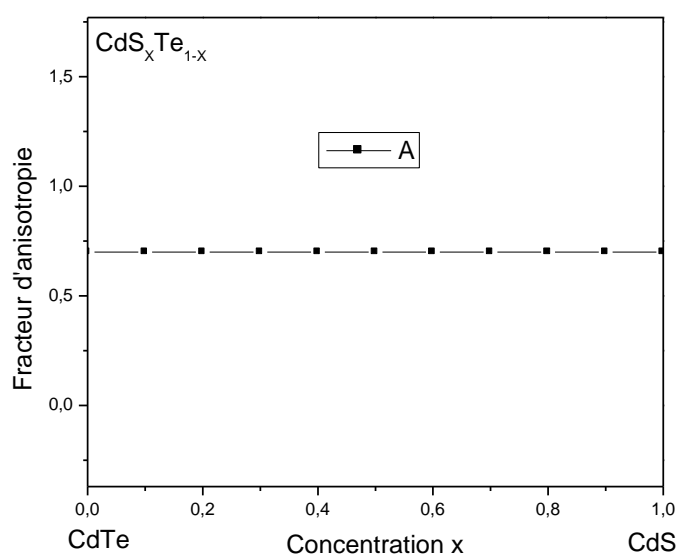


Figure (III.16) : Variation du la fraction d'anisotropie en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .

Le tableau III.6 représente nos valeurs des paramètres mécaniques des composés binaires parents comparées à des données de la littératures. Nous remarquons une autre fois que les résultats sont en bon accord.

Tableau (III.6) : Coefficient de poisson (σ_0), facteur d'anisotropie A de zinc-blende pour les composés semiconducteur CdS et CdTe comparé à des données théoriques.

Composé	σ_0	A
CdS	0.236^a	6.94^a
CdTe	0.231^a 0.41^c	7.02^a

^aNos calcul

^cRef. [3]

III.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés électroniques (structure de bandes et gaps énergétiques), les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) et les paramètres mécaniques (module de compressibilité (B_S), module de cisaillement (C'), module de Young (Y_0), coefficient de poisson (σ_0) et facteur d'anisotropie A), des alliages semiconducteurs CdS_xTe_{1-x} , nous avons utilisé la méthode empirique des pseudo-potentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la composition x sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nos résultats de toutes les propriétés étudiées de l'alliage CdS_xTe_{1-x} sont donc des prédictions.

Références bibliographiques citées dans le chapitre III

- [1] S.Adachi, « Properties of Groups IV, III-V, and II-VI Semiconductors », Wiley, Chichester,(2005).
- [2] P.Baranski, V. Klotchkov, I. Potykevich, Electronique des semi-conducteurs, Moscou, (1978).
- [3] N. Bouarissa, Microhardness and mechanical stability, (2019).
- [4] H. Algarni, N.Bouarissa, M. Ajmal Khan, O.A Al – Hagan., T.F .Alhuwayme ,(2019).
- [5] H. Algarni, O.A. Al-Hagan, N. Bouarissa, T. F .Alhuwaymel & M .Ajmal Khan ,(2018).
- [6] 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).
- [7] M. Zafar, M. Shakil, Shabbir Ahmed, Muhammad Raza-ur-rehman Hashmi, M.A. Choudhary, Naeem-ur-Rehman, (2017).
- [8] S. Saib, S. Benyettou, N. Bouarissa,(2015).
- [9] N. Bouarissa, S. Saib, (2013).
- [10] N. Bouarissa, S. Saib, M . Boucenna, F. Mezrag, (2018).
- [11] I.N. Frantsevich, F.F. Voronov, S.A. Bocuta, in:I.N. Frantsevich(Ed), Elastic constants and Elastic Moduli of Metals and Insulators Handbook, Naukova Dumka, Kiev, 1938, pp. 60-180



Conclusion générale

Conclusion générale

Le présent travail est réalisé dans le cadre de l'étude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et paramètres mécaniques reliés des alliages ternaires semiconducteurs CdS_xTe_{1-x} dans la phase zinc-blende. La méthode utilisée est celle du pseudo potentiel empirique local (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA).

Nos résultats ont montré que pour les alliages semiconducteurs ternaires CdS_xTe_{1-x} , tous les gaps d'énergie direct E_r^r et indirects (E_r^x) et (E_r^L) étudiés varient de façon non monotone et non linéaire avec la composition x allant de 0 à 1. Les alliages en question ainsi que les composés parents sont tous à gap direct. Nos résultats des gaps des alliages sont des prédictions.

Nous avons calculé aussi les propriétés élastiques : Les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}), les paramètres mécaniques reliés : module de compressibilité (B_S), module de cisaillement (C'), module de Young (Y_0), coefficient de Poisson (σ_0), facteur d'anisotropie (A) des alliages ternaires semiconducteurs CdS_xTe_{1-x} .

La comparaison de nos résultats concernant les composés parents CdS et CdTe avec les résultats théoriques et expérimentaux montre, en générale, un bon accord, ce qui confirme la fiabilité de notre méthode utilisée. Nos résultats pour les alliages CdS_xTe_{1-x} sont donc des prédictions.

Liste des figures

N°	Titre	page
Figure. I.1	La relation entre la structure cristalline et la structure de bandes des matériaux semiconducteurs.	6
Figure. I.2	structure cristalline Diamant et Zinc Blende	7
Figure. I.3	Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel	7
Figure. I.4	Composantes normales et tangentielles d'un tenseur de contraintes	9
Figure. I.5	Positions des axes de coordonnées : (a)état initial, (b)état déformé	10
Figure. I.6	Illustration de la contraction d'un matériau.	14
Figure. I.7	Un essai de cisaillement.	15
Figure. II.1	Structure en Bandes d'énergie pour les isolants, les semiconducteurs et les conducteurs.	19
Figure. II.2	A gauche : structure de bandes électronique du germanium Ge. A droite : transition électronique possible autour d'un gap direct.	21
Figure. II.3	A gauche : structure de bandes électronique du silicium (Si). A droite : transition électronique suivie d'une relaxation par émission de phonon .	22
Figure. II.4	Structure de bandes schématique d'un semiconducteur direct et un indirect .	23
Figure. II.5	Silicium dopé au phosphore (a) à $T = 0$ °K et, (b) à $T > 0$ K.	24
Figure. II.6	Silicium dopé au Bore (a) à $T = 0$ K et, à (b) $T > 0$ K.	24
Figure. II.7	Paramètre de réseau de quelques composés binaires.	28
Figure. III.1	la structure de bandes électronique pour $x=0$	37
Figure. III.2	la structure de bandes électroniques pour $x=0.5$	37

Figure. III.3	la structure de bandes électronique pour $x=1$	38
Figure. III.4	La variation du gap direct (E_r^r) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	40
Figure. III.5	La variation du gap indirect (E_r^X) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	41
Figure. III.6	La variation du gap indirect (E_r^L) en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	42
Figure. III.7	La variation du gap direct (E_r^r) et des gaps indirects (E_r^X) et (E_r^L) en fonction de la concentration x de l'alliage CdS_xTe_{1-x} .	43
Figure. III.8	la variation du constant élastique C_{11} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x}	45
Figure. III.9	la variation du la constant élastique C_{12} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	46
Figure. III.10	la variation du constant élastique C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	46
Figure. III.11	la variation du constant élastique C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	47
Figure. III.12	variation de module compressibilité en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	48
Figure. III.13	variation du module de cisaillement en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	49
Figure. III.14	variation du module de Young en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	50
Figure. III.15	variation du coefficient de poisson en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	51
Figure. III.16	variation du la fraction d'anisotropie en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire CdS_xTe_{1-x} .	53

Liste des tableaux

N°	Titre	Page
Tableau. I.1	Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs II-VI.	8
Tableau. I.2	Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs III-V.	8
Tableau.II.1	les groupes des semiconducteurs.	20
Tableau. II.2	Semiconducteurs du type III-V et II-VI et ceux du groupe IV.	25
Tableau. II.3	La liste de certains semiconducteurs.	26
Tableau. III.1	Facteurs de formes (R_y) et paramètres de réseaux du CdS et CdTe	35
Tableau. III.2	Gaps énergétiques des composés zinc-blende CdS et CdTe	36
Tableau. III.3	Les variations des gaps énergétique de l'alliage CdS_xTe_{1-x}	39
Tableau. III.4	constantes élastiques (C_{ij}) de CdS et CdTe dans la phase zinc-blende a concentration x	44
Tableau. III.5	Module de compressibilité (B_S), module de cisaillement (C'), module de young (Y_0) de zinc-blende pour les composés semiconducteurs CdS et CdTe .	50
Tableau. III.6	Coefficient de poisson (σ_0), facteur d'anisotropie A de zinc-blende pour le composé semiconducteur CdS et CdTe	53

تلخيص

تم استخدام نهج شبه الكمون التجريبي مع التقريب البلوري الافتراضي VCA لدراسة الخصائص الإلكترونية (بنية النطاق وفجوة الطاقة) والثوابت المرنة والمعاملات الميكانيكية لسبائك انصاف النواقل في هيكل مزيج الزنك CdS_xTe_{1-x} وفي نطاق التركيز (0-1) تحظى هذه السبائك باهتمام كبير في تصميم الأجهزة الإلكترونية الضوئية مثل الخلايا الشمسية وأجهزة الإنارة وثنائيات الليزر. أظهرت نتائجنا أن جميع خصائص الاهتمام تختلف باختلاف التركيز x ، وهذا سيسمح لنا بالحصول على مواد جديدة ذات خصائص مرغوبة جديدة.

Résumé

L'approche pseudo-potential empirique avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) ont été utilisés pour l'étude des propriétés électroniques (structure de bande et gap énergétique), les constantes élastiques et les paramètres mécaniques des alliages semiconducteurs CdS_xTe_{1-x} dans la structures zinc blende et dans la plage de concentration (0-1). Ces alliages ont un intérêt important pour la conception des dispositifs optoélectroniques tels que, les cellules solaires, les dispositifs luminescents et les diodes laser. Nos résultats ont montré que toutes les propriétés d'intérêts varient avec la concentration x . Cela va nous permettre d'avoir des nouveaux matériaux avec de nouvelles propriétés désirées.

Abstract

The empirical pseudo-potential approach within the virtual crystal approximation (VCA), is carried out for the electronic properties (band structure and band gap energy), elastic constants and the mechanical parameters for zinc blende CdS_xTe_{1-x} semiconducting alloys in the composition range (0-1). These alloys are of great importance in the design of photo electronic devices such as solar cells, illuminated devices and laser diodes. Our results showed that all studied properties vary with the concentration x . This gives the opportunity to have new materials with new desired properties.