

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° : Ph/APP/07/2023



DOMAINE : Sciences de la matière  
FILIERE : Physique  
OPTION : PHYSIQUE APPLIQUEE

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique

Par : FERAHTIA Ameer

Intitulé

**Calculs pseudopotentiel de l'indice de réfraction  
et les constantes diélectriques des alliages  
ternaires semiconducteurs  $Zn_xCd_{1-x}S$**

Soutenu le 21 / 06 /2023 devant le jury composé de :

BOUARISSA Nadir	Université M'sila.	Président
MEZRAG Fadila	Université M'sila	Rapporteur
BOUFERRACHE Karim	UniversitéM'sila	Examinateur

Année universitaire : 2022/2023

# Remerciements

**J**E Remerciez mon Dieu Tout-Puissant de m'avoir donné courage, la volonté et la patience d'achever cette œuvre. Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon Superviseur le Dr Mezrag Fadila, Professeur Université M'sila, qui a supervisé mon travail de recherche dont elle est l'initiatrice. Je le remercie pour ses connaissances, ses critiques pertinentes, sa grande patience et sa disponibilité pendant toute la période de réalisation de ce travail. Je remercie vivement le professeur (Nadir BOUARISSA) pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le jury. Je tiens également à remercier l'examinateur, professeur (Krim BOUFERRACHE), pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail. Mes sentiments de reconnaissance et de remerciements vont également à toute personne qui a participé de loin directement ou indirectement à la réalisation de ce travail.

# Dedicates

**Je dédie mon cet travail :**

**A mes chers Parents et ma Femme**

**A mes enfants : Fatima, Mohamed, Tesnim Aicha et Omar AlFarouk**

**A mes Frères et mes Soeurs**

**A toute ma famille et à mes amis ( Khaled et les autres)**

**A tous ceux qui m'ont aidé de loin ou de près pour réaliser ce travail**

# Tableau des matières

<b>Tableau des matières</b>	<b>i</b>
<b>Liste des Figures</b>	<b>iii</b>
<b>Liste des Tableaux</b>	<b>iv</b>
<b>1 Généralités sur les semi conducteurs</b>	<b>4</b>
1.1 Introduction . . . . .	4
1.2 Définition d'un semi conducteurs . . . . .	4
1.3 La conduction électrique . . . . .	4
1.4 Les bandes d'énergies et le gap énergétique . . . . .	5
1.5 Différentes types des semiconducteurs . . . . .	7
1.5.1 Semiconducteur intrinsèque . . . . .	7
1.5.2 Semiconducteur extrinsèque . . . . .	7
1.5.2.1 Les semiconducteurs extrinsèques dopés n . . . . .	7
1.5.2.2 Les semiconducteurs extrinsèques dopés P . . . . .	8
1.6 Les semi-conducteurs par groupe . . . . .	8
1.7 Conclusion . . . . .	10
<b>2 La théorie des alliages semiconducteurs</b>	<b>12</b>
2.1 introduction . . . . .	12
2.2 Les alliages semiconducteurs . . . . .	12
2.3 Classification des alliages semi-conducteurs . . . . .	13
2.4 L'approximation du cristal virtuel (VCA) . . . . .	14
2.4.1 Les alliages ternaires . . . . .	14
2.4.2 Le paramètre de maille des alliages ternaire . . . . .	14
2.5 Méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semiconducteurs . . . . .	15
2.5.1 La méthode de pseudo-potentiel (P.M) . . . . .	15
2.5.2 Le formalisme mathématique du pseudo-potentiel . . . . .	15
2.5.3 La méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M) . . . . .	18

2.5.3.1	L'approximation empirique locale . . . . .	18
2.6	Conclusion . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Les propriétés Physiques de semiconducteurs</b>	<b>23</b>
3.1	Introduction . . . . .	23
3.2	Les propriétés optiques . . . . .	23
3.2.1	L'indice de réfraction . . . . .	24
3.2.1.1	Modèle de Moss . . . . .	24
3.2.1.2	Modèle de Gupta et Ravindra . . . . .	24
3.2.1.3	Modèle de Hervé et Vandamme . . . . .	24
3.2.1.4	Modèle de Reddy et Anjaneyulu . . . . .	24
3.2.1.5	Modèle de Ravindra . . . . .	25
3.2.1.6	Modèle de Reddy et Ahammed . . . . .	25
3.3	Les propriétés diélectriques . . . . .	25
3.3.1	La constante diélectriques . . . . .	25
3.3.1.1	La relation entre l'indice de réfraction et la constante diélectrique . . . . .	26
3.4	Conclusion . . . . .	27
<b>4</b>	<b>Résultats et discussion</b>	<b>29</b>
4.1	Introduction . . . . .	29
4.2	Propriétés électroniques . . . . .	29
4.2.1	Les alliages ternaires $Zn_xCd_{1-x}S$ . . . . .	32
4.2.1.1	Le gap énergétique . . . . .	32
4.3	Les propriétés optiques (Indice de réfraction) . . . . .	36
4.4	Les propriétés diélectriques . . . . .	38
4.4.1	La constante diélectriques de haute fréquence . . . . .	38
4.4.2	La constante diélectrique statique $\epsilon_0$ . . . . .	38
4.5	Conclusion . . . . .	41

# Liste des Figures

1.1	L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium). . . . .	5
1.2	Diagramme des bandes d'énergie des semi conducteurs. . . . .	6
1.3	Diagramme des bandes d'énergie des semi conducteurs. . . . .	6
1.4	Silicium dopé au Phosphore (dopage n) : a $T = 0K$ et b $T \neq 0k$ . . . .	8
1.5	Silicium dopé au Bore (dopage p) : a $T = 0K$ et b $T \neq 0K$ . . . . .	8
2.1	Le potentiel d'interaction entre deux atomes en fonction de la distance r	17
2.2	algorithme du calcul de l'E.P.M . . . . .	19
4.1	.Structure de bande pour CdS . . . . .	30
4.2	Structure de bande pour ZnS. . . . .	31
4.3	Structure de bande pour $Zn_{0,5}Cd_{0,5}S$ . . . . .	31
4.4	Le gap énergétique direct ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) des alliages semiconducteurs $Zn_xCd_{1-x}S$ .	33
4.5	Le gap énergétique indirect ( $\Gamma$ - $L$ ) des alliages semiconducteurs $Zn_xCd_{1-x}S$ . . . . .	33
4.6	Le gap énergétique indirect ( $\Gamma$ - $X$ ) des alliages semiconducteurs $Zn_xCd_{1-x}S$ .	34
4.7	La variation du gap direct ( $\Gamma$ - $\Gamma$ )et ceux des gaps indirects ( $\Gamma$ - $X$ )et ( $\Gamma$ - $L$ ) en fonction de la concentration x en zinc de l'alliage semiconducteur $Zn_xCd_{1-x}S$ (sans désordre) . . . . .	34
4.8	La variation du gap direct ( $\Gamma$ - $\Gamma$ )et ceux des gaps indirects ( $\Gamma$ - $X$ )et ( $\Gamma$ - $L$ ) en fonction de la concentration x en zinc de l'alliage semiconducteur $Zn_xCd_{1-x}S$ (avec désordre) . . . . .	35
4.9	.La variation de l'indice de réfraction n du $Zn_xCd_{1-x}S$ en fonction de la concentration x du zinc pour les six modèles . . . . .	40
4.10	la variation de la constante diélectrique de haute fréquence et de la constante diélectrique statique en fonction de la composition du zinc dans $Zn_xCd_{1-x}S$ (sans désordre) . . . . .	40
4.11	La variation de la constante diélectrique de haute fréquence et de la constante diélectrique statique en fonction de la composition du zinc dans $Zn_xCd_{1-x}S$ (avec désordre). . . . .	41

# Liste des Tableaux

1.1	Quelques exemples des matériaux semiconducteurs III-V . . . . .	10
3.1	La constante diélectrique statique et optique de quelques matériaux semi conducteurs . . . . .	26
4.1	Les paramètres pseudopotentiels du ZnS et CdS. . . . .	32
4.2	Gaps d'énergie pour ZnS et CdS utilisés dans l'ajustement des facteurs de formes. (Les valeurs expérimentales sont données à température ambiante).	32
4.3	Calcul des indices de réfraction de l'alliage $Zn_xCd_{1-x}S$ en fonction de la composition $x$ du Zinc. . . . .	37
4.4	Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence et de la constante diélectrique statique pour CdS, ZnS et $Zn_xCd_{1-x}S(0 < x < 1)$ , compa- rées aux données théoriques. . . . .	39

# Introduction générale

Les alliages ternaires des composés semiconducteurs, sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre du réseau, gap énergétique, indice de réfraction, constantes optiques et d'autres paramètres physiques qui peuvent être ajustés et contrôlés pour l'obtention d'un composant opto-électronique bien désiré[1].

- ➔ Le gap énergétique et les constantes optiques sont des paramètres importants et jouent un rôle important en physique. Une connaissance précise de la structure de bandes du matériau étudié est nécessaire pour l'évaluation de son domaine d'application, les transitions directs et indirects en fonction de la composition sont particulièrement d'une importance principale pour l'étude et la fabrication des guides d'ondes[2, 3].
- ➔ plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode de pseudopotentiel empirique (EPM) 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 [4], pour remédier à ce problème, il est nécessaire d'introduire l'effet du désordre compositionnel dans la VCA.

plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode de pseudopotentiel empirique (EPM) 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 [4], pour remédier à ce problème, il est nécessaire d'introduire l'effet du désordre compositionnel dans la VCA. Dans notre présent travail, nous avons investi la dépendance en composition des quantités physiques liées à la structure de bandes électronique tels que, les gaps énergétiques, de l'alliage ternaire  $Zn_xCd_{1-x}S$  on utilisant la méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. La connaissance du gap énergétique nous a permis de calculer quelques paramètres optiques tels que l'indice de réfraction, la constante diélectrique de haute fréquence et de voir leur dépendance en fonction de la concentration  $x$  du Zinc on utilisant bien sûr différents relations empiriques liant l'indice de réfraction au gap énergétique. Une attention particulière est donnée à la

variation de la longueur d'onde en fonction du gap autrement dit en fonction de la concentration  $x$  du Zinc de notre alliage d'étude dans le but d'évaluer son spectre d'émission Dans le premier chapitre, nous parlons de quelques notions fondamentales sur la physique des semiconducteurs

- ◆ Dans le second chapitre, nous essayerons de donner quelques généralités sur les propriétés physiques des semiconducteurs, notamment, les propriétés structurales, optiques et diélectriques des matériaux semiconducteurs.
  
- ◆ Le troisième chapitre sera consacré aux méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques, où une attention particulière sera accordée à la méthode du pseudopotentiel empirique utilisée dans nos calculs, tout en exposant la théorie du cristal virtuel VCA, en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel comme un potentiel effectif appliquée au alliages
  
- ◆ semiconducteurs, à savoir les ternaires, et les quaternaires .
  
- ◆ Enfin, concernant les calculs des différents paramètres relatifs aux alliages étudiés, nos résultats, leur interprétation et leur comparaison aux travaux théoriques et expérimentaux feront l'objet du quatrième chapitre.

## Bibliographie

- [1] N. Bouarissa and R. Bachiri, “Elastic constants and related properties of  $\text{Al}_{x-1}\text{Ga}_x\text{Sb}_{1-y}\text{In}_y$ ,” *Physica B : Condensed Matter*, vol. 322, no. 1-2, pp. 193–200, 2002.
- [2] L. BENSEFA, *Effet du désordre compositionnel sur les propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires semiconducteurs  $\text{InPXSb}_{1-X}$* . PhD thesis, Université Mohamed BOUDIAF de M’Sila, 2018.
- [3] N. Bouarissa, “Compositional dependence of the elastic constants and the poisson ratio of  $\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}_x$ ,” *Materials Science and Engineering : B*, vol. 100, no. 3, pp. 280–285, 2003.
- [4] M. Oumelkhir, *Contribution à l’étude des propriétés optoélectroniques de l’alliage semi-conducteur ternaire  $\text{Y}_x\text{Ga}_{1-X}\text{N}$* . PhD thesis, Faculté des Sciences et Technologies, 2021.

# Chapitre 1

## Généralités sur les semi conducteurs

### 1.1 Introduction

Les semiconducteurs occupent une place importante à l'électronique : transistors, diodes et autres composants électroniques fonctionnent grâce aux propriétés particulières des semiconducteurs.

dans notre vie, nous trouvons des appareils électroniques presque partout, dans les radios, les télévisions, les ordinateurs, les calculatrices, les instruments de pilotage automatique des avions, des fusées et des vaisseaux spatiaux etc.

### 1.2 Définition d'un semi conducteurs

Un semiconducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductivité se situent entre celles des isolants et des conducteurs. La conductivité électrique, notée  $\sigma$ , caractérise l'aptitude d'un matériau à être utilisé comme semi-conducteur. Les valeurs de conductivité pour les semi-conducteurs varient sur plusieurs ordres de grandeur, généralement entre  $10^{-2}$  et  $10^5 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$ , et sont influencées par différents facteurs tels que :

- ◆ Température
- ◆ L'éclairement
- ◆ La présence d'impuretés (dopage) [1]

### 1.3 La conduction électrique

Le semi-conducteur, contrairement au métal, isole à  $0^\circ\text{K}$ ., tandis qu'à des températures plus élevées, il devient un conducteur électronique lorsqu'il est excité thermiquement, comme le montre la Figure [2] :

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont la conductivité est indirecte isolateurs

et conducteurs. Dans les semi-conducteurs, la conduction est assurée par deux types de porteurs de charge : les électrons et les trous. La conductivité électrique  $\sigma$  d'un semi-conducteur augmente rapidement avec la température selon la formule suivante :

$$\sigma(T) = q[n\mu_n(T) + p\mu_p(T)] \quad (1.1)$$

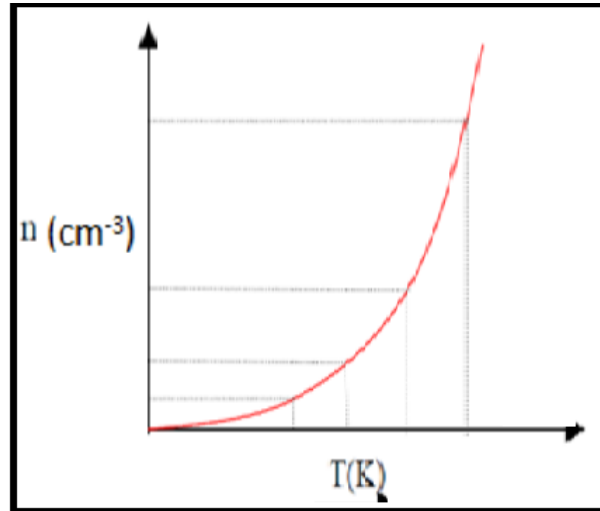


FIGURE 1.1 : L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium).

## 1.4 Les bandes d'énergies et le gap énergétique

La propriété électrique des semiconducteurs est généralement modélisée à l'aide de la théorie des bandes qui est un modèle quantique, qui définit les énergies admissibles des électrons dans un solide et aide à comprendre le concept de conductivité électrique, cette théorie est issue de la théorie des orbitales moléculaires. Les énergies potentielles d'un électron sous la forme d'un corps solide sont appelées bandes admissibles, séparées par d'autres bandes appelées bandes interdites ou gap, ce gap correspond à l'énergie nécessaire pour faire sauter l'électron de la bande de valence à la conduction groupe. Les bandes de basse énergie sont complètement occupées, ces bandes sont appelées bandes de valence et les bandes de haute énergie sont vides et sont appelées bandes de conduction [3].

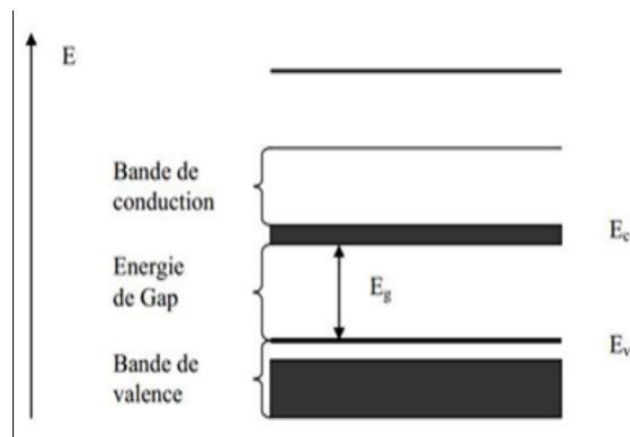
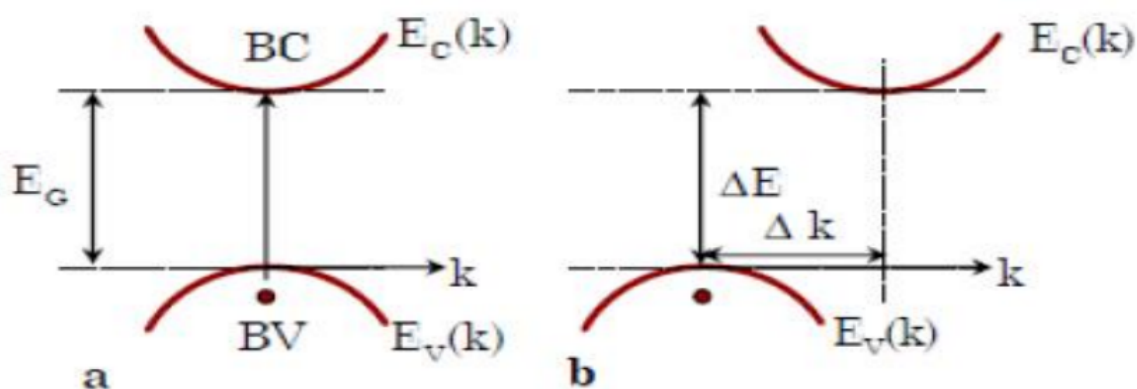


FIGURE 1.2 : Diagramme des bandes d'énergie des semi conducteurs.

La distance entre la bande de valence et la bande de conduction est l'écart d'énergie, qui est la longueur de la bande ou écart interdit noté  $E_g$ , pour les grands isolants  $E_g$ , les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction. La différence entre les semiconducteurs à gap direct et indirect est très importante, en particulier, dans les processus d'absorption ou d'émission, les processus radiatifs sont plus importants dans les semiconducteurs à gap direct que dans les semiconducteurs à gap indirect. Gap semiconducteur lorsque le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction existent à une valeur proche du vecteur d'onde  $k$  dans le diagramme  $E(k)$  Inversement, on parle de gap semiconducteur indirect lorsque le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction existent Aux valeurs caractéristiques du vecteur d'onde  $k$  sur le diagramme  $E(k)$ .



a) Semi-conducteur à gap direct.      b) Semi-conducteur à gap indirect.

FIGURE 1.3 : Diagramme des bandes d'énergie des semi conducteurs.

## 1.5 Différentes types des semiconducteurs

### 1.5.1 Semiconducteur intrinsèque

Un semiconducteur est dit intrinsèque lorsqu'il ne présente ni défaut physique ni défaut chimique. Sa structure n'a pas de lacunes, pas de dislocation. et aucune impureté dans le réseau. En pratique, il reste toujours un certain nombre de défauts ou d'impuretés, et le semi-conducteur intrinsèque représente en fait un état limite parfait. Les propriétés décrites dans ce paragraphe sont valables pour de vrais cristaux semiconducteurs non conducteurs de bonne qualité cristalline. En d'autres termes, un semi-conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés est très faible (moins d'une particule de  $10^{13}$  atomes d'un élément semiconducteur).

### 1.5.2 Semiconducteur extrinsèque

Un semi-conducteur est dit extrinsèque s'il contient un taux très élevé d'impuretés. Par rapport à un atome semi-conducteur intrinsèque (un atome contre  $10^5$  atomes pour un élément semiconducteur). Selon la nature des impuretés, il existe deux types de semiconducteurs : type n et type p.

#### 1.5.2.1 Les semiconducteurs extrinsèques dopés n

Dans un semi-conducteur externe de type n, la concentration des trous est considérablement négligeable devant celle des électrons :  $n \gg p$ . Les électrons sont appelés porteurs majoritaires et les trous sont appelés porteurs minoritaires. La présence de trous résulte de la transition des électrons de valence dans la bande de conduction, comme dans les semiconducteurs intrinsèques. Cependant, le potentiel de transition est fortement réduit en raison de la présence d'électrons donneurs. Par conséquent, la concentration de trous dans un semi-conducteur de type n sera toujours bien inférieure à celle correspondant à Semiconducteurs intrinsèques à la même température. Par exemple, pour un substrat de silicium dopé avec une concentration en atomes de phosphore  $nd = 10^{15} cm^{-3}$ , la concentration en électrons de conduction sera  $n = 10^{15} cm^{-3}$ , tandis que la concentration en trous sera  $p = 2 \cdot 10^5 cm^{-3}$ . Cette concentration est d'une part très faible par rapport à la concentration n, et d'autre part elle est négligeable par rapport à la concentration n dans des trous dans un semiconducteur intrinsèque, qui est  $p = 1,5 \cdot 10^{10} cm^{-3}$ . Considérons par exemple un semiconducteur tétravalent tel que Si ou Ge. Ils cristallisent en une structure où chaque atome est lié à quatre atomes voisins des liaisons covalentes. Introduisons un atome à cinq électrons de valence (phosphore, arsenic, antimoine ...). Prenez la place de l'atome de cristal. entre les électrons L'impureté

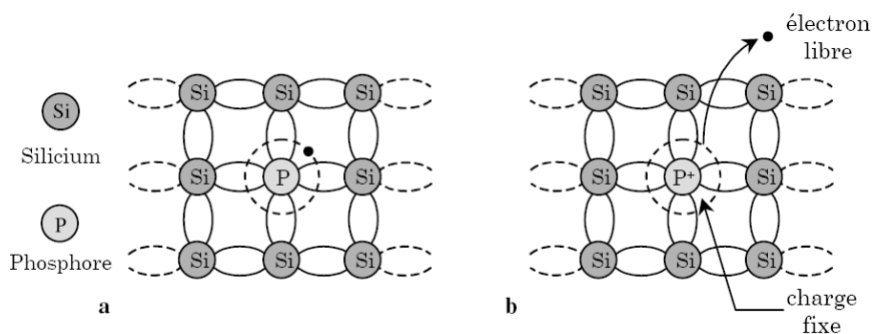


FIGURE 1.4 : Silicium dopé au Phosphore (dopage n) : a  $T = 0K$  et b  $T \neq 0k$

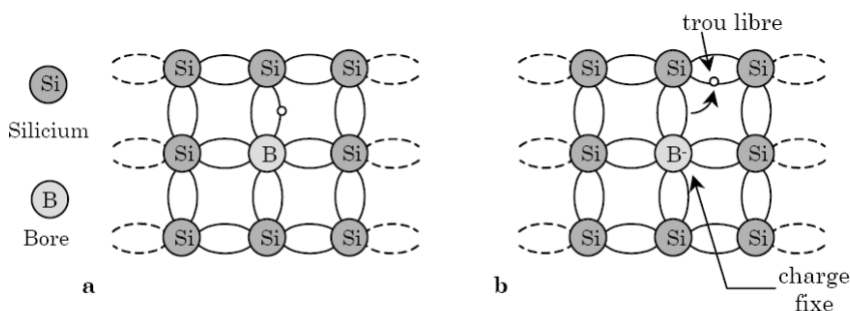


FIGURE 1.5 : Silicium dopé au Bore (dopage p) : a  $T = 0K$  et b  $T \neq 0K$

quatre partage le contact avec les voisins et la cinquième reste Célibataire. L'atome d'impureté est lié à un niveau d'énergie appelé niveau donneur C'est juste en dessous de la plage de livraison. Dans ce cas, il s'agit d'un semiconducteur On dit qu'il est de type n [4].

### 1.5.2.2 Les semiconducteurs extrinsèques dopés P

Dans les semiconducteurs de type p, la plupart des porteurs sont des trous et des porteurs La minorité sont les électrons de conduction :  $n \ll p$ . Si nous insérons un atome d'impureté avec trois électrons de valence (aluminium bore ou gallium). Cela ne peut satisfaire que trois liens. Donc une liaison par atome L'impureté est manquante et correspond au niveau d'énergie situé au-dessus de l'échelle Valence est appelée le niveau accepteur. On dit que c'est un semi-conducteur de type P [4].

## 1.6 Les semi-conducteurs par groupe

### 1) Groupe IV :

Les éléments du groupe IV sont uniques sur le tableau périodique en ce que l'enveloppe externe des atomes individuels est exactement à moitié pleine. Afin d'échanger quatre électrons de la coque externe avec un autre atome de Si, des cristaux structurés en

3D peuvent être produits sans orientation préférée. Il peut également combiner deux types différents de semi-conducteurs du groupe IV en un seul matériau composite sous forme de SiC (carbure de silicium). Le SiC est un matériau proche de la frontière entre les semi-conducteurs et les isolants avec une constante de réseau de 0,436 nm et une bande interdite d'énergie de 3,0 eV (413 nm), et les semi-conducteurs suivants sont des cristallins :

- ◆ semi-conducteurs élémentaires :
  
- ◆ Diamant (C)
  
- ◆ Silicium (Si)
  
- ◆ germanium (Ge)
  
- ◆ semi-conducteurs composites :
  
- ◆ Carbure de silicium (SiC)
  
- ◆ Silicium et Germanium (SiGe)

semi-conducteurs élémentaires :

## 2) Groupe III-V

Un semiconducteur III-V est un semiconducteur composé d'un ou Plusieurs éléments de la troisième colonne du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, gallium, indium, etc.), et un ou plusieurs éléments de la cinquième colonne (azote, phosphore, arsenic, antimoine, etc.). Les semiconducteurs III-V présentent un grand intérêt car ils de leurs biens :

- elle est forte ;
  
- avoir une conductivité thermique élevée ;
  
- point de fusion élevé ;
  
- Ils ont une bande interdite directe.

Ces matériaux sont principalement utilisés en microélectronique des circuits intégrés, Dans les dispositifs photovoltaïques et optoélectroniques tels que Diodes électroluminescentes (LED ou LED en anglais).

TABLEAU 1.1 : Quelques exemples des matériaux semiconducteurs III-V

<b>Alliages binaires</b>	<b>Alliages ternaires</b>	<b>Alliages quaternaires</b>
Phosphure de gallium (GaP)	Arséniure de gallium indium (InGaAs)	Arséniure-phosphure de gallium indium (InGaAsP)
Arséniure de de gallium (GaAs)	Phosphure de gallium indium (InGaP)	Arséniure-phosphure d'aluminium indium (AlInAsP)
Nitride d'indium (InN)	Arséniure-phosphure de gallium (GaAsP)	Arséniure-nitride de gallium-aluminium (AlGaAsN)
Phosphure d'indium (InP)	Nitride de gallium-indium (InGaN)	Arséniure-nitride de gallium-indium (InGaAsN)
Arséniure d'indium (InAs)	Arséniure-antimoniure d'indium (InAsSb)	Arséniure-nitride d'aluminium-indium (InAlAsN)
Antimoniure d'indium (InSb)	Antimoniure de gallium indium (InGaSb)	Arséniure-antimoniure nitride de gallium (GaAsSbN)

## 1.7 Conclusion

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

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.

## Bibliographie

- [1] E. Mooser, “Introduction à la physique des solides,” *Physique*, 1993.
- [2] M. BENTHAMEUR, *Etude des propriétés dynamiques du réseau et leurs dépendances en pression des semi-conducteurs binaires IV, III-V, II-VI*. PhD thesis, Université Mohamed BOUDIAF de M’Sila, 2016.
- [3] N. Keghouche and A. Aouina, “Role du rayonnement dans l’élaboration et l’étude de nanoagrégats semiconducteurs de zns,” 2017.
- [4] S. A. Ghefir, *Etude ab initio des propriétés structurales et électroniques des semi-conducteurs III-V à base de Phosphore (AlP, InP)*. PhD thesis.

# Chapitre 2

## La théorie des alliages semiconducteurs

### 2.1 introduction

Le mot alliage signifie un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux. à l'époque le mot alliage était réservé aux métaux seuls, mais cette définition Il est rapidement associé à d'autres matériaux, notamment les céramique et les polymères. un peu après avoir développé des techniques modernes de croissance et de purification des cristaux Dans les semiconducteurs, de nombreux alliages binaires, ternaires et quaternaires ont été produits. L'utilisation de ceux-ci dans les domaines de la microélectronique et de l'optoélectronique à encourager les chercheurs de développer le côté théorique et expérimental. Certains composés semiconducteurs sont des matériaux très intéressants pour leurs Propriétés électroniques (transport de charge) et optoélectroniques (écart direct). Ces caractéristiques varient, il faut jouer sur la structure électronique et ajuster la bande passante . ceci est réalisé en utilisant des alliages. champs de composition élargis les produits chimiques variables ceux ci sont des atouts pour réaliser des dispositifs conformes aux exigences. le Progrès réalisés dans divers domaines par les chimistes, physiciens et techniciens ont activement contribué à l'étude et à la fabrication de nouveaux matériaux parmi lesquels les alliages semiconducteurs .  $III - V$  et  $II - VI$ [1].

### 2.2 Les alliages semiconducteurs

Une mention spéciale est faite aux alliages semiconducteurs, compte tenu de leur application dans le domaine de l'optoélectronique. Ces alliages sont placés à partir de Composé binaire dont la composition varie en fait, ils peuvent être binaire, ternaire, Quaternaire selon qu'ils contiennent respectivement deux, trois ou quatre éléments .

## 2.3 Classification des alliages semi-conducteurs

Les alliages semiconducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant le nombre de constituants [2] :

- Alliage binaire de la forme  $A^N B^{8-N}$  :

$A^I B^{VII}$  : *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 phosphores, et les nitrures des éléments : Aluminium, Gallium, Indium et Bore (*GaAs, InSb, BN, AlAs, InP,*).

$A^{IV} B^{IV}$  : *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, Cu<sub>2</sub>O,* 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 :  $A^N B_X^{8-N} C_{1-X}^{8-N}$  .

- Alliage ternaire cationique :  $A_X^N B_{1-X}^N C^{8-N}$  .

- Ces alliages sont caractérisés par la présence du coefficient stoechiométrique x. Cependant, 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 est caractérisé par la présence de deux coefficients stoechiométriques x et y.

- Un intérêt particulier a été porté récemment aux alliages quaternaires principalement à cause de l'avantage qu'ils offrent de concevoir des dispositifs avec les propriétés physiques souhaitées. Ces alliages peuvent être divisés en deux classes [3, 4], :

- Les solutions quadratiques : ces alliages ont la forme  $A_{1-X}^N B_X^N C_Y^{8-N} D_{1-Y}^{8-N}$

- pour 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 cationique ‘

$A_X^N B_Y^N C_{1-X-Y}^{8-N} D_{8-N}$ .

- Les alliages quaternaires quadratiques ont été les premiers et les plus recherchés et étudiés, particulièrement  $Ga_x In_{1-x} As_Y P_{1-Y}$ ,  $Ga_{1-x} In_x As_Y Sb_{1-Y}$ . Néanmoins, les alliages triangulaires semblent devenir tous aussi importants.

- Les critères concernant l'accord des paramètres de maille ainsi que l'identité des structures cristallines des éléments binaires parents restent toujours valables dans le cas des alliages quaternaires.

## 2.4 L'approximation du cristal virtuel (VCA)

Différentes méthodes ont été appliquées pour l'étude optique et électronique des alliages semiconducteurs ( $III - V, II - VI, \dots$ ), ceci inclue les méthodes basées sur le modèle des liaisons fortes semi-empiriques [5], modèle semi-empirique pseudopotentiel [6] et le modèle self-consistant de l'approximation de la densité locale (L.D.A) [7], la C.P.A [8] et l'approche du cristal virtuel (VCA) [9] etc . Mais l'approche E.P.M combinée avec la V.C.A en tenant compte de l'effet du désordre reste le plus simple et offre des résultats compatible avec les données expérimentales [10, 11]. C'est cette approche que nous avons utilisée pour calculer la dépendance compositionnelle et le traitement du désordre chimique des alliages semiconducteurs.

### 2.4.1 Les alliages ternaires

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 potentielle atomique moyen. Cet alliage ternaire de la forme  $A_x B_{1-x} C$  est composé des molécules AC avec une fonction molaire  $x$  et des molécules BC avec une fonction molaire  $(1-x)$  [12].

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 [13]. La valeur moyenne  $F(x)$  de la propriété physique de l'alliage ternaire, peut être liée linéairement à la concentration stoechiométrique  $x$  par la relation suivante :

$$F(x)_{A_x B_{1-x} C} = xF_{AC} + (1 - x)F_{BC} \quad (2.1)$$

### 2.4.2 Le paramètre de maille des alliages ternaire

Le travail expérimental montre que la constante de réseau ternaire est en accord avec Loi de Vegard, sauf pour certains alliages où de très faibles écarts ont été observés. La constante de réseau "a" est la moyenne de composition linéaire pondérée des constantes de réseau des composés doubles (AC et BC) qui composent l'alliage. Paramètres de réseau déterminés par la loi de Vegard [13] :

$$a(x)_{A_x B_{1-x} C} = xa_{AC} + (1 - x)a_{BC} \quad (2.2)$$

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

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

$x$  est la concentration molaire.

## 2.5 Méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semiconducteurs

L'approche du pseudopotentiel est actuellement l'approche la plus largement utilisée pour la détermination des structures de bande électronique et d'autres propriétés telles que la bande interdite, la dépendance à la température et à la pression de la structure électronique, les propriétés chimiques etc [14].

### 2.5.1 La méthode de pseudo-potentiel (P.M)

La méthode de la pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies  $E_n(k)$  et d'autres propriétés des semi-conducteurs, le principal avantage de cette approche est que seuls les électrons de valence sont pris en compte [15].

Par conséquent, nous séparons les électrons de noyau et de valence. Ces derniers occupent les couches externes impliquées dans les liaisons chimiques, et les électrons du noyau sont situés dans les couches internes les plus proches du noyau et sont extrêmement insensibles à l'environnement chimique de l'atome.

L'avantage de cette méthode est que seuls les électrons de valence seront pris en compte. On suppose que les électrons du coeur sont "gelés" et que seuls les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électronique. transactions utilisées dans O.P.W. Pour s'assurer que l'onde plane est orthogonale aux états du coeur, on peut l'utiliser pour construire un potentiel orthogonal. Cette tension est répulsive car son effet est de repousser les électrons de valence loin du noyau. Et en annulant, nous obtenons une faible probabilité. Cette dernière peut être traitée par la méthode des électrons quasi libres (N.F.E.M) ou toute autre méthode standard de résolution de l'équation de Schrödinger [16].

### 2.5.2 Le formalisme mathématique du pseudo-potentiel

Comme dans la méthode O.P.W, la fonction  $\psi$  est donnée par la somme des ondes planes  $\phi_k^v$  et des états atomiques occupés du coeur  $\phi_k^c$

$$\psi_k = \phi_k^v + \sum_c b_c \phi_k^c \quad (2.3)$$

Sachant que  $\psi_k$  est orthogonale aux états du coeur  $\phi^c$  alors :

$$\langle \phi_k^c / \psi_k \rangle = 0 \quad (2.4)$$

$$\Rightarrow \psi_k = \phi_k^v - \sum_c \langle \phi_k^c / \phi_k^v \rangle \phi_k^c \quad (2.5)$$

En plus  $\psi_k$  vérifie l'équation de Schrödinger

$$H\psi_k = E_k\psi_k \quad (2.6)$$

alors on peut écrire :

$$H\phi_k^v H \langle \phi_k^c / \psi_k \rangle = E_k\psi_k \quad (2.7)$$

Sachant, en plus, que  $\phi_k^c$  vérifie aussi l'équation de Schrödinger

$$H\phi_k^c = E_k^c\phi_k^c \quad (2.8)$$

alors l'équation (2-6) devient comme suit :

$$E_k\psi_k = H\phi_k^v - E_k^c \sum_c \langle \phi_k^c / \phi_k^v \rangle \phi_k^c \quad (2.9)$$

$$H\phi_k^v + \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \phi_k^c / \phi_k^v \rangle \phi_k^c = E_k\phi_k^v \quad (2.10)$$

D'où l'on peut déduire la formule suivante

Avec :

$$\sum_c (E_k - E_k^c) \langle \phi_k^c / \phi_k^v \rangle \phi_k^c = V_R\phi_k^v \quad (2.11)$$

Alors l'équation (1-10) s'écrit comme suit :

$$H\phi_k^v + V_R\phi_k^v = E_k\phi_k^v \quad (2.12)$$

$$(H + V_R)\phi_k^v = E_k\phi_k^v \quad (2.13)$$

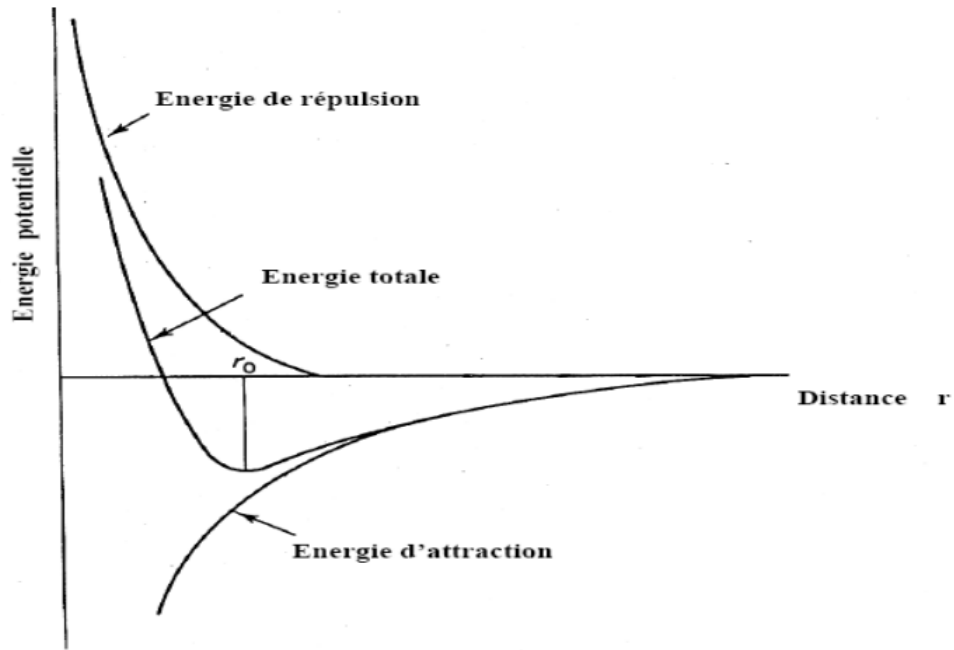


FIGURE 2.1 : Le potentiel d'interaction entre deux atomes en fonction de la distance  $r$

$$[(P^2/2m) + V_R]\phi_k^v = E_k\phi_k^v \quad (2.14)$$

Avec  $V_P = V_C + V_R$  qui est le pseudo-potentiel considéré comme faible. Ou  $V_C$  représentant le potentiel attractif du coeur (-) et  $V_R$  représentant le potentiel répulsif (+) Pour la résolution de l'équation de Schrödinger, on va considérer le pseudo-potentiel comme perturbation [13].

### 2.5.3 La méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M)

La méthode empirique du pseudo-potentiel (E.P.M) Il n'est pas très utilisé pour étudier tous les métaux mais a été appliqué avec succès à des dizaines de semi-conducteurs d'un mélange de diamant et de zinc. La première application réussie est le Germanium et Silicium.

est utilisé pour définir les paramètres qui entrent dans le calcul de la structure de bande électronique, à partir de données expérimentales [15]

l'E.P.M a deux approximations importantes :

- L'approximation empirique locale.
- L'approximation empirique non locale [13].

#### 2.5.3.1 L'approximation empirique locale

Dans cette technique, la structure de bande est calculée en utilisant uniquement Quelques termes de  $V(G)$  obtenus par modifications théoriques des observations faites de cristaux réfléchissants et absorbants.

L'E.P.M résout le problème de réglage des facteurs de forme expérimentaux  $V(G)$  à partir du pseudo  $V_p(r)$  que nous imaginons est une superposition linéaire de Le potentiel pseudo-atomique et peut s'écrire comme suit :

$$V_p(r) = \sum_{R,\tau} V_q(r - R - \tau) \quad (2.15)$$

$R$  : est un vecteur du réseau direct.

$\tau$  :est le vecteur de translation du réseau direct.

Si on étend le potentiel dans le réseau réciproque, il aura la forme suivant :

$$V_p(r) = \sum_G S(G) V_q(G) \exp(iG, r) \quad (2.16)$$

$V_q(G)$  : est le facteur de forme

$S(G)$  :est le facteur de structure donné par

$$S(G) = (1/N_a) \sum_r \exp(-iGr) \quad (2.17)$$

$N_a$  : étant le nombre d'atomes de base.

Le pseudo fonction d'onde  $\phi_{n,k}(r)$  et les énergies  $E_n(k)$  seront les solutions de l'équation :

$$[(P^2/2m) + V_p(r)]\psi_{n,k}(r) = E_n(k)\psi_{n,k}(r) \quad (2.18)$$

Où  $n$  représente l'indice de la bande.  $\psi_{n,k}(r)$  sont des fonctions de Blokh et peuvent être étendues à une série d'ondes planes.

La technique des faux potentiels est utilisée en pratique, car elle l'exige un nombre réduit de facteurs de forme pour tenir compte de la structure de bande électronique.

La chose la plus importante dans ce calcul est la connaissance des facteurs de forme et des facteurs de structure[13].

-La méthode de calcul de l'EPM comme indiqué dans le schéma suivant est : le sélection de  $V(G)$ , la structure est incluse par le facteur de structure et l'équation de Schrödinger est résolue pour les valeurs propres  $E(k)$  de l'énergie et les pseudo-fonctions d'ondes  $\psi_{n,k}(r)$ .

-Ces énergies sont comparées à l'expérience et  $V(G)$  est modifiée si aucun bon accord n'est obtenu entre l'expérience et la théorie. Le processus est répété jusqu'à ce qu'un bon accord soit obtenu entre l'expérience et la théorie. En plus de l'E.P.M qui est la méthode de calcul la plus utilisée dans le calcul de la bande électro-noyau, d'autres variétés de la méthode pseudo-potential ont été développées. Ce sont notamment la méthode Self-consistante et Ab initio.

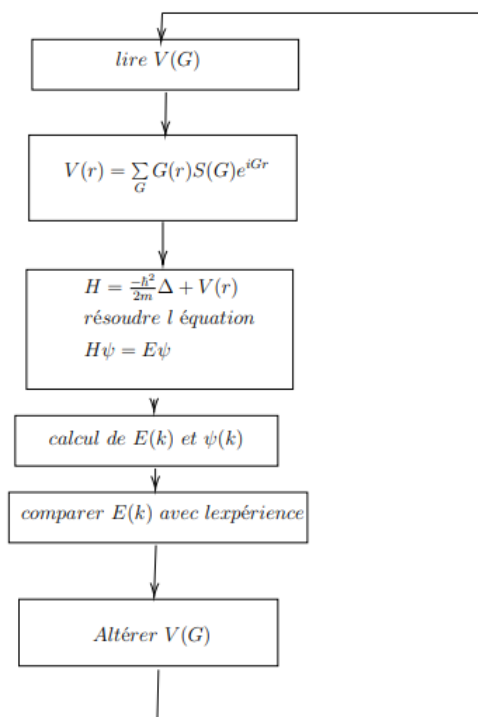


FIGURE 2.2 : algorithme du calcul de l'E.P.M

## 2.6 Conclusion

Dans le deuxième chapitre, nous avons introduit la théorie des alliages semiconducteurs et la méthode de calcul de la structure de bande d'énergie de ces matériaux. Les alliages sont considérés comme des matériaux semiconducteurs l'importance de ces matériaux, réside dans la modification et au contrôle de ses propriétés physiques qui varient selon la composition, permettant d'obtenir un noyau l'optoélectronique avec des propriétés souhaitables. l'approche du pseudopotentiel est actuellement l'approche le plus largement utilisée pour déterminer les structures de bandes électroniques et d'autres propriétés telles que la bande interdite.

le choix de la méthode des pseudopotentiels empirique l'EPM est basé sur le fait d'obtenir les états de valence sans calculer pour autant les états du coeur qui ne sont pas nécessaires pour la description de propriétés physiques d'un système .LES états réels sont décrits par des pseudos fonctions d'ondes ayant une représentation dans l'espace de Fourier par un nombre limité d'ondes planes minimisant ainsi les calculs numériques,

## Bibliographie

- [1] N. Kechouche and A. Aouina, “Role du rayonnement dans l’élaboration et l’étude de nanoagrégats semiconducteurs de zns,” 2017.
- [2] P. Kiréev, “La physique des semiconducteurs. 2e édition, édition mir,” 1975.
- [3] F. Aymerich, “Pseudopotential band structure of al 1- x- y ga x in y as,” *Physical Review B*, vol. 26, no. 4, p. 1968, 1982.
- [4] S. Abdelhadi and H. ABID, *Etude des propriétés Structurales, Electroniques, Optiques et Thermoélectriques des composés binaires II-VI, ZnSe, MgSe et leur alliage ternaire Zn1-xMgxSe par la méthode Fp-LMTO*. PhD thesis, 2022.
- [5] M. Jaros, “Electronic properties of semiconductor alloy systems,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 48, no. 8, p. 1091, 1985.
- [6] T. Ito, “Recent progress in computer-aided materials design for compound semiconductors,” *Journal of applied physics*, vol. 77, no. 10, pp. 4845–4886, 1995.
- [7] J. E. Bernard and A. Zunger, “Electronic structure of zns, znse, znte, and their pseudobinary alloys,” *Physical Review B*, vol. 36, no. 6, p. 3199, 1987.
- [8] A. Voloshinskii, N. Ryzhanova, L. Y. Vishnekov, and A. Obukhov, “Off-diagonal conductivity and magnetization of pdfc, pdco, and pdni alloys in coherent potential approximation calculated on the basis of realistic models of component densities of states,” *physica status solidi (b)*, vol. 133, no. 2, pp. 735–743, 1986.
- [9] S. J. Lee, T. S. Kwon, K. Nahm, and C. K. Kim, “Band structure of ternary compound semiconductors beyond the virtual crystal approximation,” *Journal of Physics : Condensed Matter*, vol. 2, no. 14, p. 3253, 1990.
- [10] N. Bouarissa, N. Amrane, and H. Aourag, “Electronic structure of pseudobinary semiconductor alloys inxga1- x and inasxsb1- x,” *Infrared physics & technology*, vol. 36, no. 4, pp. 755–761, 1995.
- [11] N. Bouarissa and H. Aourag, “Band structure calculations of inxga1- xsb under pressure,” *Infrared physics & technology*, vol. 36, no. 6, pp. 973–980, 1995.
- [12] F. MEZRAG, *Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteurs*. PhD thesis, Université Mohamed Khider-Biskra, 2012.
- [13] F. Z. Refice, *Etude théorique des propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs*. PhD thesis, Université Mohamed Boudiaf, M’sila, 2016.

- [14] S. A. Ghafir, *Etude ab initio des propriétés structurales et électroniques des semi-conducteurs III-V à base de Phosphore (AlP, InP)*. PhD thesis.
- [15] M. LABIDI, *Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires*. PhD thesis, BADJI MOKHTAR UNIVERSITY, 2011.
- [16] A. Chovet and P. Masson, “Physique des semi-conducteurs,” *Ecole Polytechnique–université de Marseille*, 2004.

# Chapitre 3

## Les propriétés Physiques de semiconducteurs

### 3.1 Introduction

Les matériaux semi-conducteurs ont une très large gamme d'applications, ils sont Actuellement utilisé dans de nombreux composants électroniques très importants. Le développement de nouveaux dispositifs électroniques et optoélectroniques nécessite une Connaissance approfondie des propriétés des matériaux utilisés, pour bien évaluer leur domaine application. Dans ce chapitre, nous présenterons quelques propriétés physiques des matériaux Les semiconducteurs ont des propriétés électroniques, optiques et diélectriques.

### 3.2 Les propriétés optiques

La matière est composée d'atomes, souvent maintenus ensemble par des molécules. l'interaction entre la matière et l'onde électromagnétique incidente implique l'excitation des nuages d'électrons des atomes. Une description précise de l'interaction entre le champ électromagnétique et les atomes ou les molécules nécessite le formalisme de la mécanique quantique [1].

Un photon peut faire sauter un électron d'un état occupé d'une bande valence vers un état non occupé de la bande de conduction , c'est l'absorption primaire. ce sera utilisé dans les capteurs de rayonnement.

l'électron dans la bande de conduction peut revenir automatiquement à l'état de la bande de valence avec émission de photons, c'est l'émission spontanée. Ce processus sera utilisé dans les émetteurs de rayonnement tels que diodes électroluminescentes.

Un photon dans un semiconducteur peut induire un transport d'électrons de la bande

de conduction à un état vide de la bande de valence, avec émission d'un photon de même énergie il s'agit d'une émission stimulée. Ce processus sera mis à jour gain dans un laser à semi-conducteur [2].

### 3.2.1 L'indice de réfraction

Plusieurs méthodes ont été envisagées pour relier la bande interdite d'un semi-conducteur à l'indice de réfraction. L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures photovoltaïques telles que les diodes laser à hétérojonction, Amplificateurs optiques et fibres optiques etc[2].

#### 3.2.1.1 Modèle de Moss

Il a été le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction  $n$  et l'écart d'énergie basée sur le modèle atomique[3].

$$n^4 E_g = k \quad (3.1)$$

$E_g$  : est le gap d'énergie,  $k$  : est une constante égale à 108 eV.

#### 3.2.1.2 Modèle de Gupta et Ravindra

ont proposé une relation linéaire entre  $n$  et  $E_g$  donnée par[4].

$$n = 4.084 - 0.62 E_g \quad (3.2)$$

#### 3.2.1.3 Modèle de Hervé et Vandamme

[5]

$$n = [1 + (13,6/E_g + 3,4)^2]^{1/2} \quad (3.3)$$

#### 3.2.1.4 Modèle de Reddy et Anjaneyulu

[6]

$$E_g e^n = 36,3 \quad (3.4)$$

### 3.2.1.5 Modèle de Ravindra

[7]

$$n = 4,16 - 0,85E_g \quad (3.5)$$

### 3.2.1.6 Modèle de Reddy et Ahammed

[8]

$$n^4(E_g - 0,365) = 154 \quad (3.6)$$

## 3.3 Les propriétés diélectriques

Les constantes diélectriques montrent la relation entre la polarisation diélectrique et champ macroscopique induit dans la matière. Contribuer à la polarisation électronique, ionique et dipôle. la contribution électronique provient du déplacement des couches électroniques par rapport au noyau. la partie ionique résulte du déplacement d'un ion chargé par rapport aux autres ions. là La polarisabilité dipolaire provient des moments dipolaires électrique permanents dans molécules. dans le domaine des fréquences optiques, la constante diélectrique provient Polarisation pratiquement électronique. pour tous les modèles, relations 2 (1,2,3,4,5,6) on considère que la constante diélectrique à haute fréquence est donnée par :

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (3.7)$$

$n$  :indice de réfraction.

### 3.3.1 La constante diélectriques

La constante diélectrique, également appelée permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Notez la permittivité électrique  $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$  avec  $\epsilon_r$  la permittivité électrique relative et  $\epsilon_0$  permittivité électrique du vide. La constante diélectrique intervient dans de nombreux domaines, notamment, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétiques, en particulier en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière.

En d'autres termes, les excitations propres de la matière sont décrites par la fonction isolateur  $\epsilon(\omega, \vec{k})$ , cette fonction dépend principalement de la fréquence et du vecteur d'onde  $\vec{k}$ . Pour de petites valeurs de  $\vec{k}$ , cette fonction sera simplement fonction de la fréquence, et on parlera alors de constante diélectrique correspondant à l'équilibre thermodyna-

TABLEAU 3.1 : La constante diélectrique statique et optique de quelques matériaux semi conducteurs

Matériau	Constante diélectrique statique	Constante diélectrique optique
GaP	10,7	8,5
GaAs	12,9	10,9
InP	12,4	9,6
InAs	14,9	12,3

mique, la constante diélectrique  $\epsilon(\infty)$  correspondant à sa limite pour les fréquences supérieures. Aussi appelée constante diélectrique optique. La fonction diélectrique peut être exprimée sous la forme complexe [9] :

$$\epsilon(w) = \epsilon'(w) + \epsilon''(w) \quad (3.8)$$

La partie imaginaire  $\epsilon''(w)$  traduit l'absorption du matériau tandis que la partie réelle  $\epsilon'(w)$  est liée à la polarisation du milieu.

Le tableau suivant présente des valeurs expérimentales de  $\epsilon_0$  et  $\epsilon(\infty)$  pour quelques matériaux [1]

### 3.3.1.1 La relation entre l'indice de réfraction et la constante diélectrique

Dans le cas d'un milieu isotrope ou un cristal cubique,  $\epsilon$  se réduit à un scalaire. La réponse d'un système à une onde électromagnétique plane peut être décrite par l'indice de réfraction complexe :

$$N(w) = n(w) + ik(w) = \sqrt{\epsilon(w)} \quad (3.9)$$

la partie réelle de  $N(w)$  correspond à l'indice naturel du cristal dans une zone de transparence, tandis que la partie imaginaire de  $ik(w)$  correspond à l'absorption optique de cristal ( $k$  appelé coefficient d'absorption ou coefficient d'extinction). la constante diélectrique sera déduite de la relation (3-8) et finalement on l'obtient sous sa forme

complexe [10] :

$$\epsilon(w) = \epsilon_1 + \epsilon_2(w) \quad (3.10)$$

$$\epsilon_1(w) = n^2 - k^2 \quad (3.11)$$

$$\epsilon_2 = 2nk \quad (3.12)$$

Si on simplifiant par  $k=0$  on trouve que :

$$n = \sqrt{\epsilon_1} \quad (3.13)$$

On peut dire que  $n$  et  $k$  sont liés par des relations de dispersion, et la connaissance de l'un dans tout le domaine fréquentiel permet de définir l'autre

### 3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé quelques propriétés générales des matériaux Semiconducteurs. La connaissance de ces propriétés est d'un intérêt fondamental pour déterminer les structures électroniques et atomiques des semiconducteurs et par la suite envahie le domaine d'application de ces semiconducteurs .

## Bibliographie

- [1] C. Kittel, “Physique de l’état solide, 5ieme édition,” *Dunod Université*, 1983.
- [2] L. BENSEFA, *Effet du désordre compositionnel sur les propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires semiconducteurs InPXSb1-X*. PhD thesis, Université Mohamed BOUDIAF de M’Sila, 2018.
- [3] R. Parmenter, “Energy levels of a disordered alloy,” *Physical Review*, vol. 97, no. 3, p. 587, 1955.
- [4] J. E. Bernard and A. Zunger, “Electronic structure of zns, znse, znTe, and their pseudobinary alloys,” *Physical Review B*, vol. 36, no. 6, p. 3199, 1987.
- [5] L. Vegard, “Die konstitution der mischkristalle und die raumfüllung der atome,” *Zeitschrift fur Physik*, vol. 5, no. 1, pp. 17–26, 1921.
- [6] S. Adachi, “Band gaps and refractive indices of algaassb, gainassb, and inpassb : Key properties for a variety of the 2–4- $\mu\text{m}$  optoelectronic device applications,” *Journal of applied physics*, vol. 61, no. 10, pp. 4869–4876, 1987.
- [7] A.-B. Chen and A. Sher, “Coherent-potential-approximation calculation of the valence bands of the quaternary alloy in  $x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ,” *Physical Review B*, vol. 19, no. 6, p. 3057, 1979.
- [8] I. Vurgaftman, J. Meyer, and L. Ram-Mohan, “Applied physics review,” *J. Appl. Phys*, vol. 89, p. 5815, 2001.
- [9] M. L. Cohen and T. Bergstresser, “Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures,” *Physical Review*, vol. 141, no. 2, p. 789, 1966.
- [10] M. LABIDI, *Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires*. PhD thesis, BADJI MOKHTAR UNIVERSITY, 2011.

# Chapitre 4

## Résultats et discussion

### 4.1 Introduction

Récemment, les chercheurs se sont intéressés de nouveau aux matériaux semiconducteurs II-VI, vu leurs larges utilisations dans la fabrication des dispositifs optoélectroniques ainsi que le processus de fabrication des cellules solaires [1, 2]

En raison de la dépendance des propriétés des alliages ternaires avec la composition, les alliages  $Zn_xCd_{1-x}S$  ont attiré beaucoup plus d'attention dans les domaines des dispositifs optoélectroniques et des cellules solaires photoélectrochimiques, grâce à leur large bande interdite et leur bonne stabilité tout en respectant l'environnement [3, 4]. Les alliages ternaires  $Zn_xCd_{1-x}S$  offrent des propriétés intermédiaires entre ceux des composés binaires, ces propriétés peuvent être améliorées par l'emploi des quaternaires  $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$  qui ajoutent un degré de liberté au gap énergétique couvrant ainsi la bande spectrale avec le réglage double de la concentration en x et en y.

### 4.2 Propriétés électroniques

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode du pseudopotentiel empirique dans laquelle le potentiel du cristal est une superposition linéaire des potentiels atomiques, qui sont modifiés afin de reproduire le gap énergétique expérimental aux points choisis de la zone de Brillouin.

La nature empirique de la méthode du pseudopotentiel consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques [5]. Ces facteurs de forme, initialement pris de la théorie, sont ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [5, 6]. dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée, de

l'écart des niveaux d'énergie définit par :

$$\delta = \left[ \frac{\sum_{ij} (\Delta E_{ij}^2)}{m - n} \right]^{1/2} \quad (4.1)$$

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{exp} - E_{ij}^{cal} \quad (4.2)$$

$E_{ij}^{exp}$  et  $E_{ij}^{cal}$  sont respectivement, les énergies observées et calculées entre l'état  $i$  avec  $k = k_i$  et l'état  $j$  avec  $k = k_j$ , de la même paire  $(i, j)$  et  $N$  est le nombre de paramètres du pseudopotentiel empirique. Les valeurs des facteurs de forme sont modifiées par itération jusqu'à minimiser le  $\delta$  [5, 7] Dans la méthode de la pseudopotentiel locale, ces facteurs de forme sont fonction de Point pris de la zone de Brillouin. Pour que les résultats semi empirique produisent des résultats fidèlement présentés Expérimentalement, l'interpolation quadratique a donné une priorité élevée pour obtenir la concordance étroite entre la bande de valence la plus élevée et la bande de valence la plus basse au point sélectionné.

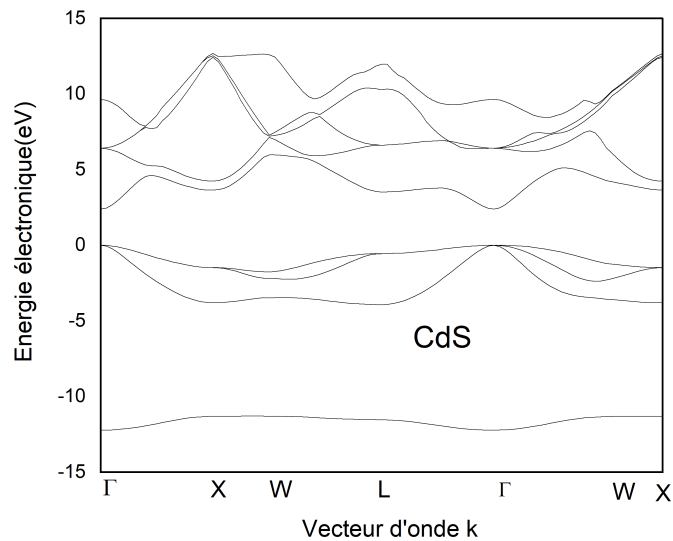


FIGURE 4.1 : .Structure de bande pour CdS

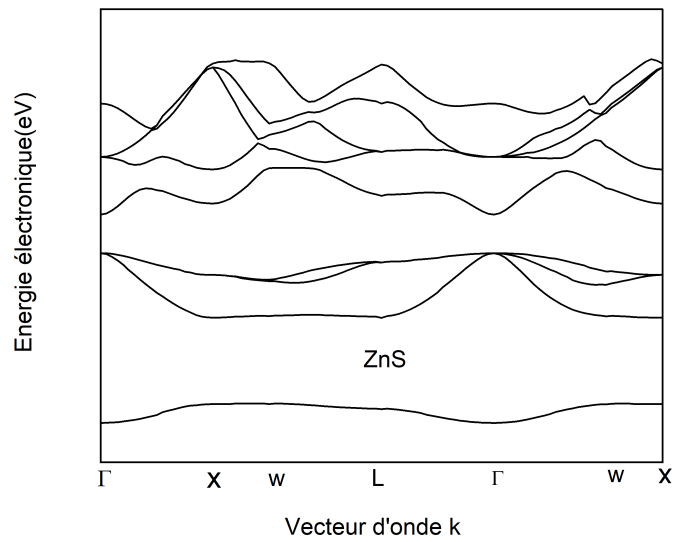


FIGURE 4.2 : Structure de bande pour ZnS.

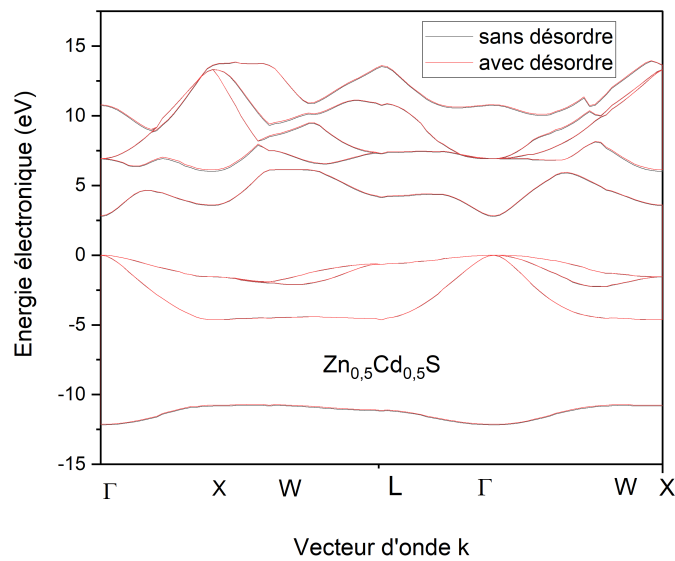


FIGURE 4.3 : Structure de bande pour  $Zn_{0,5}Cd_{0,5}S$

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Les bandes d'énergie se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction. Ce sont la bande de valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute, et la bande interdite qui les sépare déterminant principalement les propriétés de transport du semiconducteur .

L'analyse de ces structures de bandes a montré que les composés semiconducteurs  $ZnS, CdSe, Zn_{0,5}Cd_{0,5}S$  présentent un gap direct .

### 4.2.1 Les alliages ternaires $Zn_xCd_{1-x}S$

les facteurs de forme de pseudopotentiel symétriques et asymétriques ainsi que les paramètres de réseau des composés semiconducteurs binaires CdS et ZnS dans La phase du zinc blende sont indiqués dans le tableau (4-1).

TABLEAU 4.1 : Les paramètres pseudopotentiels du ZnS et CdS.

composé	VS(3)	VS(8)	VS(11)	VA(3)	VA(4)	VA(11)	Paramètre du réseau(Å)
CdS	- 0.23	0.01	0,06	0,134	0,096	0,019	11,0246
ZnS	-0,312939	0,021262	0,170554	0,030061	0,116	0,129269	10,2268

Le formalisme peut être facilement généralisé dans le cas d'un alliage, en utilisant la VCA dans lequel le potentiel atomique est remplacé par une pondération de ceux des différents composés parents. L'appel à cette méthode c'est que la structure électronique peut être calculée en résolvant une équation d'ondes de Schrödinger à un électron.

Pour les alliages ternaires  $Zn_xCd_{1-x}S$  étudié, l'Hamiltonien est décrit par Une composante due à au cristal virtuel et une autre composante où l'effet de perturbation est pris au compte comme une oscillation autour du cristal virtuel [8].

Le Paramètre du réseau de ces alliages est calculé selon la loi de Vegard [9].

$$a_{Zn_xCd_{1-x}S} = x \cdot a_{ZnS} + (1 - x) \cdot a_{CdS} \quad (4.3)$$

#### 4.2.1.1 Le gap énergétique

Les valeurs des gaps d'énergie du ZnS et CdS aux points de haute symétrie,  $\Gamma$  X et L obtenues par la procédure d'ajustement, sont illustrées sur le tableau (4-2)

TABLEAU 4.2 : Gaps d'énergie pour ZnS et CdS utilisés dans l'ajustement des facteurs de formes. (Les valeurs expérimentales sont données à température ambiante).

composé	$E_{\Gamma}^{\Gamma} (eV)$	$E_{\Gamma}^X (eV)$	$E_{\Gamma}^L (eV)$
CdS	2, 36 <sup>(a)</sup>	3, 64 <sup>(a)</sup>	3, 50 <sup>(a)</sup>
ZnS	3, 66 <sup>(b)</sup>	3, 698 <sup>(c)</sup>	4, 82 <sup>(d)</sup>

→ <sup>(a)</sup>Valeur expérimentale indiquée dans Réf [10]

→ (b) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [11]

→ (c) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [12]

→ (d) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [13]

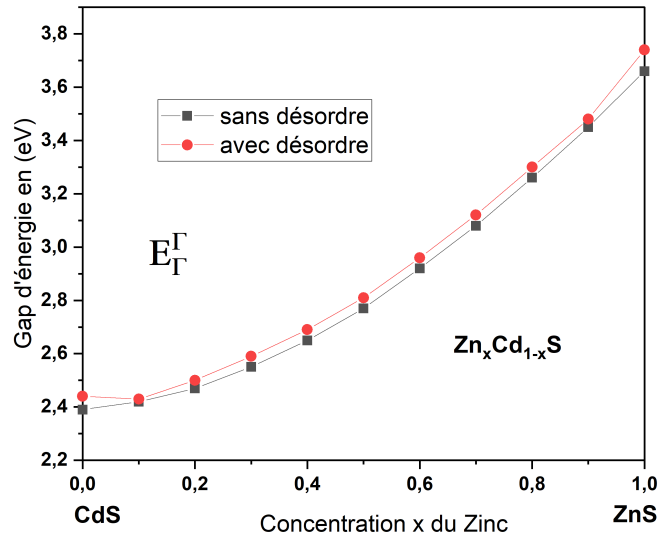


FIGURE 4.4 : Le gap énergétique direct ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) des alliages semiconducteurs  $Zn_xCd_{1-x}S$

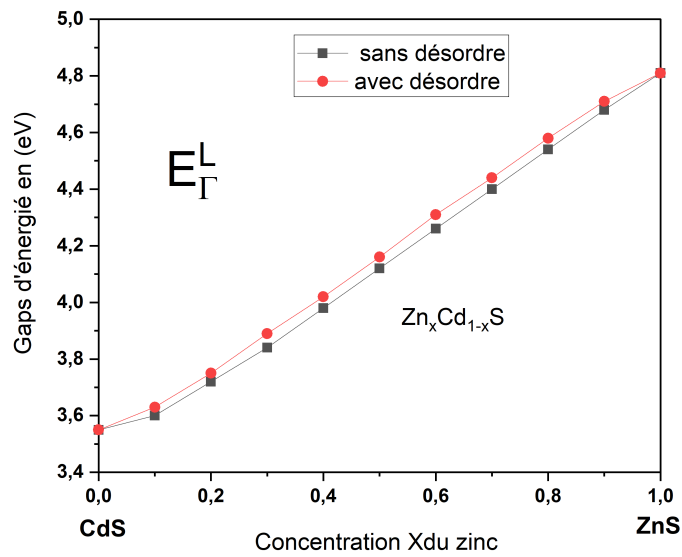


FIGURE 4.5 : Le gap énergétique indirect ( $\Gamma$ -  $L$ ) des alliages semiconducteurs  $Zn_xCd_{1-x}S$  .

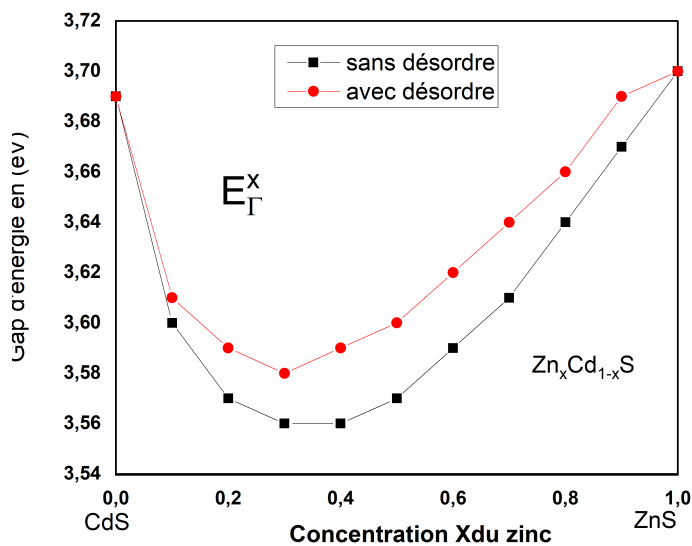


FIGURE 4.6 : Le gap énergétique indirect ( $\Gamma$ - X) des alliages semiconducteurs  $Zn_xCd_{1-x}S$ .

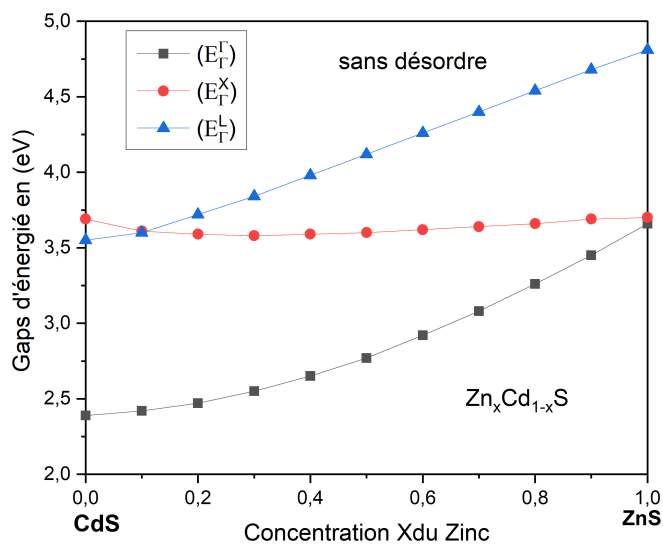


FIGURE 4.7 : La variation du gap direct ( $\Gamma$ -  $\Gamma$ ) et ceux des gaps indirects ( $\Gamma$ - X) et ( $\Gamma$ - L) en fonction de la concentration  $x$  en zinc de l'alliage semiconducteur  $Zn_xCd_{1-x}S$  (sans désordre) .

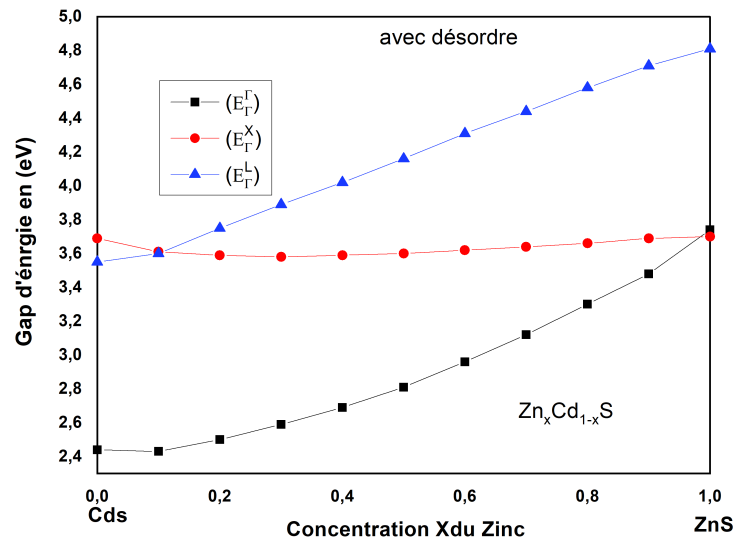


FIGURE 4.8 : La variation du gap direct ( $\Gamma$ -  $\Gamma$ )et ceux des gaps indirects ( $\Gamma$ - X)et ( $\Gamma$ - L) en fonction de la concentration x en zinc de l'alliage semiconducteur  $Zn_xCd_{1-x}S$  (avec désordre)

Le gap énergétique direct ( $\Gamma$ -  $\Gamma$ ) a été calculé en fonction de la concentration  $x$  en zinc, allant de 0 à 1, avec et sans désordre . Nos résultats sont présentés dans la Figure (4-1).

Nous observons que, en augmentant la concentration  $x$  en zinc de 0 à 1, le gap direct ( $\Gamma$ -  $\Gamma$ ) de l'alliage ternaire  $Zn_xCd_{1-x}S$  augmente de façon monotone de la valeur 2,39 eV (CdS) à la valeur 3,66 eV (ZnS). Pour voir la variation de gaps indirects( $\Gamma$ - X)et( $\Gamma$ -L)fonction de la concentration  $x$  du zinc est tracée sur la Figure( 4-3) Nous observons que les deux gaps indirects ( $\Gamma$ - X) et ( $\Gamma$ - L) diminuent de façon monotone avec l'augmentation de la concentration  $x$  du zinc. la courbe de la variation du gap direct  $E_g$  en fonction de la concentration en zinc est une interpolation quadratique , le paramètre optique du gap sera définit par la valeur  $b$  donné dans la relation ;

$$E_g(x) = (1 - x)E(0) + xE(1) + bx(1 - x) \quad (4.4)$$

En utilisant l'équation (IV-4) , les gaps direct et indirect en fonction de la concentration  $x$  en zinc dans le  $Zn_xCd_{1-x}S$  , sont exprimés par les relations analytiques suivantes :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = 2.39 + 0.25x + 1.02x^2 \quad (4.5)$$

$$E_{\Gamma}^x(x) = 3.69 - 0.49x + 0.5x^2 \quad (4.6)$$

$$E_{\Gamma}^L(x) = 3.55 + 1.02x + 0.24x^2 \quad (4.7)$$

Le comportement des gaps direct et indirect dans le  $Zn_xCd_{1-x}S$  n'affiche pas de transition de gap pour toute la gamme de variation de la composition . Ainsi, nous pouvons conclure que, le  $Zn_xCd_{1-x}S$  est un semiconducteur à gap direct pour toutes les concentrations  $x$  du zinc, variant de 0 à 1.

Ceci est cohérent avec le fait que les deux composés parents du  $Zn_xCd_{1-x}S$  sont des matériaux à gap direct.

### 4.3 Les propriétés optiques (Indice de réfraction)

L'indice de réfraction ( $n$ ) des semiconducteurs est un paramètre physique très important lié aux interactions atomiques microscopiques, il est souvent relié à l'énergie de gap.

Plusieurs approches ont été envisagées pour corrélérer le gap énergétique des semi-

conducteurs à leur indice de réfraction.

La corrélation entre  $n$  et  $E_g$  à des répercussions importantes sur la structure de bande des semi-conducteurs, il serait utile de trouver une valeur acceptable de  $n$  d'un matériau quelconque à partir de cette relation.

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques, les fibres optiques.

En utilisant les six modèles 3(1,2,3,4,5,6), nous avons calculé l'indice de réfraction des alliages semiconducteurs  $Zn_xCd_{1-x}S$  à partir des valeurs de leurs gaps d'énergie qui sont représentés dans le tableau (4-3) .

TABLEAU 4.3 : Calcul des indices de réfraction de l'alliage  $Zn_xCd_{1-x}S$  en fonction de la composition  $x$  du Zinc.

composition	n calculé à partir						Valeur théorique
	Moss	Gupta et Ravindra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Ravindra Ravindra	Reddy et Ahammed	
0	2,59273	2,6022	2,55289	2,72052	2,1285	2,95307	
0,1	2,58465	2,5836	2,54175	2,70805	2,103	2,94223	
0,2	2,57147	2,5526	2,52346	2,6876	2,0605	2,9246	
0,3	2,55106	2,5030	2,49489	2,65572	1,9925	2,89746	
0,4	2,52665	2,441	2,46033	2,61726	1,9075	2,86522	
0,5	2,49883	2,3666	2,42045	2,57297	1,8055	2,82879	
0,6	2,46610	2,2736	2,3729	2,50223	1,678	2,78633	
0,7	2,43343	2,1744	2,32483	2,46689	1,542	2,74434	
0,8	2,39912	2,0628	2,27375	2,41009	1,389	2,70065	
0,9	2,36538	1,945	2,22302	2,35344	1,2275	2,65807	
1	2,33070	1,8148	2,17044	2,29435	1,049	2,61467	2,25 <sup>(a)</sup>

Pour faire une comparaison, nous avons présenté également des données théoriques. Notant que pour le ZnS, l'accord entre nos résultats et les données théoriques, sont mieux de 15, 11%,14, 66%, 12, 88%,20, 00%,6, 66% et 30, 66% lors de l'utilisation des relations Moss,Gupta et Ravindra,Hervé et Vandamme ,Reddy et Anjaneyulu, Ravindra et Reddy et Ahammed, respectivement.

Il résulte de ces comparaisons que, le meilleur accord entre nos résultats et les données théoriques est atteint lorsque la relation Ravindra est utilisée. Ainsi, ce modèle a été appliqué dans tout ce qui suit pour le calcul des constantes diélectriques.

En raison du manque de données dans la littérature de l'indice de réfraction  $n$  du  $Zn_xCd_{1-x}S$  pour l'intervalle de composition  $x$  entre 0 et 1, les présents résultats seront donc comme des prédictions.La dépendance de  $n$  de la concentration  $x$  du zinc est montré dans la Figure (4-6),pour les six modèles envisagés .

La même tendance est observée pour tous les modèles utilisés, l'augmentation de la concentration  $x$  du zinc entraîne une diminution monotone de  $n$  .

Toutefois, le taux de diminution semble être dépendant du modèle utilisé. Étant donné

que  $n$  est fortement liée à  $E^g$  qui augmente avec l'augmentation de la fraction molaire  $x$  du zinc (voir Figure 4-1), et que  $n$  diminue avec  $x$  (voir Figure 4-6), nous pouvons conclure que, dans les alliages  $Zn_xCd_{1-x}S$ , le matériau qui a le plus petit gap  $E_g$  a la plus grande valeur de  $n$ .

Ce comportement se trouve être généralement commun dans la plupart des alliages semi-conducteurs III-V et II-VI [6-34 ,35].

## 4.4 Les propriétés diélectriques

### 4.4.1 La constante diélectriques de haute fréquence

( $\epsilon_\infty$ ) Basé sur les valeurs calculées de  $n$  obtenu à partir de la relation Ravindra  $n$  (qui a été choisie par rapport aux autres modèles tel que mentionné ci-dessus), la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_\infty$  a été calculée pour différentes concentrations  $x$  du zinc dans l'intervalle 0-1 à l'aide de la relation suivante :

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (4.8)$$

Nos résultats sont illustrées dans le tableau (4-7). Aucune donnée n'est disponible pour  $\epsilon_\infty$  du  $Zn_xCd_{1-x}S$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) et donc nos résultats sont des prévisions et peuvent servir comme référence pour les travaux futurs. La Figure (4-8) affiche l'évolution de la fonction de la concentration du zinc pour  $Zn_xCd_{1-x}S$ .

Remarquant, qu'en augmentant la concentration du zinc,  $\epsilon_\infty$  décroît linéairement. Ce n'est pas surprenant puisque selon l'équation (4-21), on peut s'attendre à un comportement de  $\epsilon_\infty$  qualitativement semblable à celui de  $n$ .

### 4.4.2 La constante diélectrique statique $\epsilon_0$

Dans ce présent travail, les calculs ont été étendus pour inclure la constante diélectrique statique ( $\epsilon_0$ ). A cet égard,  $\epsilon_0$  a été obtenue en utilisant la relation qui s'établit entre  $\epsilon_0$  et  $\epsilon_\infty$  [37] comme suit Où  $V$  est donné par :

$$v = (\alpha_p^2(1 + 2\alpha_c^2)2)/(\alpha_c^4) \quad (4.9)$$

$\alpha_p$  est la polarité obtenue selon la définition de Vogl [38]

$$\alpha_p = -V_A(3)/V_S(3) \quad (4.10)$$

Dans l'équation ( IV-10)  $V_S(3)$  et  $V_A(3)$  sont les facteurs de forme pseudopotentiels symétriques et antisymétriques au point G (111) respectivement.  $\alpha_c$  est la covalence

définie comme :

$$\alpha_c = \sqrt{1 - \alpha_p^2} \alpha \quad (4.11)$$

Nos résultats en fonction des différentes concentrations  $x$  du zinc sont indiqués dans le tableau (IV-4).

TABLEAU 4.4 : Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence et de la constante diélectrique statique pour CdS, ZnS et  $Zn_xCd_{1-x}S$  ( $0 < x < 1$ ), comparées aux données théoriques.

Matériau	Constante diélectrique de haute fréquence $\epsilon_\infty$	Constante diélectrique statique $\epsilon_0$
CdS	4.53051	7.71785
$Zn_{0.1}Cd_{0.9}S$	4.42261	6.54432
$Zn_{0.2}Cd_{0.8}S$	4.2466	5.66172
$Zn_{0.3}Cd_{0.7}S$	3.97006	4.89202
$Zn_{0.4}Cd_{0.6}S$	3.63856	4.22148
$Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$	3.25983	3.61185
$Zn_{0.6}Cd_{0.4}S$	2.81568	3.01126
$Zn_{0.7}Cd_{0.3}S$	2.37776	2.47715
$Zn_{0.8}Cd_{0.2}S$	1.92932	1.97203
$Zn_{0.9}Cd_{0.1}S$	1.50676	1.52048
ZnS	1.10040	1.10181

La valeur citée dans cette référence pour la constante diélectrique statique, est celle de la constante diélectriques de haute fréquence.

L'accord entre la valeur calculée de  $\epsilon_0$  pour  $ZnS$  et celle indiquée dans Réf [33] est raisonnablement bon. Les autres valeurs de  $\epsilon_0$  calculées pour  $Zn_xCd_{1-x}S$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) sont données comme référence. La dépendance en concentration du zinc de  $\epsilon_0$  est tracée dans la Figure(4-10).

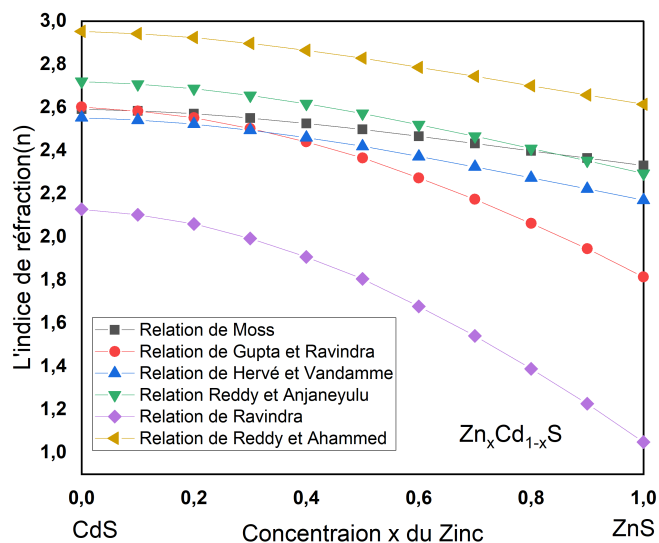


FIGURE 4.9 : .La variation de l'indice de réfraction n du  $Zn_xCd_{1-x}S$  en fonction de la concentration x du zinc pour les six modèles .

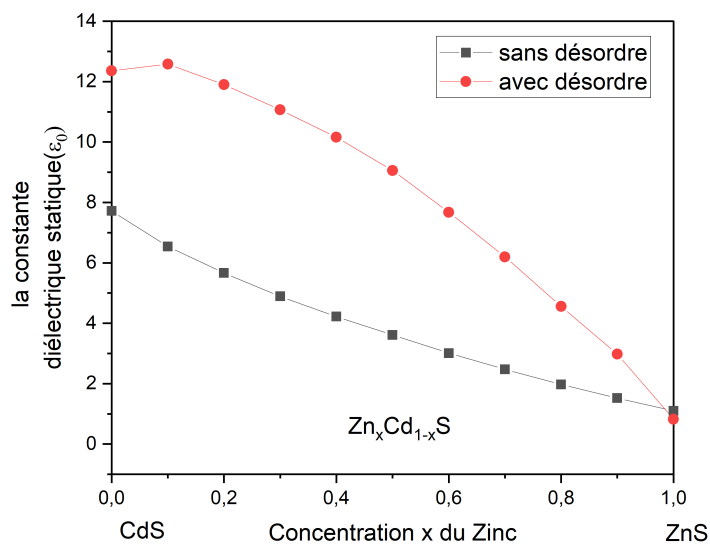


FIGURE 4.10 : la variation de la constante diélectrique de haute fréquence et de la constante diélectrique statique en fonction de la composition du zinc dans  $Zn_xCd_{1-x}S$ (sans désordre)

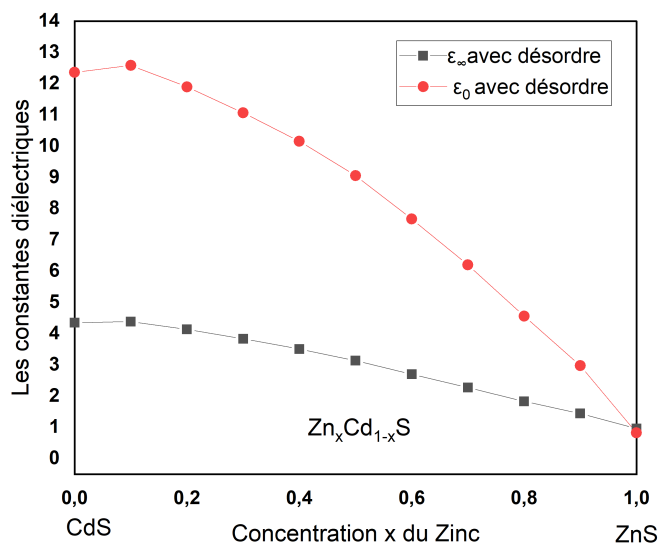


FIGURE 4.11 : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence et de la constante diélectrique statique en fonction de la composition du zinc dans  $Zn_xCd_{1-x}S$  (avec désordre).

Nous observons que  $\epsilon_0$  varie non linéairement avec  $x$  et suit le même comportement qualitatif que celui de  $\epsilon_\infty$ .

En conséquence, on peut conclure qu'en augmentant la concentration en zinc du  $Zn_xCd_{1-x}S$  en allant du CdS ( $x = 0$ ) à ZnS ( $x = 1$ ) la capacité de stocker de l'énergie électrique potentielle sous l'influence d'un champ électrique diminue.

## 4.5 Conclusion

En conclusion , la dépendance de la composition  $x$  des propriétés électroniques, optiques et diélectriques telles que, le gap énergétique, l'indice de réfraction et les constantes diélectriques statique et de haute fréquence, de l'alliage ternaire  $Zn_xCd_{1-x}S$  avec sous tenir compte de l'effet du désordre en fonction de la concentration du zinc ont été étudié .

Les calculs sont principalement effectués par l'emploi de la méthode du pseudopotentiel empirique EPM couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA où l'effet du désordre compositionnel est ajouté comme un potentiel effectif. Le  $Zn_xCd_{1-x}S$  est trouvé qu'il est un semiconducteur à gap direct pour toutes les concentrations  $x$  du zinc variant de 0 à 1.

L'indice de réfraction et les constantes diélectriques varient en fonction de la concentration

L'augmentation de la concentration  $x$  entraîne une augmentation de gap d'une manière non linéaire alors que l'indice de réfraction et les constantes diélectriques diminuent

## Bibliographie

- [1] T. Yamaguchi, Y. Yamamoto, T. Tanaka, and A. Yoshida, "Preparation and characterization of (cd, zn) s thin films by chemical bath deposition for photovoltaic devices," *Thin Solid Films*, vol. 343, pp. 516–519, 1999.
- [2] N. Deshpande, A. Sagade, Y. Gudage, C. Lokhande, and R. Sharma, "Growth and characterization of tin disulfide (sns<sub>2</sub>) thin film deposited by successive ionic layer adsorption and reaction (silar) technique," *Journal of alloys and compounds*, vol. 436, no. 1-2, pp. 421–426, 2007.
- [3] P. S. Nair, K. P. Fritz, and G. D. Scholes, "A multiple injection method for exerting kinetic control in the synthesis of cdse nanorods," *Chemical communications*, no. 18, pp. 2084–2085, 2004.
- [4] S. Chavhan, R. Mane, T. Ganesh, W. Lee, S.-H. Han, S. Senthilarasu, and S.-H. Lee, "Structural and optical properties of electrodeposited cd<sub>0.7</sub>zn<sub>0.3</sub>se thin films : Effect of annealing," *Journal of alloys and compounds*, vol. 474, no. 1-2, pp. 210–213, 2009.
- [5] J. Han and R. Gunshor, "Mbe growth and electrical properties of wide bandgap znse-based ii-vi semiconductors," in *Semiconductors and Semimetals*, vol. 44, pp. 1–58, Elsevier, 1997.
- [6] N. Bouarissa and M. Boucenna, "Band parameters for alas, inas and their ternary mixed crystals," *Physica Scripta*, vol. 79, no. 1, p. 015701, 2008.
- [7] N. Bouarissa, "T. kobayasi, and h. nara," *Solid. State. Commun*, vol. 96, p. 689, 1995.
- [8] S. J. Lee, T. S. Kwon, K. Nahm, and C. K. Kim, "Band structure of ternary compound semiconductors beyond the virtual crystal approximation," *Journal of Physics : Condensed Matter*, vol. 2, no. 14, p. 3253, 1990.
- [9] L. Vegard, "Die konstitution der mischkristalle und die raumfüllung der atome," *Zeitschrift fur Physik*, vol. 5, no. 1, pp. 17–26, 1921.
- [10] Y. Feng, K. Teo, M. Li, H. Poon, C. Ong, and J. Xia, "Empirical pseudopotential band-structure calculation for zn<sub>1-x</sub>cd<sub>x</sub>se<sub>1-y</sub>quaternary alloy," *Journal of applied physics*, vol. 74, no. 6, pp. 3948–3955, 1993.
- [11] U. Lunz, C. Schumacher, J. Nürnberger, K. Schüll, A. Gerhard, U. Schüssler, B. Jobst, W. Faschinger, and G. Landwehr, "The energy gap of epitaxial layers as a

function of composition and temperature,” *Semiconductor science and technology*, vol. 12, no. 8, p. 970, 1997.

[12] S. B. Data, “; madelung, o., ed,” 1996.

[13] K. Kassali and N. Bouarissa, “Composition and temperature dependence of electron band structure in znse<sub>1-x</sub>,” *Materials chemistry and physics*, vol. 76, no. 3, pp. 255–261, 2002.

# ***Conclusion générale***

---

Dans notre travail, Nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques des alliages ternaires semiconducteurs  $Zn_xCd_{1-x}S$ . Nos calculs sont basés sur l'utilisation de la méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) combiné avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. L'accord entre nos résultats et les valeurs expérimentales est trouvé généralement admissible

Ainsi, nous avons pu conclure que, pour le  $Zn_xCd_{1-x}S$ , les deux gaps indirects ( $\Gamma$ - X) et ( $\Gamma$  - L) diminuent de façon monotone avec l'augmentation de la concentration x en zinc, alors que le gap direct ( $\Gamma$  -  $\Gamma$ ) augmente et ne présente pas de transition de gap pour toute la gamme de la composition de zinc, il est par conséquent un semiconducteur à gap direct.

Nous avons également étudié les propriétés optiques où nous avons calculé l'indice de réfraction et la constante diélectrique comme paramètres très importants en physique. L'indice de réfraction a été calculé selon six modèles existant. Nous pouvons conclure aussi que, l'augmentation de la concentration x entraîne une diminution monotone de n sauf pour les valeurs de n de faible gap et que le modèle de Ravindra donne des valeurs proches par comparaison aux données théoriques.

Quel que soit le modèle utilisé, le comportement de la constante diélectrique  $\epsilon_\infty$  en fonction de la composition x du Zinc pour l'alliage semiconducteur d'intérêt est le même que celui de l'indice de réfraction. La tendance de  $\epsilon_\infty$  indique que cette constante diélectrique diminue pour des grandes concentrations du zinc.

Ce travail ouvre de nombreuses perspectives en ce qui concerne les méthodes de calculs. En prolongement de ce travail, des différentes méthodes peuvent être envisagées ainsi que l'étude d'autres propriétés physiques tel que : propriétés magnétiques, thermodynamiques, mécanique etc.

---

## Abstract

---

In this work, we have studied some optoelectronic properties, dielectrics with and without taking into account the effect of the compositional disorder of ternary alloys  $Zn_xCd_{1-x}S$ . These alloys are of great interest for the design of optoelectronic devices such as solar cells, luminescent devices and laser diodes. The method used is that of the local empirical pseudopotential (EPM) coupled with the virtual crystal approximation (VCA) which includes the effect of disorder compositional by the introduction of an effective potential of the disorder. This method is simple and gives quick and generally reliable results. The agreement between our results and the data known in the literatures, on the studied parameters, turns out reasonably good. All the studied parameters vary monotonically according to of the composition x of the Zinc Particular attention has been focused on the effect of compositional disorder on the energy gaps  $E_r^f, E_r^x, E_r^l$  the refractive index, the two dielectric constants of the alloy  $Zn_xCd_{1-x}S$  The latter proves to be very important and therefore we cannot neglect it.

---

## Résumé

---

Dans ce travail, nous avons étudié quelques propriétés optoélectroniques, diélectriques avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel des alliages ternaires  $Zn_xCd_{1-x}S$ . Ces alliages ont un intérêt important pour la conception des dispositifs optoélectroniques tels que, les cellules solaires, les dispositifs luminescents et les diodes laser. La méthode utilisée est celle du pseudo-potentiel empirique local (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui inclut l'effet du désordre compositionnel par l'introduction d'un potentiel effectif du désordre. Cette méthode est simple et donne des résultats rapides et en général fiables. L'accord entre nos résultats et les données connues dans les littératures, sur les paramètres étudiés, s'avère raisonnablement bon. Tous les paramètres étudiés varient monotoniquement en fonction de la composition x du Zinc Une attention particulière a été accentuée sur l'effet du désordre compositionnel sur les gaps d'énergies  $E_r^f, E_r^x, E_r^l$  l'indice de réfraction, les constantes diélectriques de l'alliage  $Zn_xCd_{1-x}S$  Ce dernier s'avère très important et nous ne pouvons pas le négliger. .

---

## ملخص

---

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص الالكترونية، الضوئية ، طول الموجة و خواص العزل الكهربائي مع و بدون أخذ اعتبار لتأثير العشوائي في  $Zn_xCd_{1-x}S$  السبائك الثلاثية مقرونة بتقريب البلورة الافتراضية. التركيب. في هذه الدراسة تم استعمال الطريقة التجريبية لشبه الكمون هذه السبائك لها اهمية كبيرة في تصميم الأجهزة الالكترونية الضوئية مثل : الخلايا الشمسية المركبات المضاءة و الديويدات الليزرية. كل المقادير المحسوبة تمت دراسة تغييرها بدلالة التركيز x الزنك . الطريقة المستعملة ،الحسابات تكون بسيطة ،سريعة و اكثر دقة . التوافق بين النتائج المتحصل عليها و المعطيات المتوفرة النظرية منها و التجريبية هو عموما مقبول. يحدث انتقال علي الشكل المباشر. يجب لفت النظر في بنية عصابات الطاقة للمركب النصف ناقل العشوائي في التركيب للدراسة تغير تأثير أن إلى النظر  $E_r^f, E_r^x, E_r^l$  قرينة الانكسار، طول الموجة و ثوابت يجب اخذه بعين الاعتبار ولا يمكن اهماله  $Zn_xCd_{1-x}S$  العزل الكهربائي للسبيكة

