

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 08/2020



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

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique

Par: Zakarya Bouguerra

**Intitulé**

**Effets du confinement quantique sur les propriétés physiques des points quantiques sphériques semi-conducteurs III-V**

Soutenu le /06 /2020 devant le jury composé de:

Boussendel Abdelmadjid	Université de M'sila	Président
Mezrag Fadila	Université de M'sila	Rapporteur
Benyettou Samia	Université de M'sila	Examineur

**Année universitaire : 2019/2020**

## *Remerciements*

*Je remercie tout d'abord Dieu le tout puissant de m'avoir procuré patience et volonté durant toutes les années de mes études*

*J'adresse mes vifs remerciements à mon encadreur Mme **Mezrag Fadila** pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet malgré les circonstances que nous avons traversées, et pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs.*

*Je tiens à remercier, le président de jury, Professeur **Boussendel Abdelmadjid** et l'examineur Mme **Ben Yettou Samia**, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail.*

*Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à ma famille et mes amis.*

# *Dédicace*

*Je dédie ce travail :*

*A mon père et A ma mère*

*A mon frères et A mes soeurs*

*À la femme de mon oncle*

*À mes cousins*

*A Abdelkader Mohammedi*

*A toute la famille Bouguerra*

*A tous ceux que j'aime*

*Zakary Bouguerra*

## Table des matières

Remerciement.....	i
Dédicace.....	ii
Tables des matières.....	iii
Introduction générale .....	1
Références bibliographiques citées dans l'introduction générale.....	3
<b>Chapitre I : Généralités sur les Semiconducteurs</b>	
I -1 Introduction.....	4
I-2 Définition de semi-conducteur.....	4
I-3 Différent types de semi-conducteurs.....	5
I-3-1 semiconducteur intrinsèque.....	5
I-3-2 Semiconducteur extrinsèque (dopés N et P).....	6
I-3-2-1 type N .....	6
I-3-2-2 Type P .....	6
I-4 Les composés Semi-conducteurs .....	8
I-4-1 Les composés Semi-conducteurs III-V .....	9
I-4-2 Les composés Semi-conducteurs II-VI .....	9
I-4-3 Les composés Semi-conducteurs IV-VI .....	9
I-5 Les propriétés physiques des semi-conducteurs .....	10
I-5-1 Les propriétés structurales des semi-conducteurs.....	10
I-5-1-1 Structure cristalline .....	10

I-5-1-2 Paramètre de maille .....	12
I-5-2 Les propriétés électronique des semiconducteurs.....	13
I-5-2-1 Structure électronique .....	13
I-5-2-2 Notion de bandes d'énergie .....	14
I-5-2-3 Gap direct et gap indirect .....	15
I-5-3 Les propriétés optiques du semi-conducteur .....	17
I-5-3-1 l'indice de réfraction.....	18
I -5-3-2 Constante diélectrique .....	18
I-6- Les application des semiconducteurs.....	19
I-7 Conclusion.....	20
Références bibliographiques citées dans le chapitre I .....	21

## **Chapitre II : Semiconducteurs nanostructurés**

II-1 Introduction.....	23
II-2 Définitions .....	23
II-2-1 Nanotechnologie.....	23
II-2-2 Nanomatériaux .....	24
II-2-3 Nano-objets.....	26
II-2-4 Nanoparticules .....	27
II-3 Différent types des nanomatériaux .....	27
II-3-1 Matériaux nanochargés ou nanorenforcés .....	27
II-3-2 Matériaux nanostructurés en surface .....	28

II-3-3 Matériaux nanostructurés en volume .....	28
II-4 Nanomatériauxsemiconducteurs .....	28
II-5 Le confinement Quantique .....	28
II-5-1 Puits, fils et boites quantiques.....	29
II-5-2 Excitons en points quantiques .....	30
II-6 Modélisation de l'effet quantique de taille .....	31
II-6-1 Modélisation .....	31
II-6-2 Effet sur les propriétés électroniques.....	32
II-6-3 Effet sur les propriétés optiques.....	33
II-7 Méthode d'élaboration.....	34
II-8 Applications des nanomatériaux semiconducteurs .....	37
II-9 Conclusion .....	38
Références bibliographiques citées dans le chapitre II.....	39

### **Chapitre III : Résultats et discussion**

III -1 Introduction .....	41
III-2 Etude des propriétés électroniques .....	41
III-2-1 Méthode du pseudopotentiel.....	41
III-2-2 Méthode de la masse effective.....	45
III-2-3 Transition du gap énergétique.....	51
III-3 Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction).....	58
III-4 Etude des propriétés diélectriques .....	69

III-4-1 Constante diélectrique de haute fréquence ( $\epsilon_{\infty}$ ).....	69
III-4 Conclusion.....	74
Références bibliographiques citées dans le chapitre III.....	75
*_*	
Conclusion générale.....	77
Liste des figures et Liste des tableaux	
Résumé	

## *Introduction générale*

## *Introduction générale*

Le développement scientifique auquel nous assistons actuellement dans le domaine électronique, optique ...etc., suscite la recherche, l'exploration, le développement et la modification de nouveaux matériaux, et toutes les préoccupations ont été dirigées vers les matériaux semi-conducteurs.

Toute fois les matériaux semi-conducteurs sont parmi les matériaux les plus utilisés dans les industries électroniques, pour la fabrication de composants tels que les diodes et les circuits intégrés.

Les composés semi-conducteurs sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à la richesse de leur propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectroniques [1].

Pour ce faire, l'utilisation de l'outil informatique est indispensable pour cette étude, c'est pour cette raison que l'ordinateur et ses développements facilitent l'étude mathématiquement et par simulation, des différentes propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs. Ainsi, l'intérêt de la modalisation et la simulation est d'étudier les diverses possibilités qui se présentent, et d'orienter l'industrie vers les meilleurs choix avec un cout minimum[2].

Désormais, le préfixe « nano » est devenu très à la mode; l'étude des propriétés optiques linéaires et non-linéaires des cristaux semiconducteurs de dimensions nanométriques est devenue depuis quelques années un important domaine de recherche, qui se justifie pour des raisons aussi bien fondamentales que technologiques. Dans ce contexte, une recherche vaste a été développée pour l'utilisation de semiconducteurs de taille nanométrique ; ce qui a permis d'exploiter leurs incroyables propriétés. Sous forme de couches minces, ces derniers ont permis l'intégration de milliers de composants conduisant ainsi à la miniaturisation des dispositifs utilisés dans des applications technologiques telles que: les diodes électroluminescentes, les dispositifs laser, et les cellules photovoltaïques [3].

La méthode de pseudo-potentiel empirique (E.P.M) est la méthode la plus largement utilisée pour étudier la structure des bandes, en raison de sa précision et de sa facilité d'utilisation, bien qu'il existe de nombreuses autres méthodes théoriques.

Notre travail de mémoire est consacré à l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des semi-conducteurs binaires nanostructurés : GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP du type III-V cristallisant dans la structure zinc-blende

Le but de ce travail est l'investigation des paramètres de la structure de bandes électroniques, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute-fréquence à l'échelle nanométrique et d'étudier l'effet du confinement sur les propriétés physiques des matériaux qui font sujet de notre étude.

Ce mémoire est organisé en trois chapitres et une conclusion générale

- Dans le premier chapitre des préambules importants sur les semiconducteurs
- le deuxième chapitre porte sur les semiconducteurs nanostructurés, et le confinement quantique.
- Dans le dernier chapitre, les résultats de simulation vont être présentés d'une manière simple à comprendre, interprétés, comparés à des résultats théoriques et indiquant les performances des modèles optimisés.

Et finalement, une conclusion qui synthétise les résultats obtenus et donne un aperçu des perspectives qui peuvent être développées.

**Références bibliographiques citées dans l'introduction générale**

[1] Benatmane Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V. Mémoire de magister. Université de Batna, (2011).

[2] <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>

[3] LT.Canham, Appl.Phys.lett.57, 1046(1990).

# *Chapitre I*

## *Généralités sur les Semiconducteurs*

## **Chapitre I**                    **Généralités sur les Semiconducteurs**

### **I -1 Introduction**

Le semiconducteur a révolutionné le domaine de l'électronique, incitant les scientifiques à l'étudier et à améliorer ses propriétés.

Dans ce premier chapitre, nous verrons des généralités sur les semi-conducteurs afin de connaître les propriétés qui en ont fait l'un des matériaux les plus recherchés dans le domaine de la fabrication intelligente.

Et nous allons présenter Les matériaux semi-conducteurs III-V, que nous avons étudiés.

### **I-2 Définition de semi-conducteur**

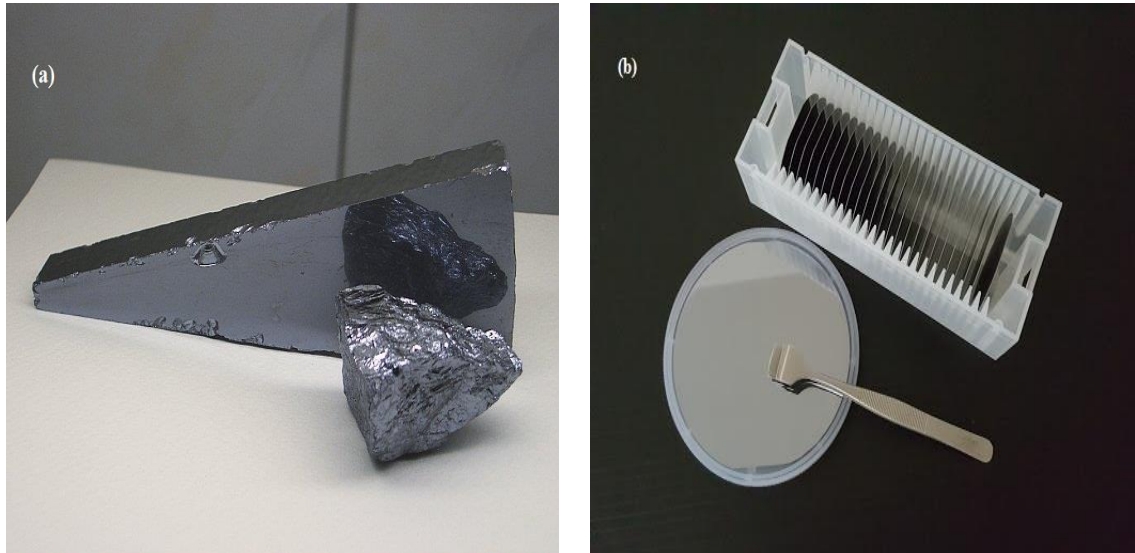
La recherche sur les matériaux semiconducteurs a commencé au début du 19ème siècle. Au fil des années de nombreux semiconducteurs ont été étudiés. Dans un semi-conducteur il existe deux types de conduction : la conduction par électrons et la conduction par trou [1].

Les matériaux peuvent être classés en trois catégories, y compris les conducteurs, les isolants et les semi-conducteurs dont les propriétés sont différentes en matière de type et d'utilisation.

La résistivité  $\rho$  du semiconducteur varie entre  $10^{-3} \Omega \cdot \text{Cm}$  et  $10^{-4} \Omega \cdot \text{Cm}$ , c'est ce qui différencie les matériaux les uns des autres, pour les isolant sa valeur est supérieur que  $10^8 \Omega \cdot \text{Cm}$  et pour les conducteurs elle est inférieur de  $10^{-5} \Omega \cdot \text{Cm}$ .

Un semi-conducteur est un cristal qui est isolant s'il est pur et au zéro absolu et dont la conductivité électrique est due à l'agitation thermique, à des impuretés ou à différents types de défauts. Les semi-conducteurs sont des corps solides dont la conductivité électrique se situe entre celle des métaux et celle des isolants [2]. Elle peut

varier sur plusieurs ordres de grandeur sous l'effet de la température et/ou de l'éclairement. Un autre facteur modifiant fortement la conductivité est la présence d'impuretés (dopage) [3].



**Figure I-1** Matériaux semiconducteurs (a) silicone [4], (b) GaAs tranche [5]

### I-3 Différent types de semi-conducteurs

Dans les matériaux semi-conducteurs, on peut distinguer deux types différents, le premier étant la désignation intrinsèque du semi-conducteur et le second étant le semi-conducteur extrinsèque (dopé N et P).

#### I-3-1 Semiconducteurs intrinsèque

Ce sont des semi-conducteurs très purs et très bien cristallisés (présentant un réseau cristallin parfaitement périodique) et ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour  $10^{13}$  atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température [6].

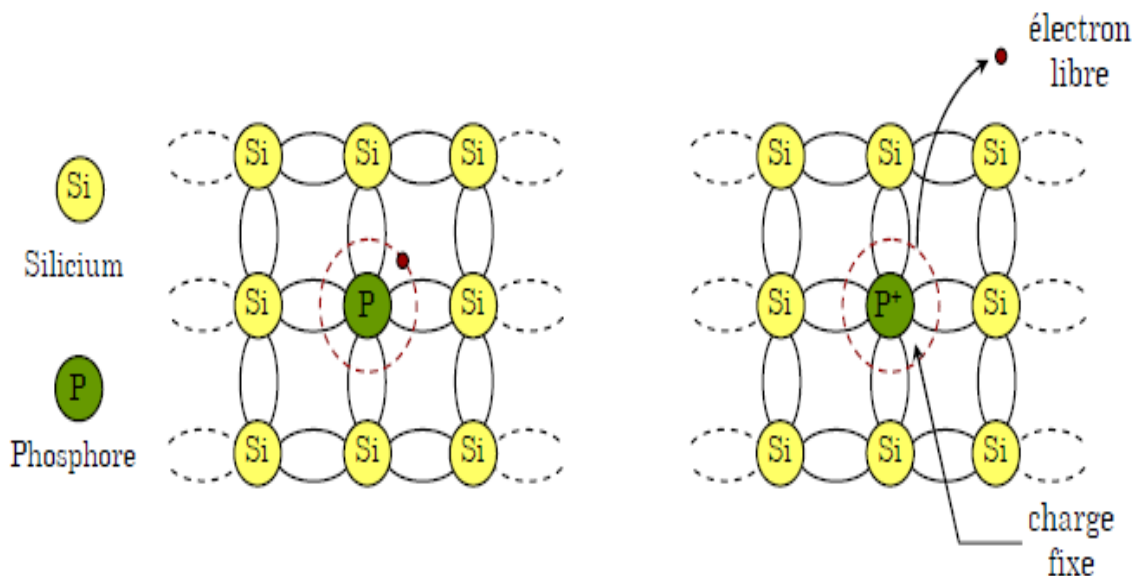
Le semiconducteur intrinsèque non dopé, dépourvu de toute impureté, on dit que le semiconducteur est parfait, le nombre d'électrons est égale au nombre des trous pour  $T \neq 0$ ,

### I-3-2 Semiconducteur extrinsèque (dopés N et P)

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage [7].

#### I-3-2-1 type N

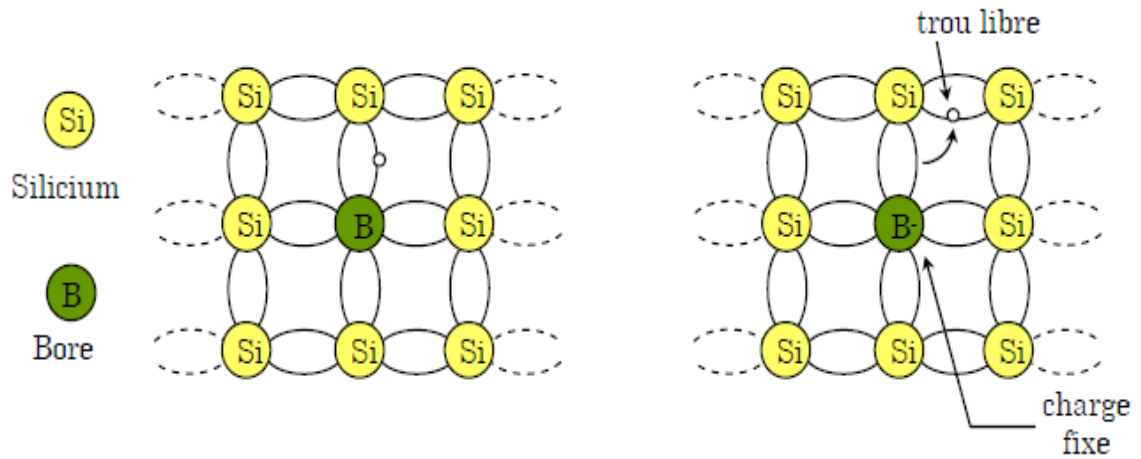
Par exemple, un élément avec quatre électrons de valence tels que Si et Ge est un semi-conducteur quadripolaire. Lorsqu'il se lie à un atome pentavalent comme le phosphore, le cinquième électron restera isolé dans ce cas il est classé de type n et ce dernier rend le semi-conducteur riche en électrons.



**Figure I-2** Représentation schématique de la substitution d'un atome de phosphore à un atome de silicium (exemple du dopage N) [8].

#### I-3-2-2 Type P

Dans ce cas, les atomes trivalents à trois électrons ne peuvent créer que trois liaisons comme Al et B sont classés dans le type p, et ce type augmente le pourcentage de trous dans le semi-conducteur.



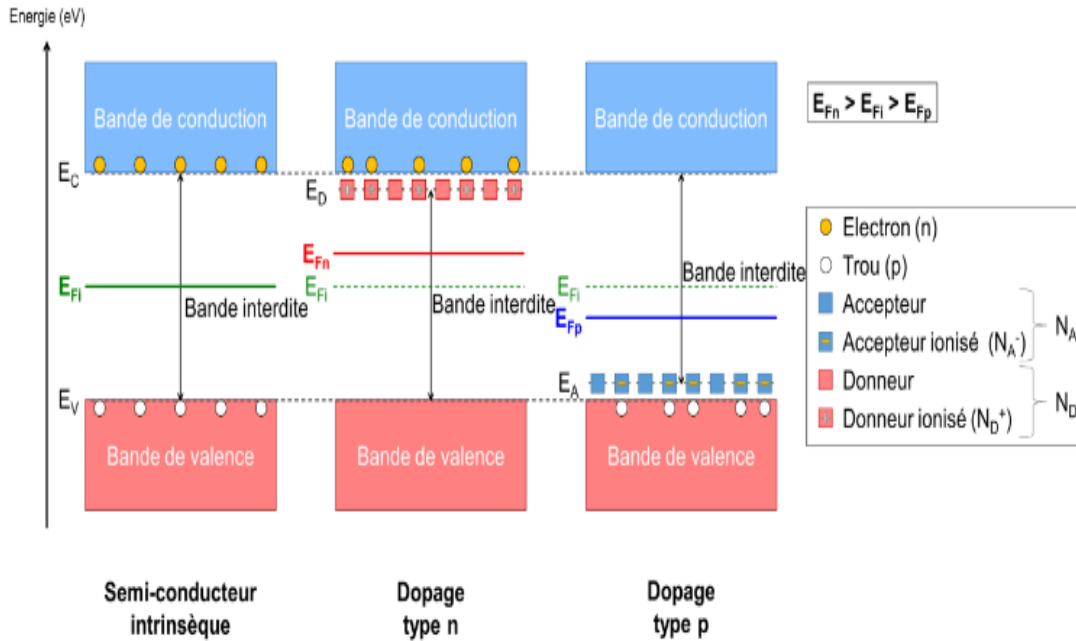
**Figure I-3** Représentation schématique de la substitution d'un atome de Bore à un atome de silicium (exemple du dopage P) [8] .

La Figure I-4 présente les type de dopage de semiconducteurs est on a.  $E_{F1}$ ,  $E_{Fn}$  et  $E_{Fp}$ : Energie du niveau de Fermi correspondant respectivement au semi-conducteur intrinsèque, au semi-conducteur dopé n et au semiconducteur dopé p.

$E_V$ : Energie du sommet de la bande de valence [9].

$E_C$ : Energie du bas de la bande de conduction.

$E_A$  et  $E_D$  : Energie du niveau accepteur et du niveau donneur.



**Figure I-4** Modèle proposant une structure des semi-conducteurs intrinsèques et semi-conducteurs extrinsèques avec dopage type n et p, à  $T > 0K$  [10].

La Figure I-4 traduit l'effet du dopage au niveau de la structure électronique. Le dopage introduit de nouveaux états dans la bande interdite. Pour que le dopage soit efficace, ces niveaux doivent être donneurs et se situer proches de la bande de conduction pour un dopage type n, et être accepteurs et proches de la bande de valence pour un dopage de type p. Dans le cas d'un dopage de type n, ce niveau donneur est rempli car il contient un électron issu de l'atome dopant. Cet électron pourra facilement être excité vers la bande de conduction, qui sera alors partiellement remplie, améliorant la conductivité du matériau. Dans le cas d'un dopage de type p, le niveau accepteur introduit est vide. Les électrons de la bande de valence pourront être excités vers ce niveau, introduisant alors un trou dans la bande de valence, qui pourra participer à la conductivité du matériau [9].

#### I-4 Les composés Semi-conducteurs

Dans ce travail, nous avons étudié les semi-conducteurs du type III-V, Il existe d'autres types comme II-VI et IV-VI, Mais dans notre travail nous sommes intéressés à étudier le premier type, Ces matériaux sont constitués de deux éléments ils sont dans le tableau périodique des éléments.

**I-4-1 Les composés Semi-conducteurs III-V**

Le symbole III signifie la troisième colonne, qui représente les éléments suivants : Bor (B), Aluminium (Al), Gallium (Ga), Indium (In), Thallium (Tl), Nihonium (Nh) dans le tableau périodique des éléments. Le symbole V signifie la cinquième colonne, qui représente les éléments suivants : Azote (N), Phosphore (P), Arsenic (As), Antimoine (Sb), Bismuth (Bi), Moscovium (Mc), la famille des semi-conducteurs III-V est AlP, AlAs, AlSb, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs et InSb.

**I-4-2 Les composés Semi-conducteurs II-VI**

Le symbole II signifie la seconde colonne, qui représente les éléments suivants : Zinc (Zn), Cadmium (Cd), Mercure (Hg), Copernicium (Cn), dans le tableau périodique des éléments. Le symbole VI signifie la Sixième colonne, qui représente les éléments suivants : Oxygène (O), Soufre (S), sélénium (Se), Tellure (Te), Polonium (Po), Livermorium (Lv), la famille des semiconducteurs II-VI est CdS, CdSe, CdTe, HgS, HgTe, ZnO, ZnS, ZnSe et ZnTe.

**I-4-3 Les composés Semi-conducteurs IV-VI**

Le symbole IV signifie la Quatrième colonne, qui représente les éléments suivants: Carbone (C), Silicium (Si), Germanium (Ge), Étain (Sn), Plomb (Pb), Flérovium (Fl) dans le tableau périodique des éléments. Le symbole VI signifie la Sixième colonne, qui représente les éléments suivants : Azote (N), Phosphore (P), Arsenic (As), Antimoine (Sb), Bismuth (Bi), Moscovium (Mc), la famille des semi-conducteurs IV-IV est PbSe, GaSe, PbS, PbTe, SnS, SnTe.

La Figure I-5 montre le positionnement des matériaux Semiconducteurs III-V et II-VI et IV-VI dans le tableau périodique des éléments, le cadre noir montre uniquement les éléments que nous allons étudier dans ce travail.

**TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS**

Classification des éléments par groupes :

- Non-métaux (jaune)
- Métaux alcalins (rouge)
- Métaux pauvres (bleu clair)
- Gas nobles (vert clair)
- Métaux de transition (orange)
- Lanthanides (rose)
- Métalloïdes (bleu foncé)
- Inconnus (gris)
- Métaux alcalino-terreux (orange foncé)
- Actinides (violet)
- Halogènes (vert foncé)

Éléments III-V encadrés : B, C, N, Al, Si, P, Ga, Ge, As, In, Sn, Sb, Te, I, Xe.

Éléments II-VI encadrés : Zn, Cd, Hg, Cu, Ag, Au, Pt, Ir, Os, Re, W, Ta, Hf, La, Ba, Cs, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe.

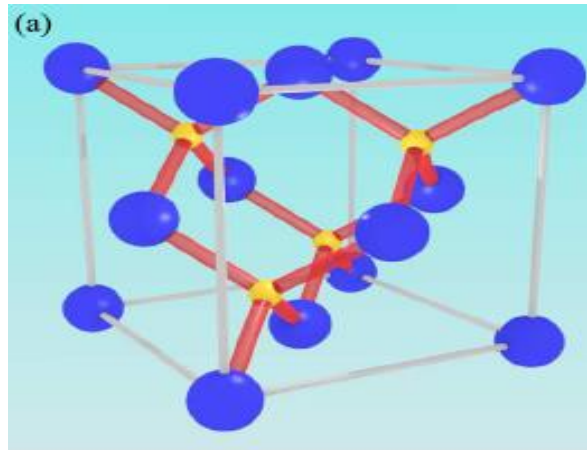
Figure I-5 Le tableau périodique des éléments.

## I-5 Les propriétés physiques des semi-conducteurs

### I-5-1 Les propriétés structurales des semi-conducteurs

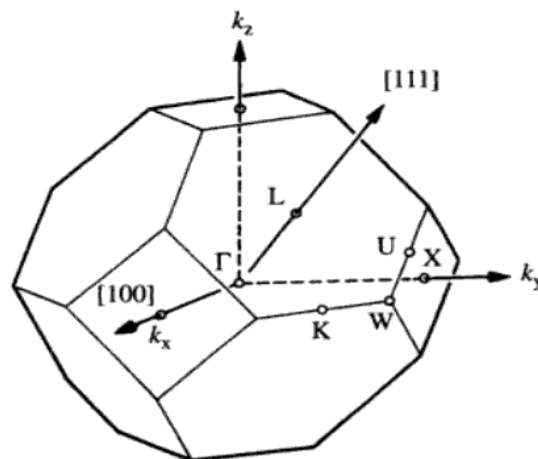
#### I-5-1-1 Structure cristalline

Les semi-conducteurs III-V et II-VI considérés dans ce qui suit ont tous des structures atomiques de type Zinc-Blende (figure I.1). La structure Zinc-Blende est basée sur le réseau de Bravais cubique à faces centrées (CFC). Chaque nœud de ce réseau porte un motif avec les deux éléments atomiques (III et V, par exemple), de positions relatives  $(0, 0, 0) a$  et  $(0.25, 0.25, 0.25) a$ , ou  $a$  est le paramètre de la maille CFC. Cette structure est analogue à la structure diamant des semi-conducteurs IV (silicium, germanium) [11].



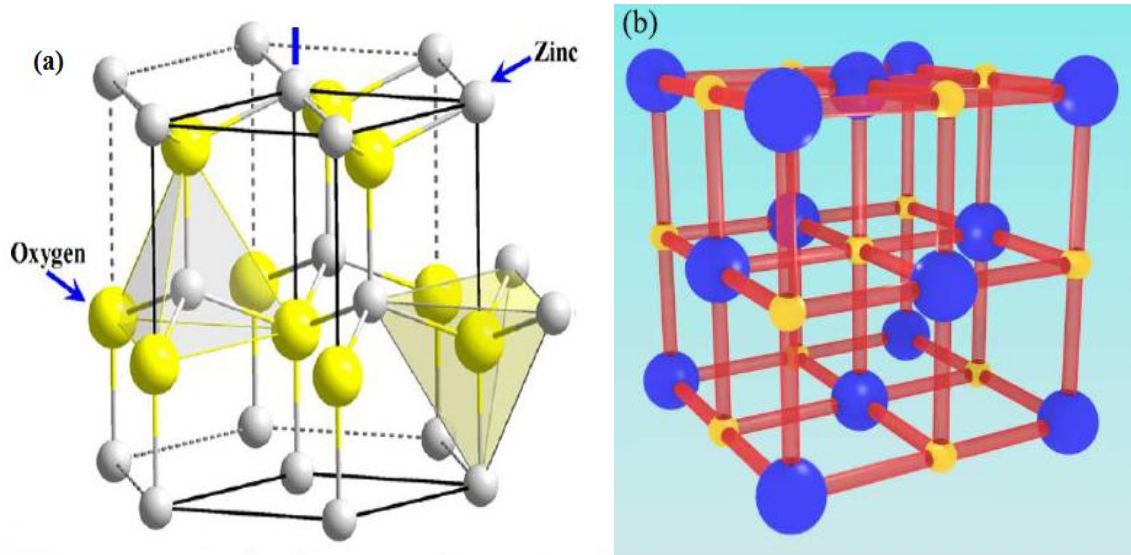
**Figure I-6** Schéma montrant les structures atomiques des semi-conducteurs. (a) La structure Zinc-Blende des semi-conducteurs III-V et II-VI étudiés dans le présent travail (GaAs, InAs, InSb, InP, AlSb, CdSe, CdTe, HgTe) [11].

Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin [12] est représenté sur la Figure I-5. Elle présente un centre de symétrie  $\Gamma$  à l'origine ( $k=0$ ) et des axes de symétrie.



**Figure I-7** Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées

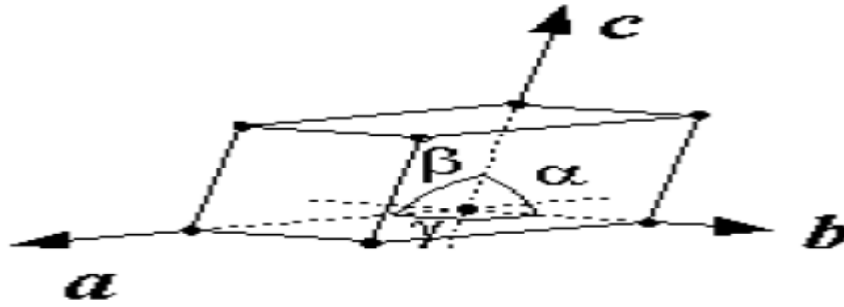
Ils existent quelques semi-conducteurs se cristallisent dans la structure Wurtzite (hexagonale) ou Rocksalt (NaCl)[13].



**Figure I-8** Les structures (a) Wurtzite et (ZnO) [14]. (b) La structure Rock-Salt des semiconducteurs IV-VI (PbSe). Les sphères bleues et jaunes indiquent les deux types d'atomes. Les cylindres rouges indiquent les liaisons aux premiers voisins [11].

### I-5-1-2 Paramètre 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 figure (II-3), suivant les valeurs relatives de six grandeurs on définit les différentes structures cristallines [15].



**Figure I-9** Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

**Tableau I-1** Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V[16].

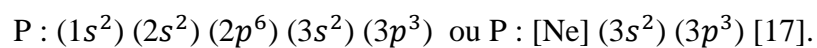
Matériau	a(Å)	Structure
GaAs	5.65330	zb
InAs	6.0583	zb
InP	5.8690	zb
GaSb	6.09593	zb
AlAs	5.66139	zb
AlSb	6.1355	zb
GaP	5.4508	zb

## I-5-2 Les propriétés électronique des semiconducteurs

### I-5-2-1 Structure électronique

#### Phosphore (P) :

L'atome du phosphore (P) possède 15 électrons, la configuration électronique du phosphore ( $^{15}\text{P}$ ) est donnée par la forme condensée suivante.

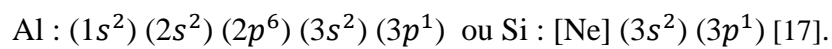


La distribution des électrons sur les orbitales atomiques obéit au principe d'exclusion de Pauli et à la règle de Hund

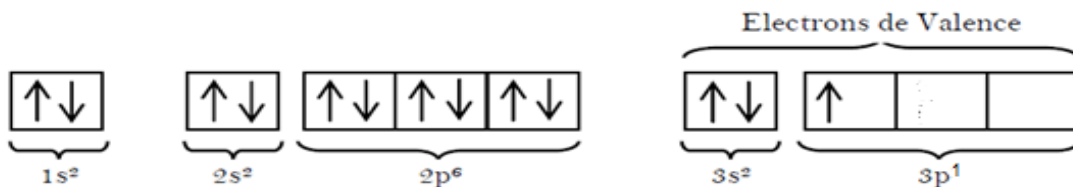


### Aluminium (Al) :

Ils possèdent 13 électrons, configuration électronique du Aluminium ( $^{13}\text{Al}$ )



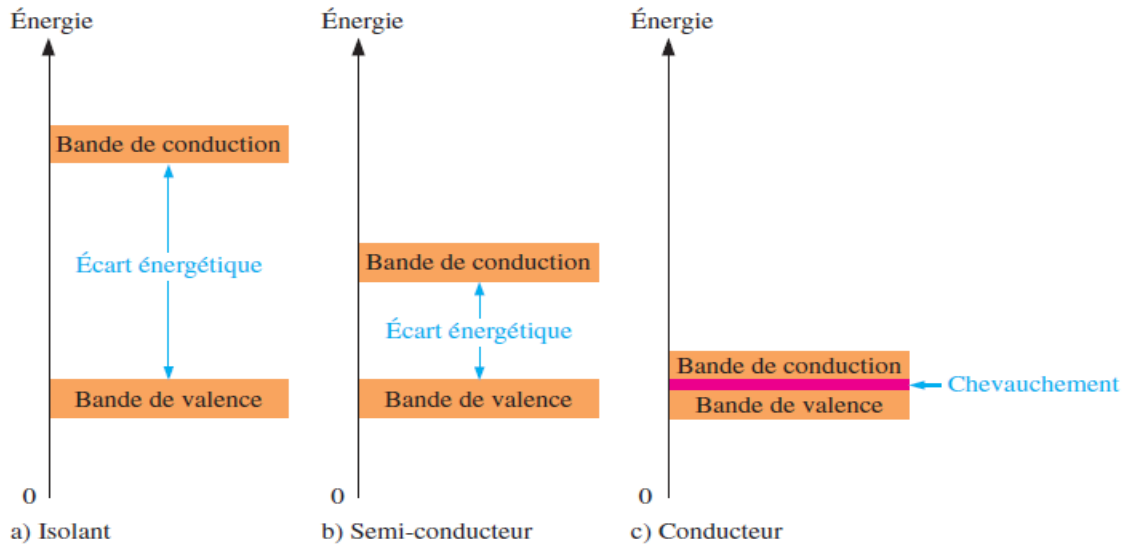
La distribution des électrons sur les orbitales atomiques.



### I-5-2-2 Notion de bandes d'énergie

On peut dire que l'écart d'énergie est la distance entre la bande de valence et la bande de conduction, et c'est une certaine valeur d'énergie qui permet à l'électron de sauter de la bande de valence à la bande de conduction.

Dans les semiconducteurs, l'énergie de gap décrit l'énergie nécessaire pour permettre à un électron de sauter de la bande de valence vers celle de conduction. En outre, c'est la largeur de cette bande d'énergie qui trace une ligne entre les semiconducteurs et les isolants [18].



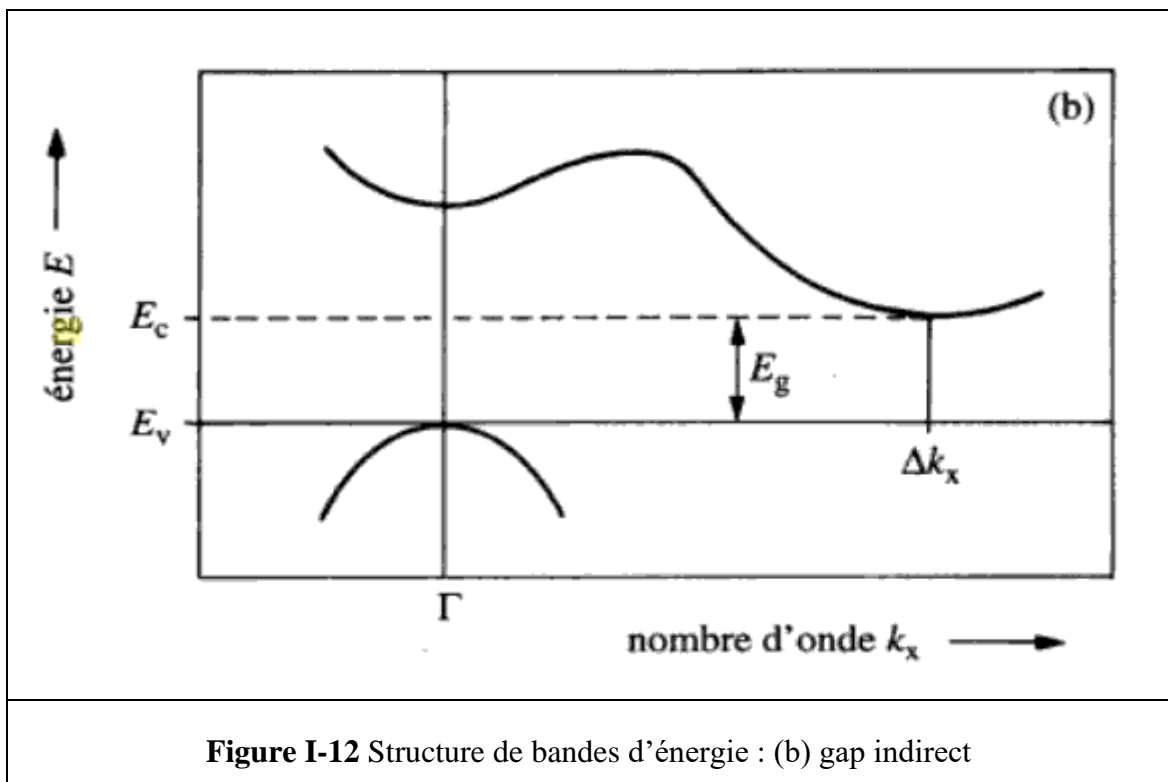
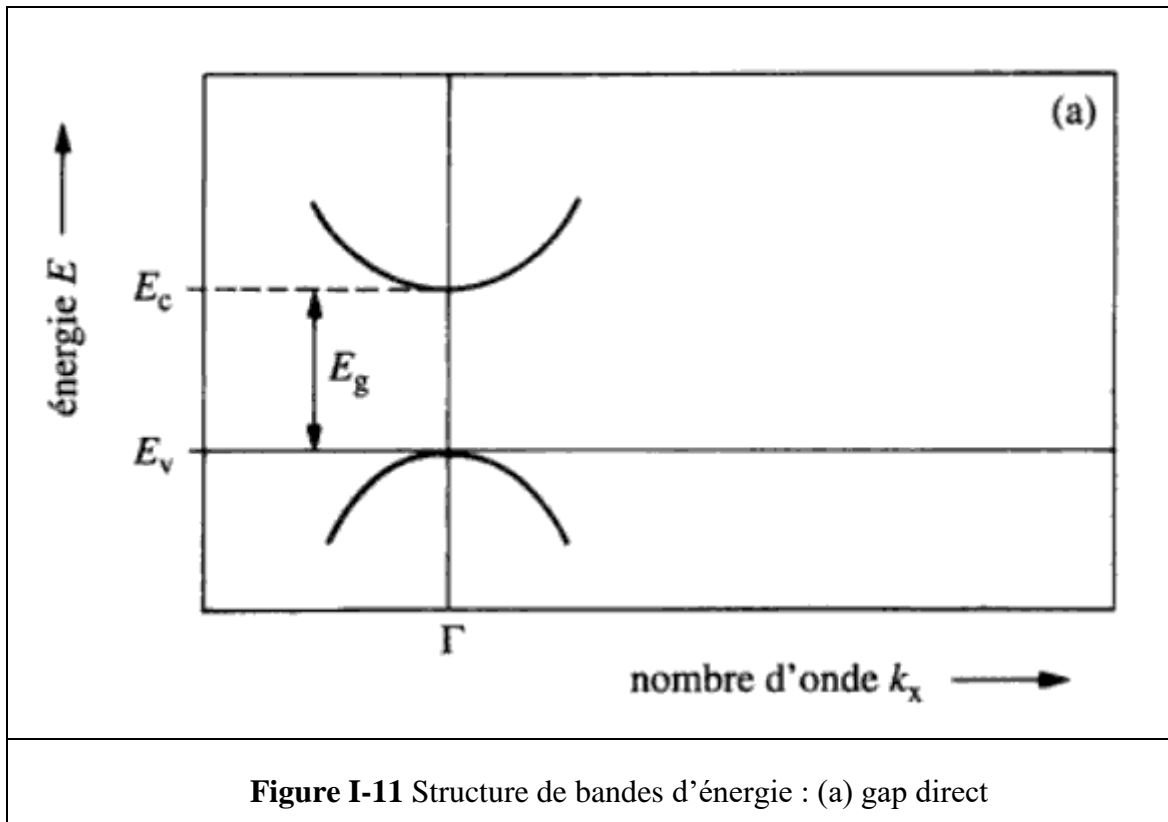
**Figure I-10** Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux.

Ces bandes se décomposent en bande de conduction la plus haute, la bande de valence la plus basse et la bande interdite qui les sépare qui détermine principalement les propriétés de transport du semiconducteur [19].

### I-5-2-3 Gap direct et gap indirect

Il ya deux différents types de gaps énergétiques, gap direct et l'autre indirect, la différence entre les deux gaps c'est le vecteur d'onde  $\vec{K}$ . Ils peuvent être calculés entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence.

Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de  $\vec{K}$ : On dit que le semiconducteur a un gap direct, comme le montre sur la Figure I-11. Tandis que, si ce maximum et ce minimum correspondent à différentes valeurs de  $\vec{K}$  le semi-conducteur a un gap indirect, comme le montre la Figure I-12 [7].

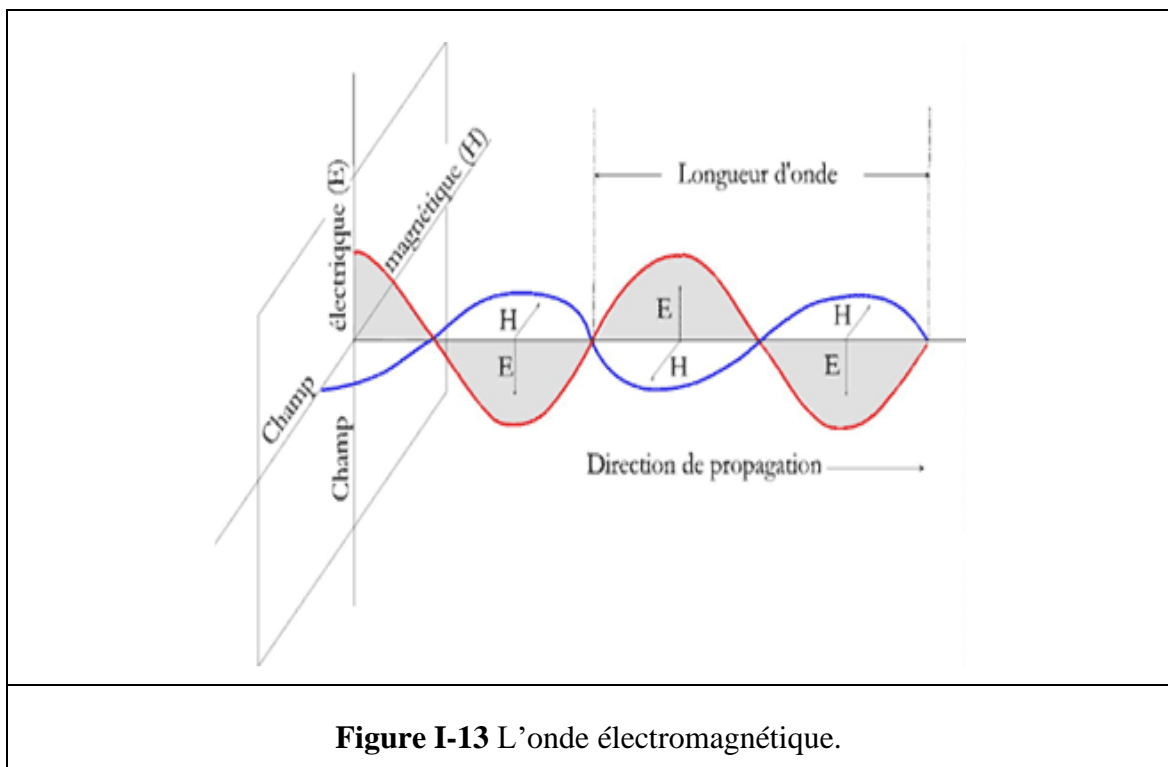


### I-5-3 Les propriétés optiques du semi-conducteur

Les propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission) sont d'intérêt pratique, leur étude a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [20].

Mais avant de considérer ces interactions lumière-matière, nous faisons un rappel des formalismes utiles pour décrire cette lumière électromagnétique [20].

Un champ électromagnétique nous entoure en permanence, exactement comme l'air qui nous entoure. Ce champ est créé par la présence des particules chargées, comme les électrons et les protons, le déplacement de ces particules donne un courant électrique qui va donner à son tour un champ magnétique, une simple perturbation de ce champ électromagnétique permet de créer la propagation d'une onde électromagnétique [21].



**Figure I-13** L'onde électromagnétique.

Nous remarquons que l'onde électromagnétique caractérisée par deux paramètres, sa fréquence et sa longueur d'onde présents dans la Figure I-13.

### I-5-3-1 l'indice de réfraction

L'indice de réfraction ( $n$ ) des semi-conducteurs est d'un intérêt important pour des considérations à la fois fondamentales et appliquées. En outre, les dispositifs tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs, nécessitent une connaissance préalable de l'indice de réfraction [22].

Cet indice de réfraction (souvent noté  $n$ ) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ( $C=299\,792\,458$  Km/s) et la vitesse de la lumière dans le matériau [17].

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques et dans les structures optoélectroniques, comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques et les fibres optiques [23].

### I-5-3-2 Constante diélectrique

#### La constante diélectrique statique $\epsilon(0)$ et de hautes fréquences $\epsilon(\infty)$

La constante diélectrique appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle a des conséquences importantes sur les propriétés physiques du solide. Elle intervient dans de nombreux domaines, notamment, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétique, en particulier en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière [24], autrement dit, les excitations propres d'un matériau sont décrites par la fonction Diélectrique  $\epsilon(\omega, \vec{k})$ , cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur d'onde [25].

Pour les petites valeurs de  $\vec{k}$ , cette fonction sera seulement fonction de la fréquence, on parlera ainsi de la constante diélectrique statique qui correspond à l'équilibre thermodynamique et la constante diélectrique  $\epsilon(\infty)$  correspondant à sa limite pour les hautes fréquences : appelée aussi constante diélectrique optique [22].

**Tableau I-2** Les valeurs expérimentales statique et optique de quelques matériaux semiconducteurs à 300 K [21].

Matériau	Constante diélectrique statique $\epsilon(0)$	Constante diélectrique optique $\epsilon(\infty)$
GaAs	12,9	10,9
InAs	14,9	12,3
InP	12,4	9,6
GaP	10,7	8,5

## I-6 Les application des semiconducteurs

### Cellule solaire

La première cellule solaire au silicium a été fabriquée en 1839, après, lacellule solaire a été fabriquée à partir de soufre de cadmium et de soufre de cuivre, et le nom des cellules solaires à couche mince a ensuite été lancé.

Constitués de semi-conducteurs, lorsqu'ils sont exposés à la lumière à travers lesquels une différence de tension est formée, les électrons se déplacent dans les trous du réseau cristallin, et ils sont dirigés en fonction de leur charge vers l'extrémité appropriée dans la cellule n ou p, respectivement. Il existe trois principaux types disponibles sur le marché: Monocrystalline, Silicon et Polycrystalline SiliconThin Film.

### Lasers

Le principe de fonctionnement du laser dépend de la conversion de l'énergie de pompage des émissions automatiques en énergie lumineuse, en utilisant une amplification entre deux miroirs afin que la lumière fasse plusieurs allers-retours avant l'émission.

**Diodes électroluminescentes (LED)**

Parmi les applications d'interface, il existe des diodes électroluminescentes qui ont un spectre de plusieurs couleurs qui peuvent les rayonner.

La jonction PN est entourée d'une couche transparente avec un couvercle en résine plastique principalement transparente cette résine époxy qui est solide menu en plus d'un couvercle en plastique qui réfléchit les photons émis par la liaison.

**I-7 Conclusion**

Les matériaux semiconducteurs sont les plus exploités dans l'industrie électronique et à l'échelle nanométrique, car ils contrôlent l'économie du temps présent et cela en raison des propriétés qu'ils possèdent, de sorte que la recherche des meilleures propriétés, leur étude et leur développement sont devenues tout ce qui compte pour l'esprit.

Les matériaux semiconducteurs renferment de nombreuses propriétés telles que électroniques, optiques et diélectriques et le confinement quantique des électrons affecte ces propriétés et c'est ce que nous verrons au chapitre trois.

**Références bibliographiques citées dans le chapitre I :**

- [1] Z. Liu, M. Osamura, T. Ootsuka, R. Kuroda, Y. Fukuzawa, N. Otagawa, et al., Effect of a  $\text{Fe}_3\text{Si}$  buffer layer for the growth of semiconducting  $\beta\text{-FeSi}_2$  thin film on stainless steel substrate, *J. of Crystal Growth* 307 (2007) 82-86.
- [2] Formation de bandes d'énergie par interaction de niveaux atomiques (2005 Encyclopedia Universalis France S.A.).
- [3] Julien Bok, « semiconducteurs », Encyclopedia Universalis, Paris, 2014.
- [4] <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/38/Silicon2.jpg>.
- [5] [http://www.semiwafer.com/images/20170913\\_100824.jpg](http://www.semiwafer.com/images/20170913_100824.jpg).
- [6] Tararbit Abderahmane, Etude sur les différentes propriétés des semi-conducteurs (Si, Ge, SiC, GaAs, NGe), Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou
- [7] H. Mathieu, physique des semiconducteurs et des composant électroniques, édition Dunod .Paris (2009).
- [8 ] Alain Chovet, Pascal Masson, Cours de Physique des Semi-conducteurs.
- [9] Ouadah Ouahiba, Mémoire de Magister en physique, Univ Abou Beker Belkaid-Tlemcen
- [10] G. Haacke, *Ann. Rev. Mater. Sci.* (1977) 73.
- [11] Athmane Tadjine, Structure électronique et propriétés de réseaux cohérents de nanocristaux semi-conducteurs, thèse de Doctorat, Université, Lille, 2018
- [12] louazani ahmed, Mémoire de Master en physique, Univ Dr. Tahar Moulay de Saida
- [13] Bahi Wafa. Les semi-conducteurs binaires utilisés dans la composante optoélectronique.
- [14] E.M. Bachari, G. Baud, S. Ben Amor, M. Jacquet, *Thin Solid Films*, (1999)165-172

- [15] Refice Fatima Zohra, Mémoire de Master en physique, Univ Mohamed Boudiaf M'sila, 23 / 05 / 2017.
- [16] S. Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur », Wiley, Chichester, (2009).
- [17] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Configuration\\_%C3%A9lectronique\\_par\\_%C3%A9l%C3%A9ment\\_chimique](https://fr.wikipedia.org/wiki/Configuration_%C3%A9lectronique_par_%C3%A9l%C3%A9ment_chimique).
- [18] R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski, et M. Ilegems, Phys. Rev. B 4, 1211 (1971).
- [19] N. Baghdadli, these de magister, Univ. Abou-Bakr Belkaid, TLEMCEM. (2010).
- [20] F. Abelés, « Optical Properties of Solids», North-Holland Publishing Company (1972).
- [21] Mezrag Fadila, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteur, thèse de Doctorat, 2012, Université, BISKRA.
- [22] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21.
- [23] F. Mezrag, N Bouarissa, M Boucenna and L Hannachi Phys. Scr. 82 (2010) 035702.
- [24] Karima Guerra, Mémoire Master de en physique, Univ Mohamed Boudiaf M'sila, Juin 2016.
- [25] G. Roosen, «Matériaux semi-conducteurs III-V, II-VI et nitrures pour L'optoélectronique», Ed. Hermes Science (2003).

*Chapitre II*  
*Semiconducteurs nanostructurés*

## ***Chapitre II***                      ***Semiconducteurs nanostructurés***

### **II-1 Introduction**

Les matériaux semiconducteurs possèdent un champ d'application très élargi, ils sont actuellement utilisés dans plusieurs composants électroniques très importants.

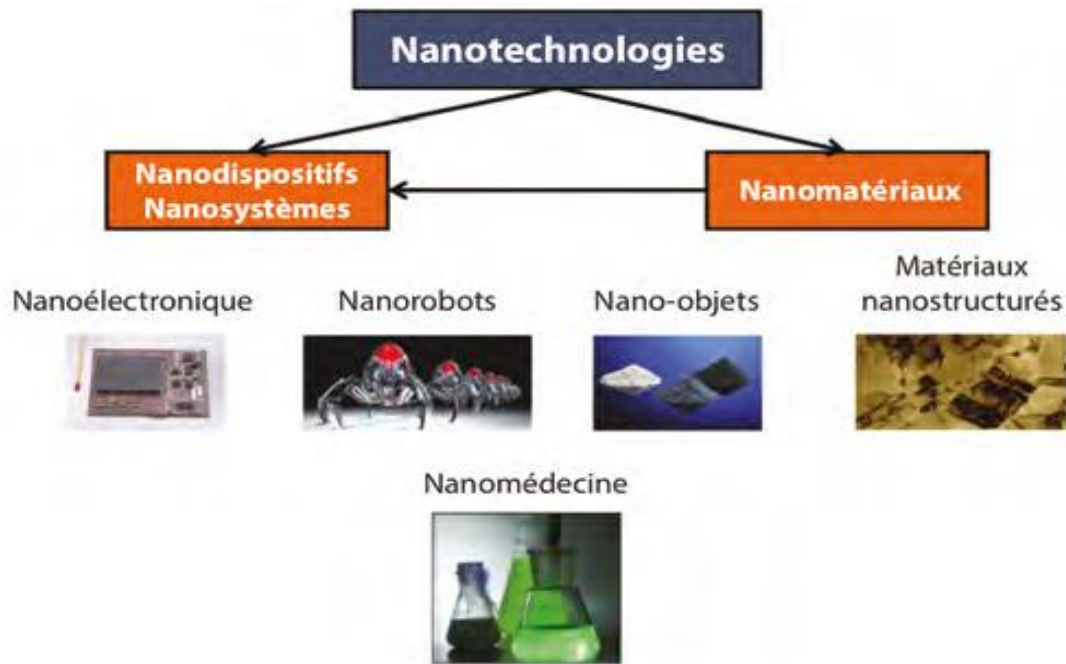
Les nanosciences regroupent les disciplines scientifiques qui permettent de comprendre et de prévoir les nouvelles propriétés de ces matériaux. Les nanomatériaux constituent les briques élémentaires des matériaux de future [1]. De nos jours les semiconducteurs nanostructurés présentent un intérêt technologique très intéressant vu les nouvelles propriétés qu'ils renferment à l'échelle nanométrique et leurs nombreuses applications. Dans ce chapitre nous étudions les nanomatériaux semiconducteurs, et le confinement quantique ainsi que son effet sur les propriétés électroniques, optiques et diélectriques. Pour se faire nous allons donner quelques définitions.

### **II-2 Définitions**

#### **II-2-1 Nanotechnologie**

Les nanotechnologies sont les techniques permettant de créer des matériaux ou des objets ou des systèmes qui font appel à de nouvelles propriétés qui découlent de ces dimensions nanométriques [1].

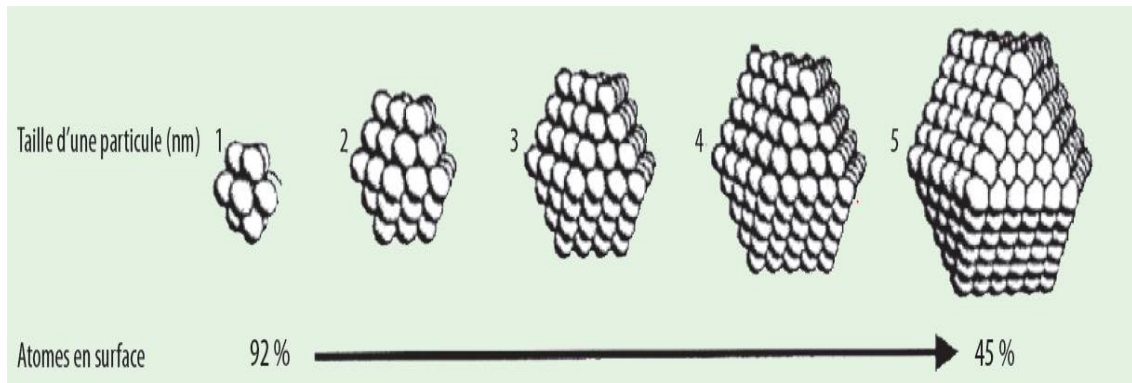
Les nanotechnologies reposent sur la connaissance et la maîtrise de l'infiniment petit. Elles constituent un champ de recherche et de développement multidisciplinaire impliquant la fabrication de nouveaux matériaux et de nouveaux dispositifs à partir d'outils ou de techniques permettant de structurer la matière au niveau atomique, moléculaire ou supramoléculaire. Les échelles caractéristiques des nanotechnologies vont de 1 à 100 nanomètres [3], le terme nanotechnologie est présenté dans un article intitulé Engins de création par Eric Drexler en 1986.



**Figure II-1** Des nanotechnologies aux nanomatériaux et aux nanodispositifs [2].

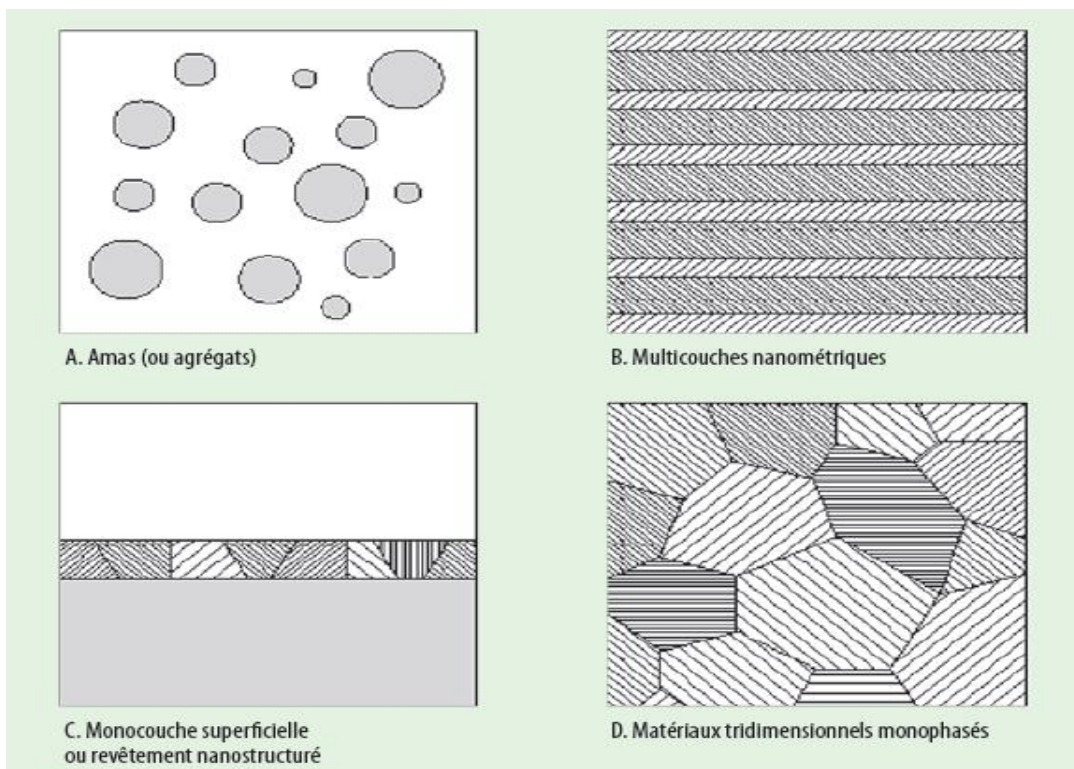
## II-2-2 Nanomatériaux

Un nanomatériau est constitué de nano-objets, dont l'une des dimensions est comprise entre 1 nm ( $10^{-9}$  m) et 100 nm, et qui présentent de ce fait même de nombreuses propriétés physiques (optiques, catalytiques, mécaniques, magnétiques, thermiques, de conductivité, etc.) que ne possèdent pas les objets de plus grande taille. La structuration des matériaux à l'échelle nanométrique entraîne une augmentation importante des surfaces d'échanges, ce qui induit une réactivité élevée entre le matériau et son environnement. Par exemple, si l'on divise une particule millimétrique en plusieurs particules nanométriques, la surface développée pour la même quantité de matière passe de  $6\text{mm}^2$  à  $6\text{m}^2$ . À travers ce cas, on imagine aisément que toutes les réactivités de surfaces sont multipliées. Par ailleurs, une diminution de la taille des particules conduit à une augmentation de la proportion des atomes en surface par rapport à ceux situés dans le volume. Or, ces atomes surfaciques ne possèdent pas la même configuration électronique, et le pourcentage d'atomes en surface d'une particule nanométrique peut dépasser 90 % [4] (Figure II-2).



**Figure II-2** Proportion d'atomes en surface en fonction de la taille d'une particule [5].

Les nanomatériaux manufacturés sont généralement classés en quatre familles (Figure II-3)[5]: Les amas ou agrégats de nanoparticules, les multicouches nanométriques, les monocouches superficielles et les matériaux tridimensionnels nanostructurés.

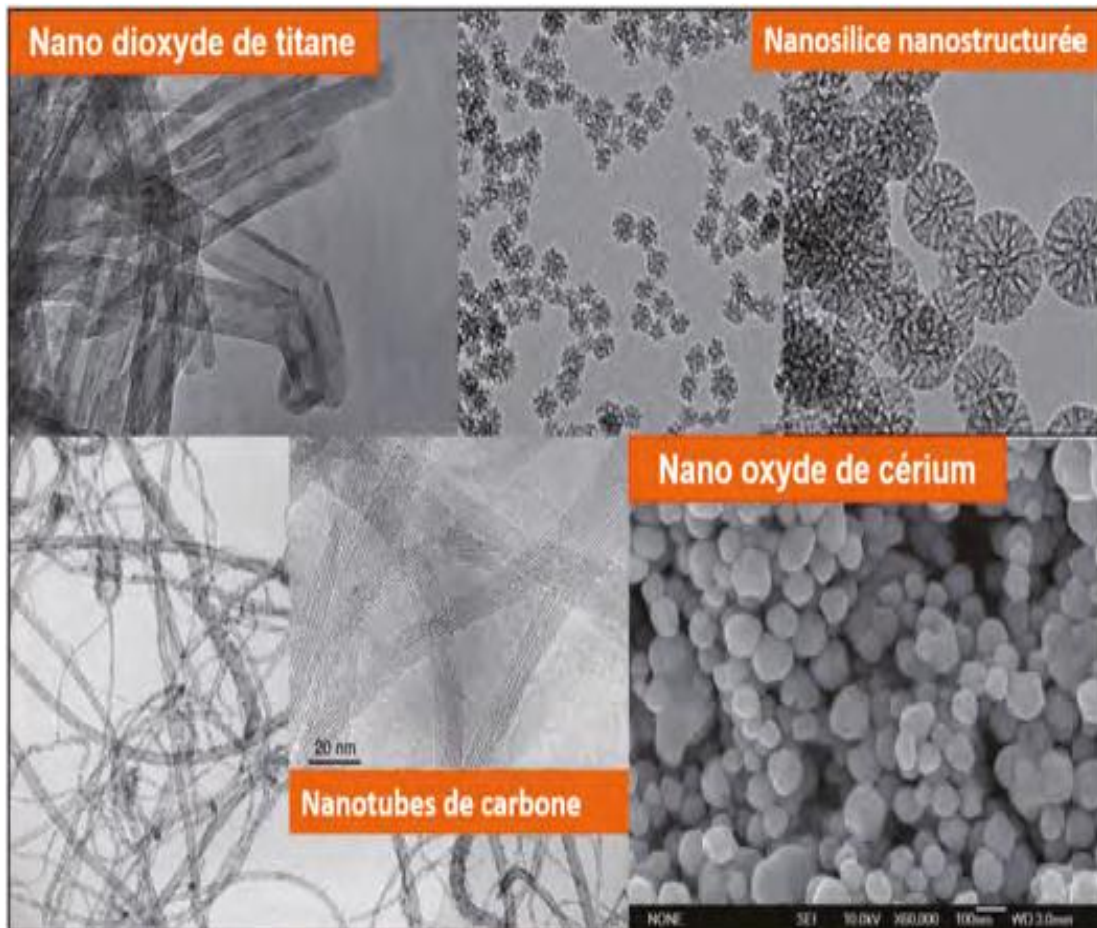


**Figure II-3** Classification des nanomatériaux selon R.W. Siegel [6].

### II-2-3 Nano-objets

Un nano-objet est un objet qui a une, deux ou trois dimensions externes à l'échelle nanométrique, c'est-à-dire entre 1 et 100 nanomètres, une nanoparticule 3D, une nan-plaquette 2D, un nanotube ou nanofibre 2D [2].

Nous sommes tous exposés aux nano-objets, citons les nanoparticules de dioxyde de titane  $\text{TiO}_2$  que l'on trouve dans les peintures, les cosmétiques et crèmes de protection solaire, l'oxyde de cérium  $\text{CeO}_2$  utilisé dans les pots catalytiques des automobiles, les nanosilices nanostructurées (25 à 50 nm) et certains types de nanotubes de carbone pouvant atteindre en longueur plusieurs microns [2].



**Figure II-4** Exemples de nano-objets : nano  $\text{TiO}_2$  , nano  $\text{CeO}_2$  , nano  $\text{SiO}_2$  , nanotube de carbone [2].

## II-2-4 Nanoparticules

Dans le mot nanoparticule le terme nano veut dire ( $1 \times 10^{-9}$ ) mètre, les nanoparticules sont constituées par pas plus de  $10^6$  atomes, leurs propriétés sont différentes à celles des mêmes atomes liées entre eux pour former des matériaux massifs. Ils sont généralement considérés comme un nombre d'atomes ou molécules reliées entre eux avec un rayon inférieur à 100 nm, vue comme une subdivision du matériau massif, nous pouvons les définir d'une façon pratique comme étant un agrégat ou un ensemble d'atomes dont les dimensions sont comprises entre 1 et 100 nm. La figure II-5 schématise une nanoparticule de CdSe : (a) a surface non couverte et (b) a surface couverte par ZnS [7].

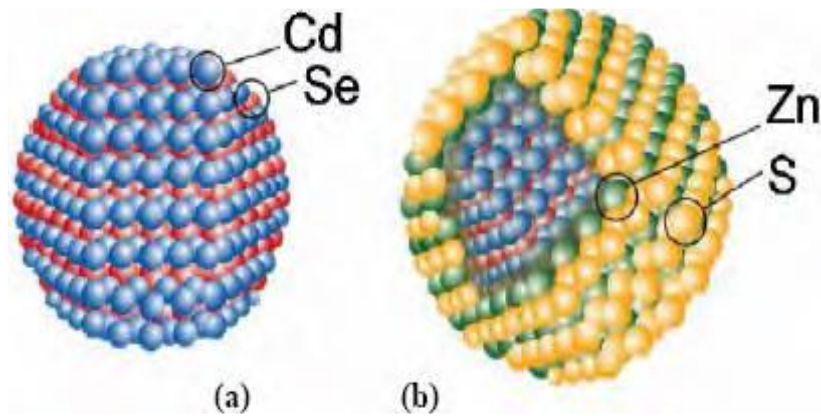


Figure II-5 Schéma des nanoparticules de CdSe et ZnS [8].

## II-3 Différent types des nanomatériaux

Un nanomatériau est constitué de nano-objets dont la taille est comprise entre (1 et 10 nm) qui présente des propriétés spécifiques à l'échelle nanométrique. Ces matériaux peuvent être regroupés selon trois familles de produits [9].

### II-3-1 Matériaux nanochargés ou nanorenforcés

Ces matériaux sont élaborés par incorporation de nano-objets dans une matrice organique ou minérale afin d'apporter une nouvelle fonctionnalité ou de modifier des

propriétés mécaniques, optiques, magnétiques ou thermiques. Les nano-composites en sont un exemple [10].

### **II-3-2 Matériaux nanostructurés en surface**

Ces matériaux sont recouverts soit d'une ou plusieurs nanocouches, soit de nanoparticules qui forment un revêtement bien défini, permettant de doter la surface de propriétés (résistance à l'érosion, résistance à l'abrasion, hydrophilie, etc.) ou de fonctionnalités nouvelles (adhérence, dureté, aspect, etc.) [11].

### **II-3-3 Matériaux nanostructurés en volume**

Ces matériaux possèdent une structure intrinsèque nanométrique qui leur confère des propriétés physiques particulières. Les nano-objets sont, dans ce cas, les éléments constitutifs du matériau massif [12].

## **II-4 Nanomatériaux semi-conducteurs**

Dans les nanomatériaux semi-conducteurs, la différence du substrat est un facteur clé pour figurer en tête de liste des matériaux pour la recherche scientifique et leur polyvalence dans les appareils intelligents. Les lacunes telles que l'InAs et le GaAs sont des composants optiques essentiels utilisés dans les DVD, en particulier dans les semi-conducteurs III-V et II-V.

## **II-5 Le confinement Quantique**

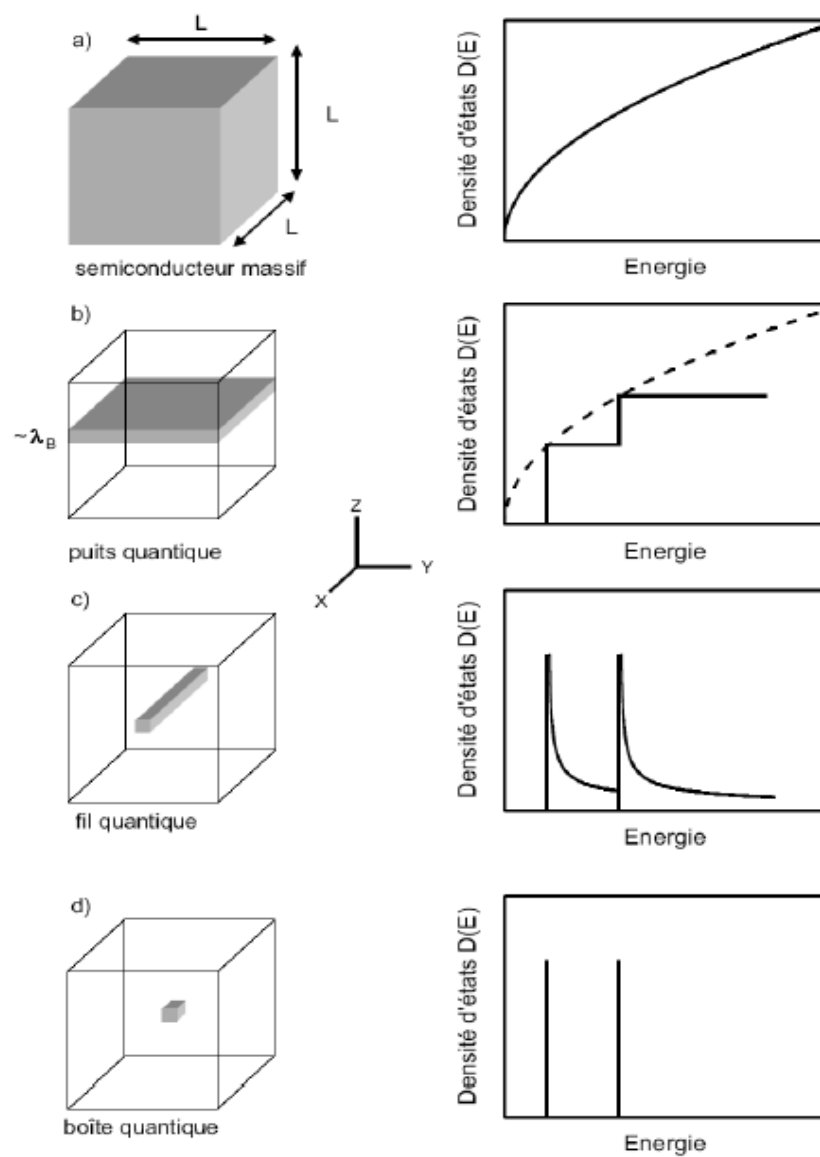
Dans un semi-conducteur de type non dopé la structure électronique présente une bande interdite, entre deux autres bandes nommées bande de valence et bande de conduction, Il est possible de transférer un électron de la bande de valence vers la bande de conduction par absorption d'un photon, à la suite de la réaction de coulomb, le trou apparaît.

Dans un matériau semi-conducteur, le confinement quantique selon Felix Bloch déterminé par l'onde de Bloch est fonction des dimensions des cristaux ou si la taille des cristaux devient inférieure à deux fois la taille du rayon de l'exciton de Bohr (le rayon

de Bohr est la longueur caractéristique séparant l'électron du proton), ce qui conduit au confinement quantitatif provoqué par le stress sur les excitons.

### II-5-1 Puits, fils et boîtes quantiques

En puits quantiques, il y a deux degrés de liberté, ce qui signifie que le mouvement est sur deux directions (surface) et que l'autre direction est quantifiée (confinement 1D), alors pour les fils quantiques le mouvement est sur une seule direction (confinement 2D), mais dans le cas d'un point quantique les trois directions sont quantifiées (confinement 3D) comme le montre la figure II-6.



**Figure II-6** Divers types de confinements [13]

### II-5-2 Excitons en points quantiques

On appelle exciton une particule formée par un électron et un trou liés entre eux par une interaction coulombienne. Le mouvement des deux particules est corrélé par cette interaction et le couple peut se déplacer comme une seule entité à travers le cristal. Quand cette interaction est forte, comme dans les cristaux ioniques, l'exciton est appelé exciton de Freukel. Par contre dans la plupart des semi-conducteurs l'interaction coulombienne est faible et l'exciton est connu sous le nom d'exciton de Wannier. L'exciton peut se déplacer librement dans le cristal ou interagir avec les impuretés et les défauts du réseau qui peuvent le capturer, on parle dans ce cas d'exciton lié. Cette particule est responsable de l'apparition de pics d'absorption très intenses dans la bande interdite des matériaux semiconducteurs [14].

L'Hamiltonien total décrivant une paire électron-trou (exciton) dans un PQ est donné par:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 + V_{\text{conf}} + V_{\text{coul}} \quad \text{II-1}$$

$$\text{Avec } V_{\text{conf}} = \Delta E_c - \Delta E_v \quad \text{II-2}$$

$$\text{Est } V_{\text{coul}} = -\frac{e^2}{\epsilon_0 |r_e - r_h|} \quad \text{II-3}$$

$V_{\text{conf}}$  : Le potentiel de confinement.

$\Delta E_c$  : La discontinuité de la bande de conduction.

$\Delta E_v$  : La discontinuité de la bande de valence.

$V_{\text{coul}}$  : Le potentiel Coulombien.

$\epsilon_0$  : La constante diélectrique du milieu.

Pour les PQ infini la fonction d'onde est divisée en deux parties :

$$\psi(r) = \Phi_n^{xy}(x, y) \zeta_{ei}(z_e) \zeta_{hj}(z_h) \quad \text{II-4}$$

$$\text{avec: } \Phi_n^{xy}(x, y) = u_{c0} u_{v0} \Phi_n^{xy}(x, y) e^{ik_c^{xy} R_{xy}} \quad \text{II-5}$$

$$R = \frac{m_e x_e + m_h x_h}{m_e + m_h} \quad \text{II-6}$$

Et  $\Phi_n^{xy}$  la fonction enveloppe de l'exciton dans le plan xy, et  $u_{c0}$  et  $u_{v0}$  sont les fonctions de Bloch. R, représente le centre de masse de l'exciton.

La résolution de l'équation de Schrödinger dans le plan du mouvement (X, Y) donné, dans ce cas, est une série de pics excitoniques situés à :

$$E_n^{2d} = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_r L_z^2} - \frac{E_B}{(m-1/2)^2} \quad \text{II-7}$$

avec n et m des entiers et :

$$E_B = \frac{e^4 m_r}{2\epsilon_0^2 \hbar^2} \quad \text{II-8}$$

Le deuxième terme de l'équation représente l'énergie de confinement de l'exciton, et le troisième terme qui résulte de l'interaction coulombienne est l'énergie de liaison de l'exciton à deux dimensions la masse réduite définie par :

$$1/m_r = 1/m_e + 1/m_h \quad \text{II-9}$$

Le troisième terme dans l'équation donne :

$$E_B^{2d} = 4E_B = 4E_B^{3d} \quad \text{II-10}$$

L'énergie de liaison de l'exciton est quatre fois supérieure à celle à 3D, quand le potentiel de confinement est infini ou à deux dimensions.

Le rayon de Bohr à deux dimensions est donné par :

$$a_B^{2d} = a_b^{3d} (n - 1/2) \quad \text{II-11}$$

## II-6 Modélisation de l'effet quantique de taille

### II-6-1 Modélisation

L'effet quantique de taille dans un semiconducteur présenté est d'augmenter la bande interdite en raison du nombre d'atomes et de modifier les propriétés électronique

et optique des nanoparticules, l'exemple le plus simple est une particule dans une boîte, on donne l'équation de l'énergie cinétique :

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2m} (K_X^2 + K_Y^2 + K_Z^2) \quad \text{II-12}$$

Avec  $K_X$ ,  $K_Y$ ,  $K_Z$  les projections du vecteur d'onde  $K$  avec :

$$K_X = \frac{\pi n_X}{L_X}$$

$$K_Y = \frac{\pi n_Y}{L_Y}$$

$$K_Z = \frac{\pi n_Z}{L_Z}$$

La différence entre deux valeurs permises de l'énergie est donnée par l'expression :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{1}{L_X^2 + L_Y^2 + L_Z^2} \right) \quad \text{II-13}$$

L'énergie cinétique d'une particule de masse  $m$  dans une boîte de dimension  $d$  est :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{1}{d^2} \right) \quad \text{II-14}$$

L'énergie minimum de la particule dans un boîte quantique est donnée par :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \quad \text{II-15}$$

### II-6-2 Effet sur les propriétés électroniques

La distance entre l'électron et le trou est appelé le rayon de Bohr ( $r_B$ ) de l'exciton, la masse du proton est beaucoup plus grand que la masse des trous, la formule suivante exprime le rayon de Bohr

$$r_B = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{e^2} \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right) \quad \text{II-1}$$

Si le rayon ( $R$ ) du point quantique (Qdot) s'approche à  $r_B$  soit  $R \leq r_B$ , les mouvements des électrons et des trous sont confinés spatialement à des dimensions de la boîte quantique, ce qui provoque une augmentation de l'énergie de transition excitonique et le décalage vers le bleu observé dans la bande d'absorption et de la luminescence. Le rayon de Bohr de l'exciton est une valeur de seuil et l'effet du confinement devient important lorsque le rayon de point quantique est plus petit. Pour les petits points quantiques, l'énergie de liaison de l'exciton et l'énergie de liaison de bi-exciton (l'énergie d'interaction exciton-exciton) est beaucoup plus grande que dans les matériaux à l'état massif [15].

Ce phénomène est une conséquence directe de la mécanique quantique : Les niveaux électroniques sont confinés dans un puit de potentiel dont la taille est proche des longueurs d'onde typiques des transitions électroniques. En diminuant suffisamment la taille des particules des semi-conducteurs, le seuil d'absorption est décalé vers les plus hautes énergies, la bande de gap devient plus large et la structure électronique est affectée [16].

Il existe plusieurs méthodes de calcul des structures électroniques, la plus connue étant la méthode de la masse effective.

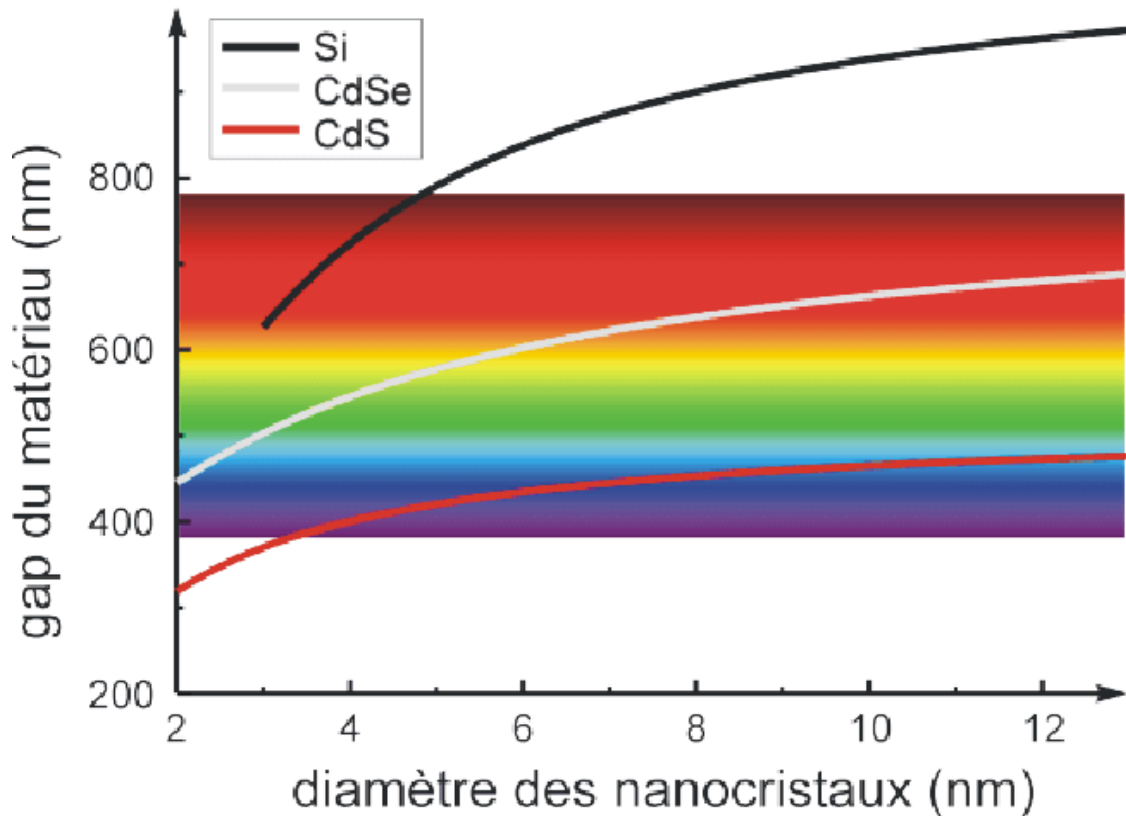
Dans cette approximation, les fonctions d'onde des porteurs sont le produit d'une fonction de Bloch variant faiblement dans l'échelle des paramètres du réseau et d'une fonction enveloppe qui varie, elle aussi, faiblement. L'énergie cinétique de l'électron et du trou est quantifiée par un potentiel sphérique (pris comme une perturbation) d'un puits de potentiel de rayon  $R$  [17] et leur interaction est prise en compte par le potentiel coulombien.

### II-6-3 Effet sur les propriétés optiques

Pour étudier l'effet sur les propriétés optique, on parle de l'absorption optique dans un semiconducteur, cette absorption est due à l'exciton quand il est confiné ça veut dire le rayon de Bohr effectif de l'exciton est plus grand que la taille de la particule, alors l'exciton est confiné et son énergie augmente.

La figure (II-7) montre, par exemple, la variation du gap d'absorption pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des nano cristaux. La modification

des propriétés optiques avec la réduction de la dimension des particules a été également observée dans les nanométaux pour les quels, le phénomène le plus marquant est la modification des bandes d'absorption en fonction de la taille [18].

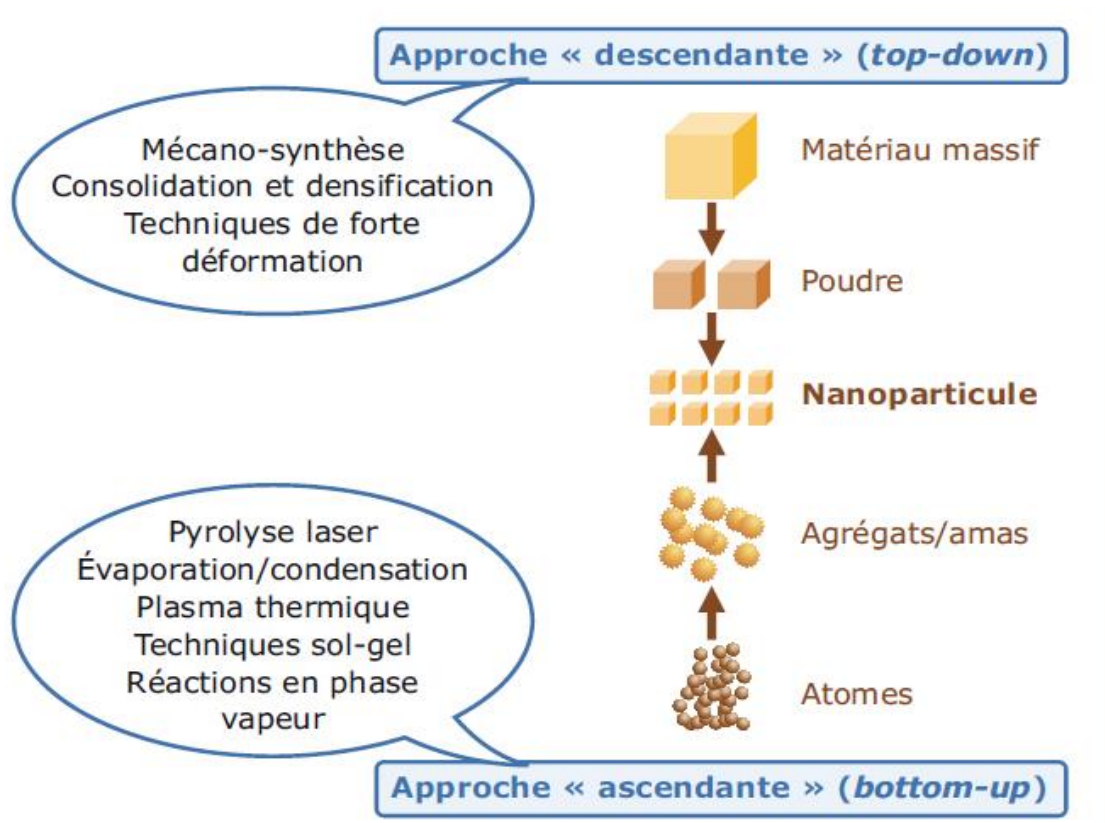


**Figure II-7** Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des Nanocristaux [19].

## II-7 Méthode d'élaboration

### Méthode top down vs bottom up

Minimiser les granules du matériau, c'est-à-dire descendre aux dimensions des dimensions du haut vers le bas ou les collecter, c'est-à-dire la montée aux dimension des dimensions du bas vers le haut (figure II-8), il devient clair que la stratégie des deux méthodes est opposée, la première méthode étant basée sur la réduction des dimensions des objets ou des énormes granules dont les dimensions atteignent plusieurs centaines ou dizaines de milliers de nanomètres et les atteignent pour les grains ultrafins, ils font quelque nanomètres de diamètre, ce qui est inférieur à 100 nm comme la figure II-8 le montre.



**figure II-8** Illustration représentant les approches pour atteindre des nanostructures [20].

### Procédés par voie physique

le cas de l'élaboration des nanoparticules par voie physique en phase vapeur, le matériau déposé sous forme solide par chauffage ou bombardement, dans cette méthode il n'y a pas de réactions chimiques, mais plutôt que des procédés:

- Pulvérisation cathodique
- L'ablation laser
- Par effet joule
- Faisceau électrons

### Procédés par voie chimique

L'élaboration des nanoparticules par voie chimique en phase vapeur à partir de réaction chimiques activée se fait soit par énergie thermique à pression atmosphérique, soit par une assistance de type plasma radiofréquences ou micro-ondes, ou type laser.

### **Implantation ionique**

Une technique largement utilisée dans l'industrie des semiconducteurs massifs a été appliquée au niveau des nanosemiconducteurs. Cette méthode consiste à accélérer des ions (10-100keV) pour les faire pénétrer dans un substrat. Un traitement thermique après l'implantation conduit à l'apparition de particules dont la taille peut être de l'ordre du nanomètre. Plusieurs éléments ont été implantés dans une matrice de silice ou de verre, tels que (Si, Ge, Co, Ni, Zn, Te) pour former des nano matériaux métalliques (Co, Ni) ou des nanosemiconducteurs, mono métalliques (Si, Ge) ou binaires (ZnTe, CdS) [21].

### **Méthode sol –gel**

La technique sol gel conduit à l'élaboration des nanoparticules. Le point de départ de la synthèse est un mélange de précurseurs ioniques (les sels) ou moléculaires (les oxydes) en solution, nommé sol. Celui-ci est le siège de réactions chimiques d'hydrolyse permettant d'engendrer des fonctions réactives de polymérisation qui conduit à la gélification [22]. Cette technique est couramment utilisée pour fabriquer des verres, céramiques et des poudres. Les paramètres influençant les réactions sont le pH, la température et la concentration de réactifs, le premier paramètre étant déterminé. En effet, un pH acide accélère l'hydrolyse et ralentit la gélification, alors qu'un pH basique accélère la condensation [23].

### **Méthodes mécaniques :**

La synthèse à l'état solide implique généralement une étape de traitement thermique (pour parvenir à la structure cristalline désirée), suivie par broyage. Alors qu'il est généralement admis qu'il est difficile à obtenir une taille moyenne des particules inférieure à 100 nm, les innovations récentes par les sociétés établies dans l'industrie peuvent prouver le contraire. En particulier le Système Netzsch LMZ-25 ZETA II et Dyno-Mill ECM peut provoquer l'usure mécanique et réduire ainsi la taille des particules. Il est affirmé que les nanoparticules aussi petites que 30 nm peuvent être produites en utilisant le broyage des particules de taille de 200  $\mu\text{m}$  [24].

## II-8 Applications des nanomatériaux semiconducteurs

### Quantum willinfrared (QWIP)

Quantum willinfrared (QWIP) est une nouvelle version d'appareil photo, il s'agit d'un photodétecteur infrarouge à puits quantique, premier modèle développé en mars 2003, le fonctionnement du (QWIP) repose sur une hétérostructure de semiconducteurs, basé sur une multicouche de GaAs, chacune des couches de GaAs est extrêmement fine.

### Photovoltaïques

Les nouveaux types de cellules solaires à points quantiques sont plus efficaces que les cellules en silicium et ont été améliorés avec des points quantiques.

L'efficacité opérationnelle peut être considérablement améliorée en utilisant des points quantiques. Dans les cellules solaires traditionnelles à jonction p-n en silicium, lorsqu'un photon frappe la cellule solaire avec une énergie supérieure à celle de la bande interdite du silicium, il excite un seul électron avec une énergie équivalente à celle de la bande interdite du silicium. Mais lorsqu'un photon frappe la cellule solaire avec une énergie inférieure à la bande interdite du silicium, il est transmis par le silicium et ne contribue pas à la puissance de sortie. L'efficacité solaire théorique maximale pour une cellule solaire à jonction p-n en silicium est de 33,7% [25].

Les points quantiques peuvent fournir une augmentation significative de l'efficacité, en utilisant des points de différentes tailles les uns sur les autres, avec les plus grandes bandes interdites en haut. Les photons entrants seront envoyés jusqu'à une couche avec une bande interdite plus petite que l'énergie des photons. Avec suffisamment de couches, chaque photon excite un électron avec une énergie très proche de la sienne, et seule une petite quantité d'énergie est gaspillée. À mesure que le nombre de couches se rapproche de l'infini, le rendement se rapproche d'une limite thermodynamique théorique de 86% [25].

**II-9 Conclusion**

On peut considérer la nanoscience comme un bâtiment composé de plusieurs étages, dont la base est le semi-conducteur, et la fin de ces étages est inconnue en raison du développement qui se déroule dans le domaine de l'électronique. Les nanomatériaux jouent un rôle majeur dans le développement et les études ultérieures, car la plupart des recherches sont dirigées vers eux, les méthodes de fabrication et la partie la plus difficile, comme les couches minces.

**Références bibliographiques citées dans le chapitre II :**

- [1] E. L. Wolf, Nanophysics and Nanotechnology An introduction to modern concepts in Nanoscience, Wiley Ed. (2004).
- [2] <https://www.mediachimie.org/ressource/les-nano-objets-un-avenir-prometteur-sous-contr%C3%B4le>.
- [3] HERVE-BAZIN B. « Les dangers des particules ultrafines ». Préventique sécurité, mars-avril 2005, pp. 12-16.
- [4] R. Etchart-Salas, B. Bergaya. L'enjeu des nanomatériaux, La Lettre du Pneumologue septembre-octobre (2008) 178-183.
- [5] GK. Schmidt, J. Klabunde. Nanoscale materials in chemistry. New York : John Wiley & sons 2001; 23-4.
- [6] RW. Siegel. Nanostructuredmaterials 3. 1993; 1.
- [7] Benariba Mohamed Lamine, Mémoire de Magister, Univ Mentouri de Constantine (2009).
- [8] CLEFS CEA - N° 52, Les nanocristaux semi-conducteurs fluorescents font leur gamme. Internet (ÉTÉ 2005).
- [9] D. Charlac'h, Y. Hemery. Etude prospective sur les nanomatériaux, DIGITIP synthèse, France (2004).
- [10] P.M. Ajayan, L. S. Schadler, P. V. Braun, "Nanocomposite Science and Technology", Wiley – VCH (2003).
- [11] Les Nanomatériaux, "Effet sur la santé de l'homme et sur l'environnement", AFSSET, France (2006).
- [12] Djeghboub wided, Mémoire de Magister en physique, Univ Univ Mentouri de Constantine (2010).
- [13] S. Carayon, Thèse de doctorat, Université Josèphe Fourier- Grenoble I (2005).

- [14] Ali Lanacer, Propriétés électroniques, Etude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d'InAs/InP, thèse de Doctorat, 2006, Université, Montréal.
- [15] V.I. Klimov, 'Mechanisms for photogeneration and recombination of multiexcitons in semiconductor nanocrystals: Implications for lasing and solar energy conversion', J. Phys. Chem. B 110 (34): 16827–45(2006).
- [16] Harieche Barkahoum, Thèse de doctorat Es-Sciences en physique, Université Mentouri de Constantine (2012).
- [17] Hurlmut Haug. Quantum theory of optical and electronic properties of semiconductors, Edit Singapore (1992).
- [18] C. Louis, Synthèse et caractérisation de nanoparticules hybrides à co gadolinium, Thesis, UCBL, Lyon I, (2004).
- [19] <http://pcml.univ-lyon.fr/raman/petites.html>.
- [20] [www.inrs.fr/risques/nanomateriaux.html](http://www.inrs.fr/risques/nanomateriaux.html).
- [21] E. Thune, Thèse de doctorat, Université de Poitiers (2001).
- [22] J. Butty, Y. Z. Hu, N. Peyghambarian, Y. H. Kao, J. D. Mackenzie, Appl. Phys. Letters 67 (1995) 18.
- [23] I. Wang, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier Grenoble1 (2002).
- [24] <http://www.inkworldmagazine.com/Feb042.htm>.
- [25] Iraqi journal of applied physics Vol.(14), No.(4), October-december 2018, P.24.

*Chapitre III*  
*Résultats et discussion*

**Chapitre III****Résultats et discussion****III -1 Introduction**

Vu l'épanouissement de la technologie, de l'information et des besoins de l'industrie, les composés semi-conducteurs III-V ont été un sujet de spéculation et d'extrapolation, en particulier à cause de leurs applications potentielles dans la réalisation et le développement des dispositifs optiques et optoélectroniques [1].

Notre travail se concentre sur l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des matériaux semiconducteurs III-V: GaAs, GASb, GaP, InP, InAs, AlAs et AlSb à l'échelle nanométrique pour voir l'effet du confinement quantique sur les propriétés étudiées, en effet cette étude est une modélisation numérique de leurs propriétés en question, tout en considérant que ce type de semiconducteurs se cristallisent dans une structure "Zinc Blende".

**III-2 Etude des 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 [2].

**III-2-1 Méthode du pseudopotentiel**

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 [3].

Ces facteurs de forme, initialement pris de la théorie, sont ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [4,5] dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée [2], de l'écart des niveaux d'énergie définit par :

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

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{exp} - E_{ij}^{cal} \quad \text{III-2}$$

$E_{ij}^{exp}$  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 pseudopotential empirique. Les valeurs des facteurs de forme sont modifiées par itération jusqu'à minimiser le  $\delta$  [4,5].

Dans la méthode du pseudopotential locale, ces facteurs de forme sont fonction du point pris de la zone de Brillouin [2].

Pour que les résultats semi empiriques reflètent fidèlement les résultats donnés par l'expérimentation, une interpolation quadratique a donné une grande priorité pour l'obtention d'un accord proche, entre la plus grande bande de valence et la plus basse bande de conduction au point choisi [2].

Les facteurs de forme du pseudopotential local symétriques et antisymétriques des composés binaires semiconducteurs III-V, sont présentés dans le tableau III-1, leurs paramètres de maille sont présentés dans le tableau III-2.

**Tableau III-1** Les facteurs de forme pseudopotentiels des composés GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP.

Composé	Facteurs de forme (Ryd)					
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
<i>GaAs</i> <sup>a)</sup>	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01
<i>InAs</i> <sup>b)</sup>	-0.217669	0.011	0.041633	0.054731	0.039485	0.024
<i>InP</i> <sup>c)</sup>	-0.213870	0.0	0.070502	0.088816	0.06	0.03
<i>GaSb</i> <sup>a)</sup>	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01
<i>AlAs</i> <sup>d)</sup>	-0.212694	0	0.092750	0.068833	0.05	-0.0075
<i>AlSb</i> <sup>d)</sup>	-0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	0.004544
<i>GaP</i> <sup>e)</sup>	-0.210510	0.03	0.072244	0.132668	0.07	0.02

<sup>a)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [6].

<sup>b)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [7].

<sup>c)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [8].

<sup>d)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [9].

<sup>e)</sup> Valeur théorique indiquée dans Ref [10].

**Tableau III-2** Les paramètres de maille des composés binaires semiconducteurs III-V

	GaAs	InAs	InP	GaSb	AlAs	AlSb	GaP
Paramètres de maille $a$ (Å) <sup>a)</sup>	5.65330	6.0583	5.8690	6.09593	5.66139	6.1355	5.4508

<sup>a)</sup> Valeur théorique indiquée dans Ref [11].

Les valeurs des facteur de forme symétriques ( $V_S$ ) et antisymétriques ( $V_A$ ) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs III-V sont utilisées pour calculer les gaps énergétiques en massif ( $E_F^\Gamma$ ,  $E_F^X$ ,  $E_F^L$ ), il est à noter que le résultat a également été obtenu en utilisant les paramètres de maille après les avoir convertis en unité uma, nos résultats sont en très bon accord avec les valeurs théoriques comme indiqué dans le tableau III-3.

**Tableau III-3** Les valeurs des gaps d'énergie en massif théoriques et calculés des composés semiconducteurs (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP).

Composés	Valeur des gaps d'énergie théorique (eV)			Valeur des gaps d'énergie calculés (eV)		
	$E_F^\Gamma$	$E_F^X$	$E_F^L$	$E_F^\Gamma$	$E_F^X$	$E_F^L$
GaAs	1.42 <sup>a)</sup>	1.81 <sup>a)</sup>	1.72 <sup>a)</sup>	1.42	1.81	1.72
InAs	0.36 <sup>b)</sup>	1.37 <sup>b)</sup>	1.07 <sup>b)</sup>	0.36	1.37	1.07
InP	1.35 <sup>c)</sup>	2.21 <sup>c)</sup>	2.05 <sup>c)</sup>	1.35	2.21	2.05
GaSb	0.72 <sup>d,e)</sup>	1.02 <sup>e)</sup>	0.78 <sup>e)</sup>	0.70	0.97	0.75
AlAs	2.95 <sup>f)</sup>	2.16 <sup>f)</sup>	2.36 <sup>f)</sup>	2.95	2.15	2.36
AlSb	2.30 <sup>e)</sup>	1.615 <sup>e)</sup>	2.211 <sup>e)</sup>	2.30	1.62	2.21
GaP	2.78 <sup>g)</sup>	2.26 <sup>g)</sup>	2.6 <sup>g)</sup>	2.78	2.25	2.59

<sup>a)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [12].

<sup>b)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [11].

<sup>c)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [8].

<sup>d)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [13].

<sup>e)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [14].

<sup>f)</sup>Valeur théorique indiquée dans Ref [15].

<sup>g)</sup> Valeur théorique indiquée dans Ref [16].

### III-2-2 Méthode de la masse effective

Le modèle de la masse effective (approximation de la masse effective) est utilisé dans le but de déterminer le gap énergétique et l'énergie d'excitation donnée par la formule suivante:

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2} \left[ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] \quad \text{III-3}$$

$E_g^0$ : est la largeur de la bande interdite (gap) d'un semiconducteur massif, étant donné que le point quantique est sphérique de rayon R,  $m_e^*$  et  $m_h^*$  sont les masses effectives respectives de l'électron et du trou. Cette expression ne donne pas de résultats en accord avec l'expérience. Afin de perfectionner ce modèle et rendre compte des résultats expérimentaux, les théoriciens ont rajouté un terme supplémentaire,  $V_C$  qui représente l'énergie Coulombienne de l'interaction de l'électron et du trou [10] :

$$V_C = -\frac{C e^2}{\epsilon R} \quad \text{III-4}$$

Où  $\epsilon$  est la constante diélectrique du matériau massif : c est une constante de l'ordre de 1,8 (1,8 [11] ; 1,786 [12]), dans ce cas l'équation III-3 devient :

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left[ \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] - \frac{1.8 e^2}{\epsilon a} \quad \text{III-5}$$

Où  $E_g^0$  est le gap énergétique du semiconducteur nanostructuré,  $E_g^0$  est le gap énergétique du semiconducteur massif, (a) est le rayon du point quantique,  $m_e^*, m_h^*$  étant respectivement les masses effectives de l'électron et du trou du semiconducteur massif et  $\hbar$  est la constante du Planck réduite.

Pour voir l'effet de confinement quantique sur les propriétés électroniques nous avons calculé le gap énergétique fondamental en fonction du rayon de point quantique (a) en (nm) pour les composés semiconducteurs III-V (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, Alsb, GaP) tout en utilisant les valeurs des gaps énergétiques théoriques (Tableau III-3) avec les valeurs des masses effectives de l'électron et du trou (Tableau III-4)

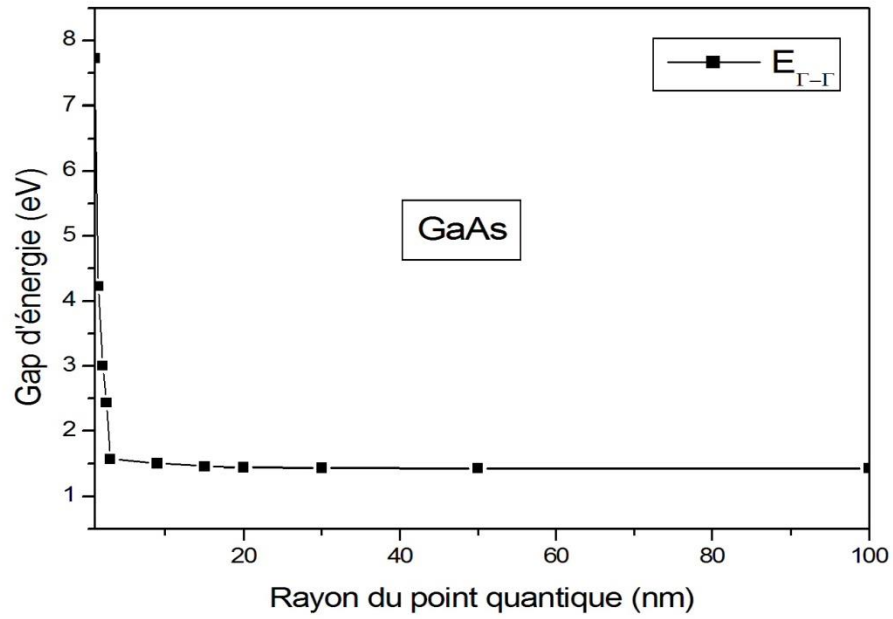
**Tableau III-4:** Les masses effectives des électrons et des trous

Composé	Masses effectives des électrons $m_e^*/m_0$ <sup>a)</sup>	Masses effectives des trous $m_h^*/m_0$ <sup>a)</sup>
GaAs	0.067	0.55
InAs	0.024	0.36
InP	0.07927	0.69
GaSb	0.039	0.37
AlAs	0.124	0.81
AlSb	0.14	0.9
GaP	0.114	0.52

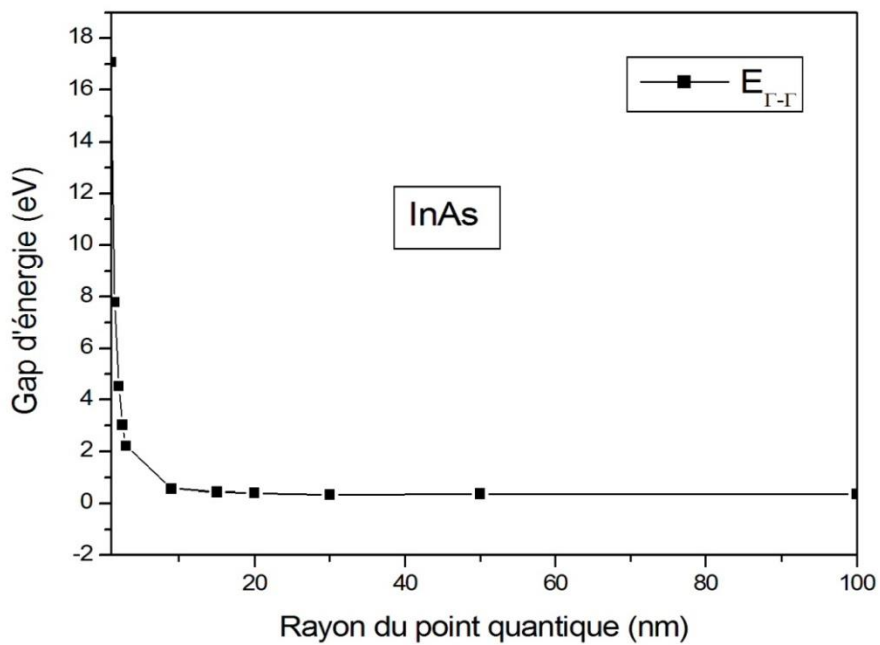
a) Réf. [11].

Il est à noter que nous avons calculé les gaps énergétiques pour une large gamme de rayon de point quantiques de faible à grande valeur allant de  $a = 1\text{nm}$  à  $a = 100\text{nm}$ , lorsqu'il atteint  $100\text{nm}$ , il atteint le massif (Bulk).

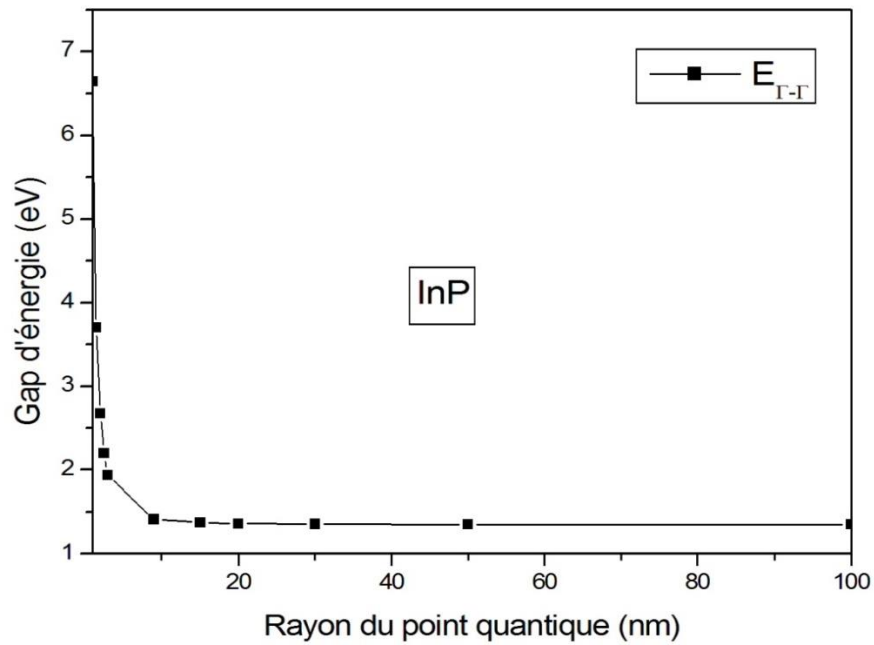
Les figures suivantes introduisent les variations du gap énergétique direct  $E_F^F$  pour les composés GaAs, InAs, InP et GaSb. Ces composés présentent un gap direct en massif, leur étude à l'échelle nanométrique montre une décroissance non linéaire de gap énergétique, autrement dit l'ouverture du gap  $E_F^F$  chaque fois que la taille en nano diminue, cela est dû à l'effet du confinement quantitatif sur le gap d'énergie, par contre ce gap diminue en allant vers le massif, nous remarquons aussi, qu'au voisinage de la valeur  $20\text{nm}$  du rayon du point quantique le gap énergétique est presque stable. Ce comportement est identique pour tous les composés semiconducteurs en question, mais il ne s'agit pas de la même valeur du gap, chaque matériau a sa valeur de gap bien déterminé.



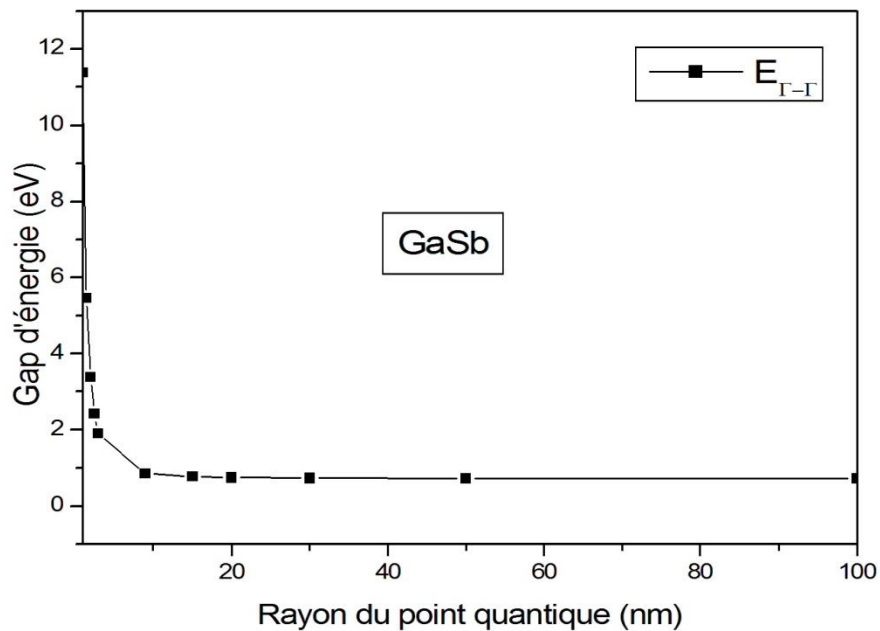
**Figure III-1** Variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^I$  en fonction du rayon du point quantique pour l'GaAs.



**Figure III-2** Variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^I$  en fonction du rayon du point quantique pour l'InAs.



**Figure III-3** Variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^F$  en fonction du rayon du point quantique pour l'InP.



**Figure III-4** Variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^F$  en fonction du rayon du point quantique pour l'GaSb.

Les équations des fits polynomiaux de deuxième ordre du gap  $E_F^\Gamma$  pour chaque composé semiconducteur nanostructuré sont données comme suit :

$$\text{Pour le GaAs : } E_F^\Gamma(a) = 3.72 - 0.11a + 9.13 \times 10^{-4}a^2 \quad \text{III-6}$$

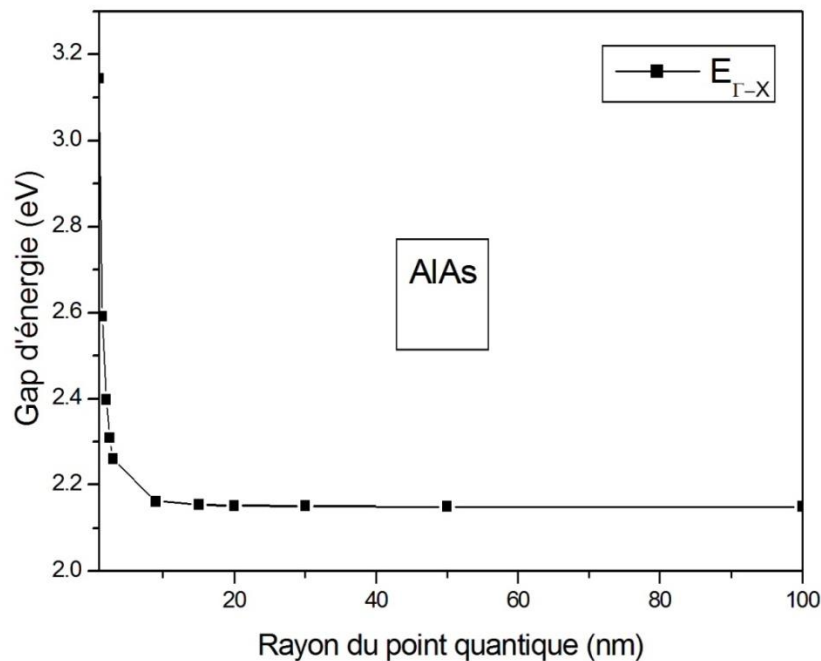
$$\text{Pour le InAs : } E_F^\Gamma(a) = 6.713 - 0.309a + 0.003 \times 10^{-4}a^2 \quad \text{III-7}$$

$$\text{Pour le InP : } E_F^\Gamma(a) = 3.36 - 0.10a + 7.95 \times 10^{-4}a^2 \quad \text{III-8}$$

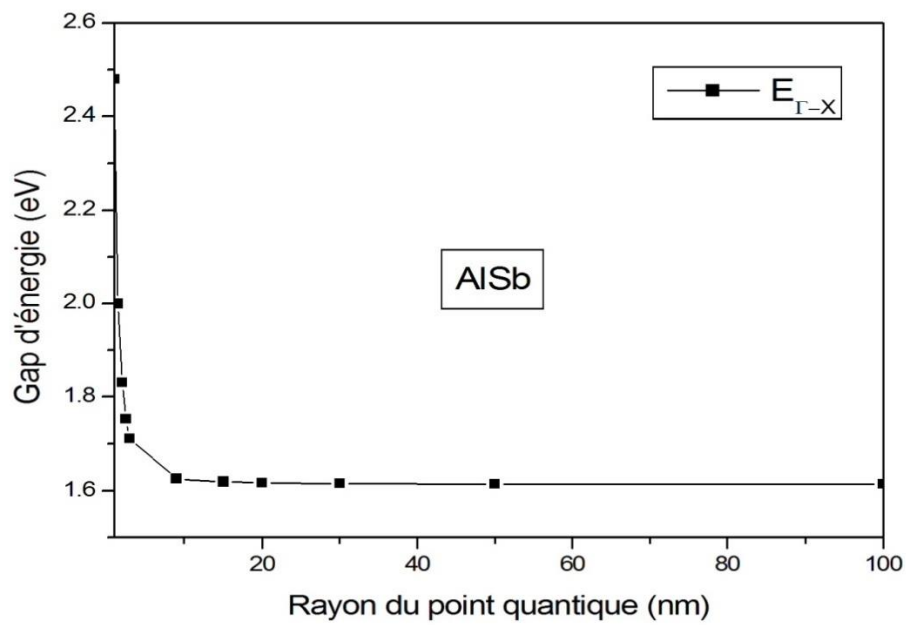
$$\text{Pour le GaSb : } E_F^\Gamma(a) = 4.771 - 0.198a + 0.002a^2 \quad \text{III-9}$$

Ces équations permettent une modélisation du gap  $E_F^\Gamma$  en fonction du rayon de point quantique.

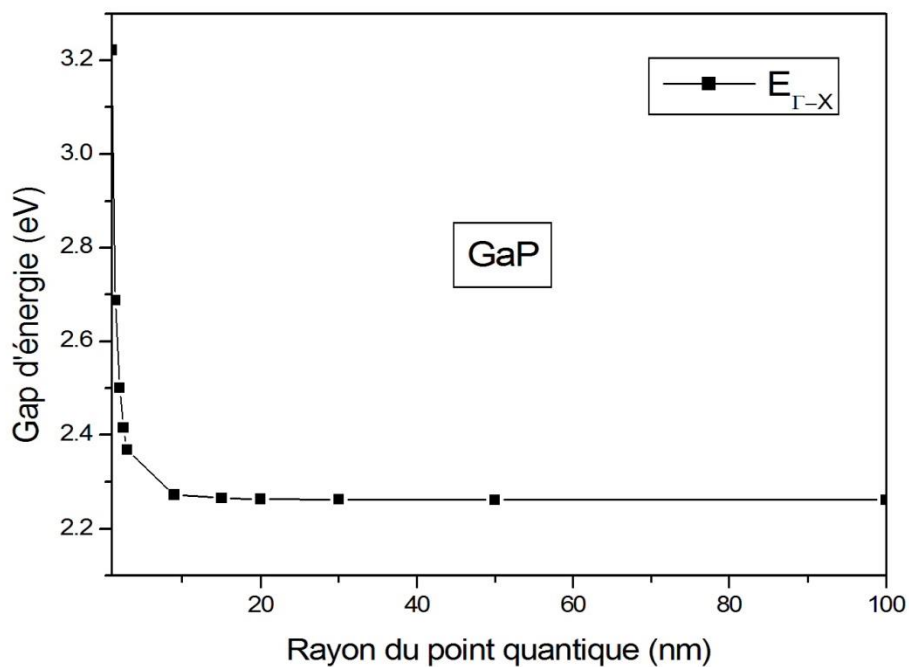
Pour les composés AlAs, AlSb et GaP présentent un gap de type indirect  $E_F^X$ , une représentation graphique de la variation de leur gaps énergétiques en fonction du rayon en nanomètre est illustrée sur les figures suivantes.



**Figure III-5** Variation du gap d'énergie  $E_F^X$  en fonction du rayon du point quantique pour l'AlAs.



**Figure III-6** Variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^X$  en fonction du rayon du point quantique pour l'AlSb.



**Figure III-7** Variation de gap d'énergie  $E_{\Gamma}^X$  en fonction du rayon du point quantique pour l'GaP.

Cela nous montre que, malgré la différence de la nature du gap d'énergie  $E_F^I$  (gap direct) pour le GaAs, InAs, InP et GaSb, et  $E_F^X$  (gap indirect) pour le AlAs, AlSb et GaP, nous avons le même comportement. La relation inverse entre le gap d'énergie le rayon du point quantique est aussi vérifié, l'augmentation du rayon, entraîne une diminution du gap d'énergie, et l'effet du confinement quantique sur le gap d'énergie apparaît ici. En conséquence, nous pouvons dire que cet effet est d'une grande importance pour influencer le reste des propriétés physiques des semi-conducteurs.

Les équations des fits polynomiaux de deuxième ordre des gaps indirect sont données comme suit :

$$E(a) = A + Ba + Ca^2 \quad \text{III-10}$$

C : est le paramètre de courbure du gap appelé aussi bande interdite.

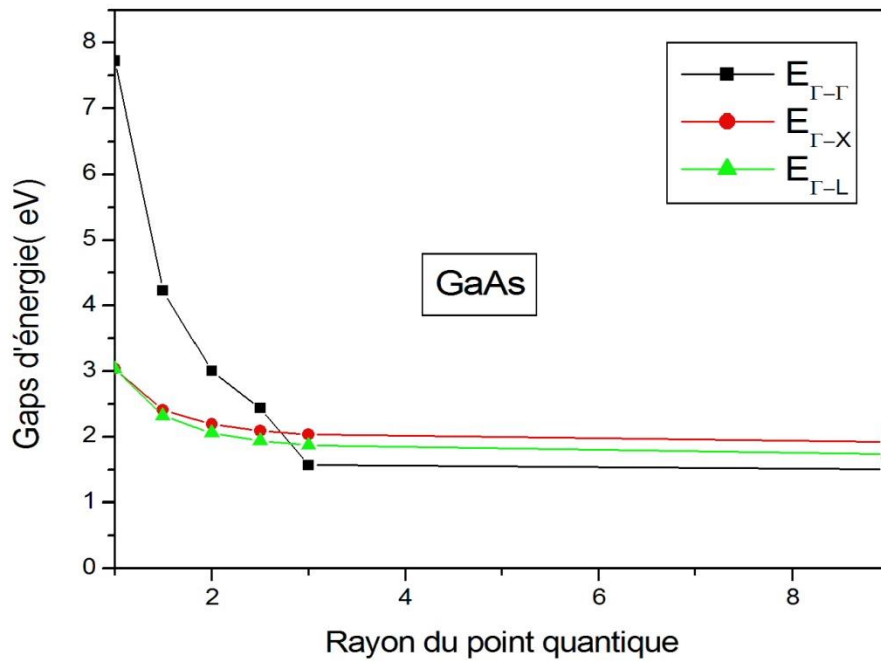
$$\text{Pour le AlAs : } E_F^X(a) = 2.53 - 0.02a + 1.50 \times 10^{-4}a^2 \quad \text{III-11}$$

$$\text{Pour le AlSb : } E_F^X(a) = 1.94 - 0.02a + 1.30 \times 10^{-4}a^2 \quad \text{III-12}$$

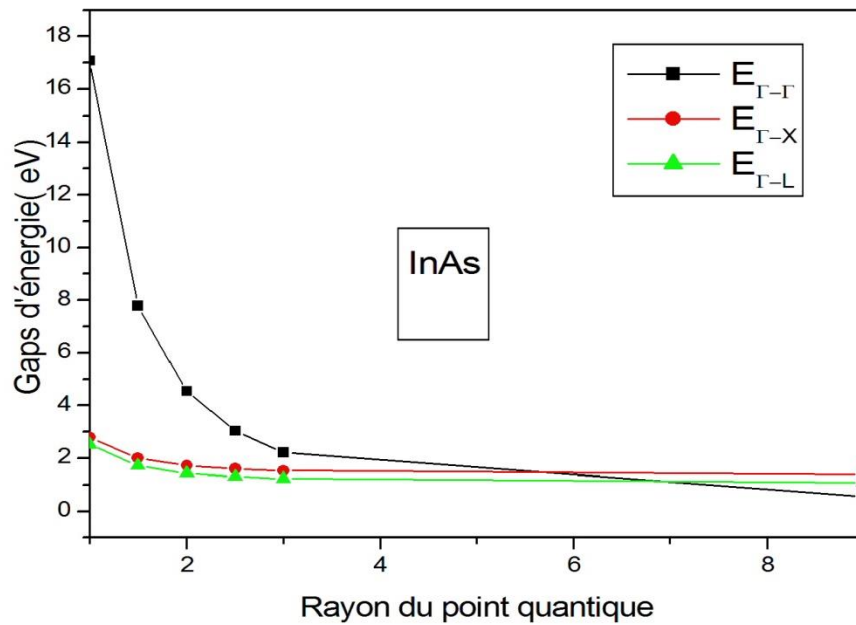
$$\text{Pour le GaP : } E_F^X(a) = 2.63 - 0.02a + 1.45 \times 10^{-4}a^2 \quad \text{III-13}$$

### III-2-3 Transition du gap énergétique

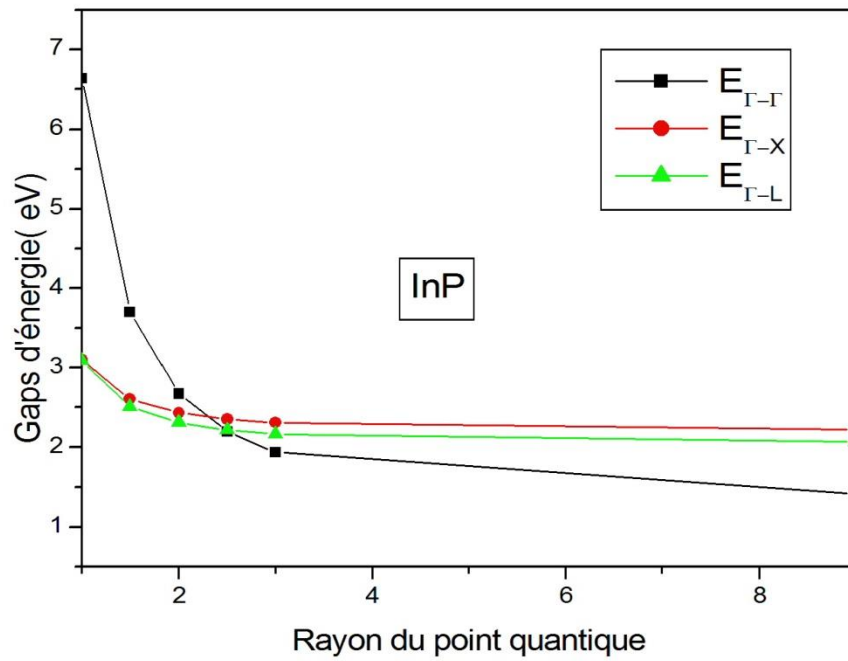
Pour mieux voir les transitions des gaps énergétiques direct ( $E_F^I$ ) et indirect ( $E_F^X, E_F^L$ ) pour chaque matériau semiconducteur nanostructuré, nous avons tracé les variations des gap énergétiques sur un intervalle de 1nm à 9nm pour le GaAs, InAs, InP, AlAs, AlSb et GaP. Néanmoins pour le GaSb nous avons tracé sur un intervalle de 1nm à 20nm. Les résultats sont indiqués sur les figures ci-dessous :



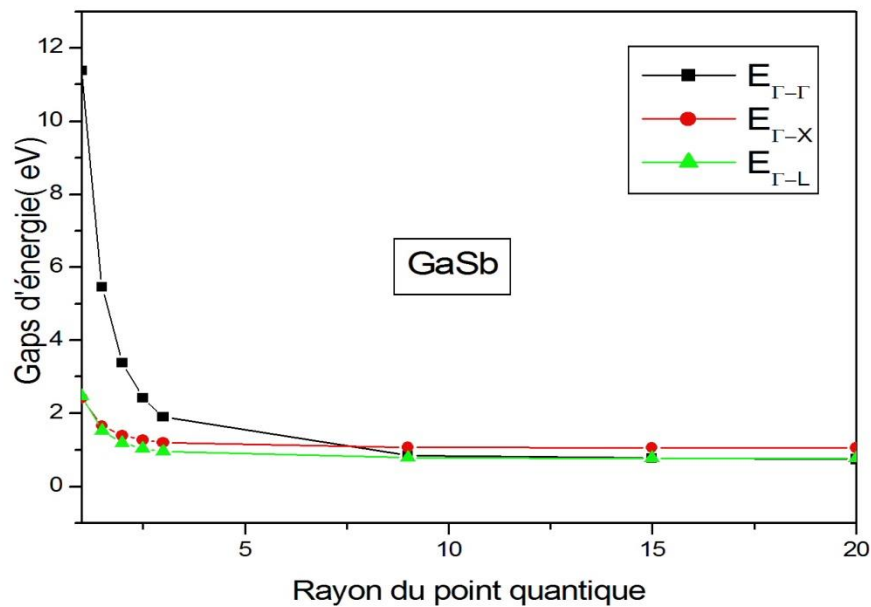
**Figure III-8** Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'GaAs.



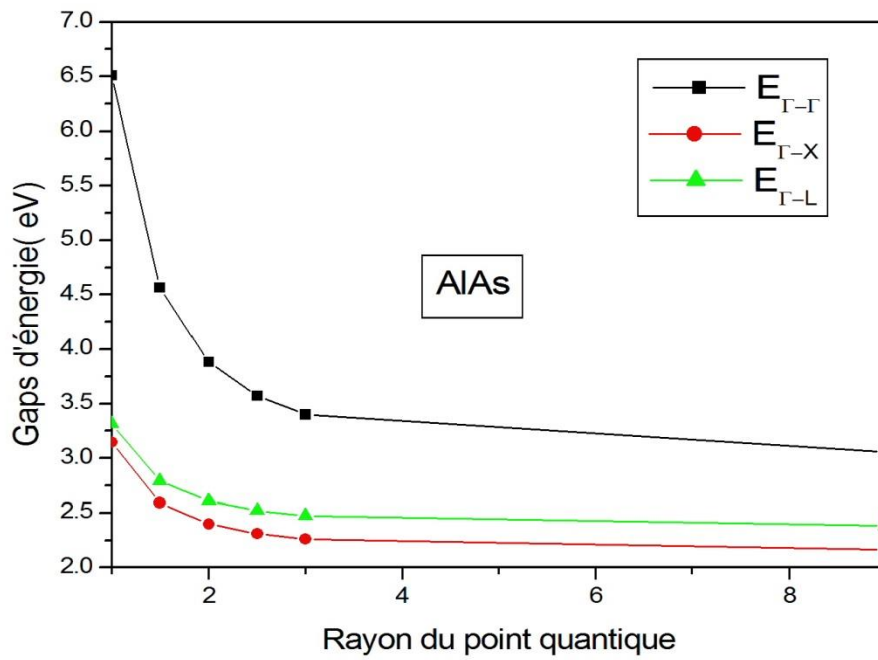
**Figure III-9** Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'InAs.



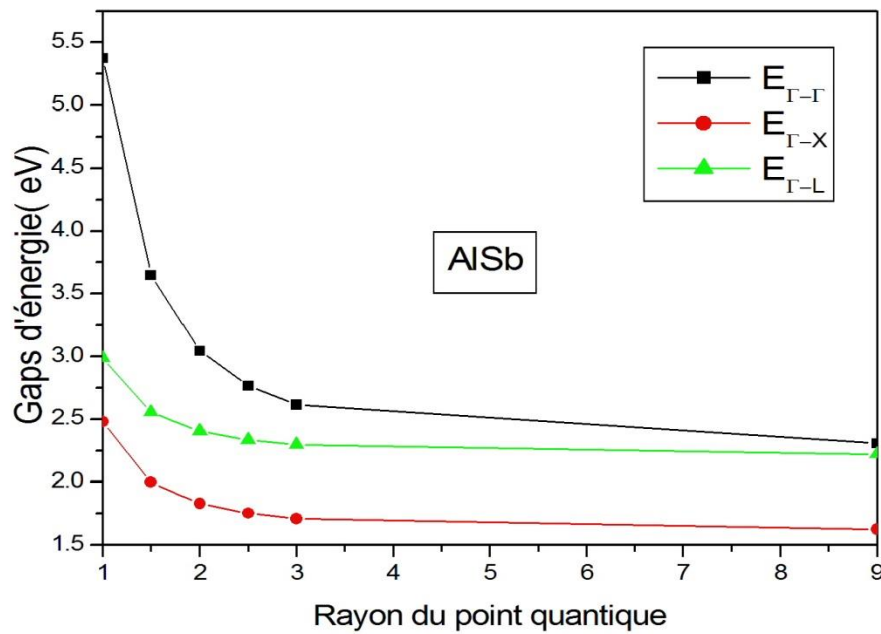
**Figure III-10** Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'InP.



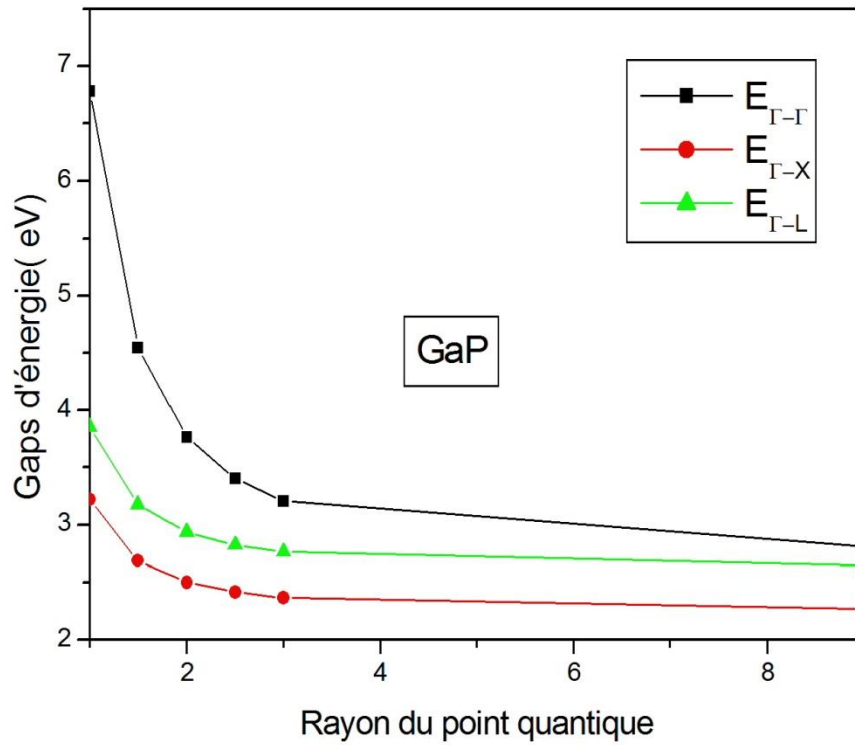
**Figure III-11** Variation des gaps d'énergie en fonction de rayon du point quantique pour l'GaSb.



**Figure III-12** Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'AlAs.



**Figure III-13** Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'AlSb.



**Figure III-14** Variation des gaps d'énergie en fonction de rayon du point quantique pour l'GaP.

Le tableau III-5 résume les différentes transitions de gap ainsi que la valeur du rayon du point quantique (a) où la transition a eu lieu et cela pour l'ensemble des figures (III-8 jusqu'à III-14) des composés nanostructurés objet de notre étude.

**Tableau III-5** Tableau des transitions des gaps des composés binaires semiconducteurs III-V

composés	Transition	Rayon de transition (nm)	Gap fondamental avant la transition	Gap fondamental après la transition
GaAs	Indirect-direct	2.81	$E_F^L$	$E_F^F$
InAs	Indirect -direct	6.94	$E_F^L$	$E_F^F$
InP	Indirect -direct	2.5	$E_F^L$	$E_F^F$
GaSb	Indirect- direct	15	$E_F^L$	$E_F^F$
AlAs	Pas de transition	Aucune	$E_F^X$	$E_F^X$
AlSb	Pas de transition	Aucune	$E_F^X$	$E_F^X$
GaP	Pas de transition	Aucune	$E_F^X$	$E_F^X$

L'utilisation de la méthode de la masse effective pour le calcul des gaps énergétique des différents composés a donné les résultats illustrés dans le tableau III-6. Notant que les valeurs des différents gaps étaient calculées pour un rayon  $a = 100$  nm.

**Tableau III-6** Valeurs des gaps d'énergie des composés III-V obtenues par la méthode de la masse effective et comparées aux données théoriques.

Composés	$E_F^I$	$E_F^X$	$E_F^L$
GaAs	1.43 <sup>a)</sup> 1.42 <sup>b)</sup> 1.42 <sup>c)</sup>	1.91 <sup>a)</sup> 1.81 <sup>b)</sup> 1.81 <sup>c)</sup>	1.72 <sup>a)</sup> 1.72 <sup>b)</sup> 1.72 <sup>c)</sup>
InAs	0.36 <sup>a)</sup> 0.36 <sup>b)</sup> 0.36 <sup>d)</sup>	1.37 <sup>a)</sup> 1.37 <sup>b)</sup> 1.37 <sup>d)</sup>	1.07 <sup>a)</sup> 1.07 <sup>b)</sup> 1.07 <sup>d)</sup>
InP	1.35 <sup>a)</sup> 1.35 <sup>b)</sup> 1.35 <sup>e)</sup>	2.21 <sup>a)</sup> 2.21 <sup>b)</sup> 2.21 <sup>e)</sup>	2.05 <sup>a)</sup> 2.05 <sup>b)</sup> 2.05 <sup>e)</sup>
GaSb	0.72 <sup>a)</sup> 0.70 <sup>b)</sup> 0.72 <sup>f, g)</sup>	1.05 <sup>a)</sup> 0.97 <sup>b)</sup> 1.02 <sup>g)</sup>	0.76 <sup>a)</sup> 0.75 <sup>b)</sup> 0.78 <sup>g)</sup>
AlAs	3.01 <sup>a)</sup> 2.95 <sup>b)</sup> 2.95 <sup>h)</sup>	2.15 <sup>a)</sup> 2.15 <sup>b)</sup> 2.16 <sup>h)</sup>	2.37 <sup>a)</sup> 2.36 <sup>b)</sup> 2.36 <sup>h)</sup>
AlSb	2.27 <sup>a)</sup> 2.30 <sup>b)</sup> 2.30 <sup>g)</sup>	1.62 <sup>a)</sup> 1.62 <sup>b)</sup> 1.62 <sup>g)</sup>	2.21 <sup>a)</sup> 2.21 <sup>b)</sup> 2.2 <sup>g)</sup>
GaP	2.76 <sup>a)</sup> 2.78 <sup>b)</sup> 2.78 <sup>i)</sup>	2.26 <sup>a)</sup> 2.25 <sup>b)</sup> 2.26 <sup>i)</sup>	2.63 <sup>a)</sup> 2.59 <sup>b)</sup> 2.6 <sup>i)</sup>

a) Nos calculs par la méthode de la masse effective

b) Nos calculs par la méthode de pseudopotentiel

c) Valeur théorique indiquée dans Ref [12]

b) Valeur théorique indiquée dans Ref [11].

e) Valeur théorique indiquée dans Ref [8].

f) Valeur théorique indiquée dans Ref [13].

g) Valeur théorique indiquée dans Ref [14].

h) Valeur théorique indiquée dans Ref [15].

i) Valeur théorique indiquée dans Ref [16].

Nous remarquons la convergence des valeurs obtenues par la méthode de la masse effective comparées à celles calculées par la méthode de pseudopotentiel (tableau III-3) et cela malgré les différentes méthodes de calcul, Ces résultats sont une autre fois en bon accord avec les données théoriques indiquées dans les références citées ci-dessus.

### III-3 Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction)

En raison de la relation entre l'indice de réfraction ( $n$ ) et le gap d'énergie fondamental ( $E_g$ ), ce paramètre est d'une grande importance dans les études scientifiques des propriétés optiques des matériaux semiconducteurs III-V. Il est utilisé dans la fabrication des fibres optiques, de panneaux solaires,.... etc.

Il y'a plusieurs modèles pour calculer ce paramètre, Moss était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction  $n$  et le gap énergétique  $E_g$  basée sur le modèle atomique, sa formule est donnée comme suit [17]:

$$n^4 E_g = K \quad \text{III-14}$$

Où la constante  $k=108\text{eV}$  est établie par Ravindra et Srivastava [18].

La forme linéaire de Ravindra [19]:

$$n = \alpha + \beta E_g \quad \text{III-15}$$

$\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes avec  $\alpha = 4.16\text{eV}$  et  $\beta = -0.85\text{eV}^{-1}$

La forme linéaire de Gupta et Ravindra [20] :

$$n = \alpha + b E_g \quad \text{III-16}$$

Où  $\alpha = 4.084$  et  $b = -0.62\text{eV}^{-1}$

La relation empirique de Hervé et Vandamme donnée par [21] :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \quad \text{III-17}$$

Avec  $A=13.6\text{ eV}$  et  $B=3.4\text{ eV}$

La relation de Reddy at Anjaneyulu [22] :

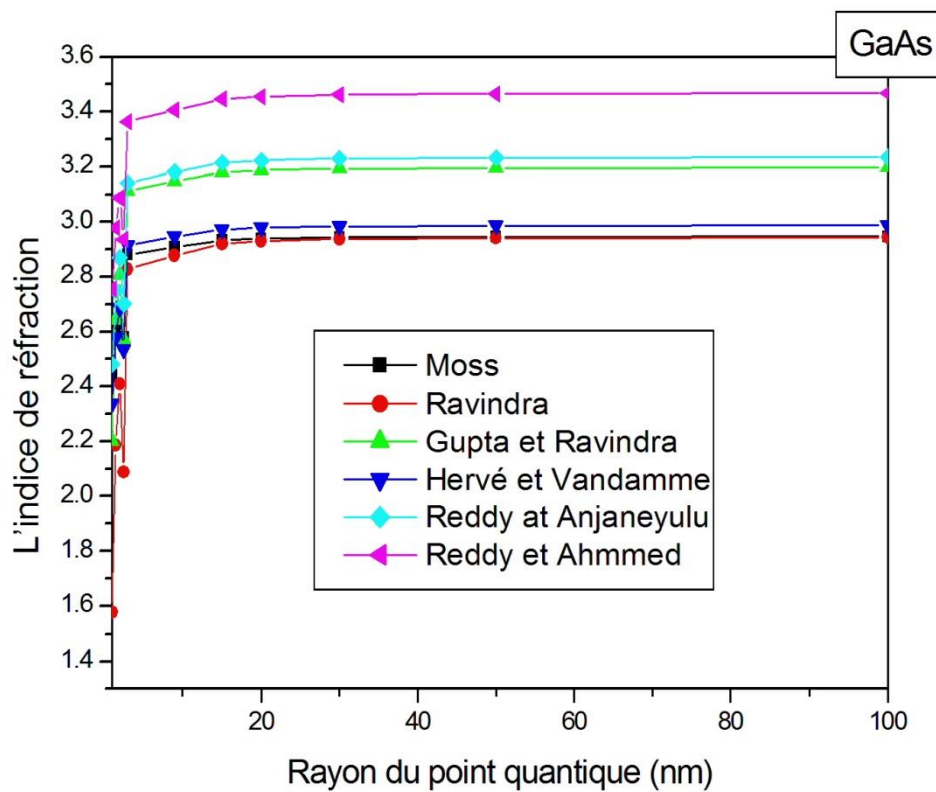
$$E_g e^n = 36.3 \quad \text{III-18}$$

La relation empirique de Reddy et Ahmmed [23] :

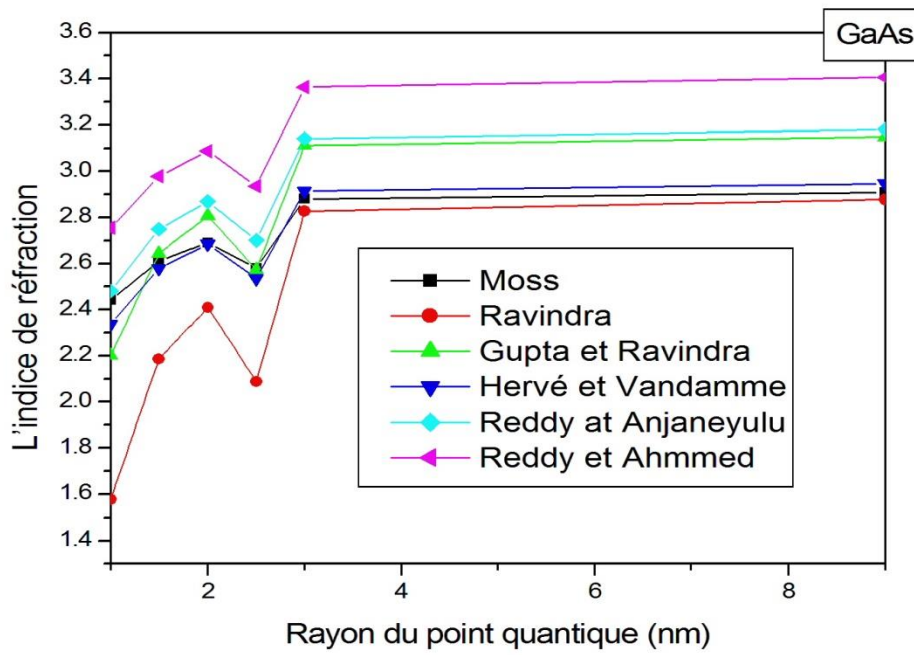
$$n^4(E_g - 0.365) = 154$$

III-19

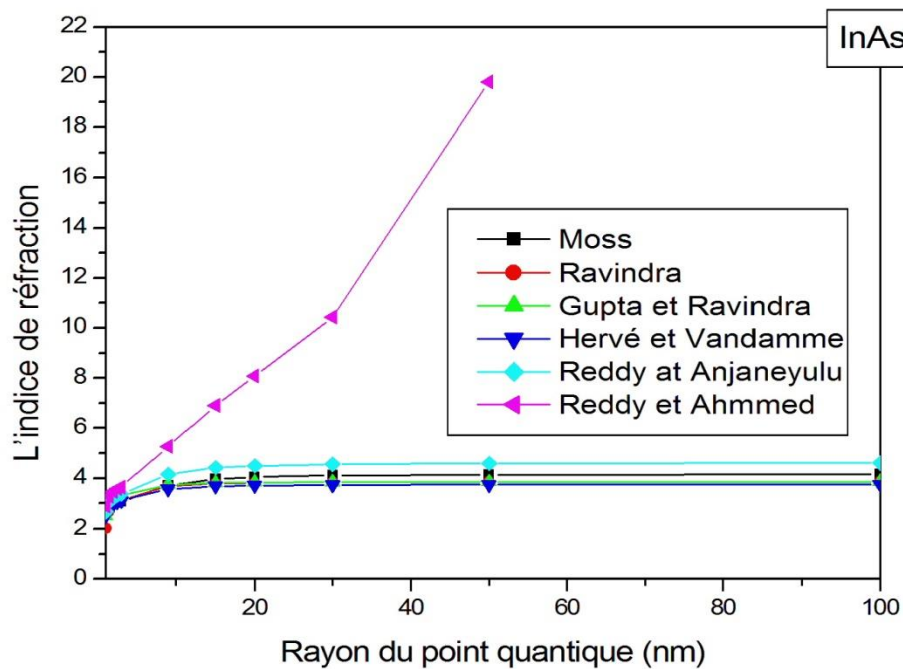
Toutes ces relations empiriques ont été utilisées pour calculer et voir la variation de l'indice de réfraction des composés binaires sujet de notre étude, le GaAs, InAs, GaSb, InP, AlAs, AlSb et GaP en fonction du rayon du point quantique (a) sur une large gamme, de 1nm à 100nm pour nous permettre de voir le comportement de ce paramètre physique important. Une attention est donnée à la variation de cet indice de réfraction sur une gamme de rayon allant de 1nm à 9 nm pour voir de près la variation de cet indice et de déterminer ses valeurs. Les résultats des calculs sont illustrés sur les figures suivantes.



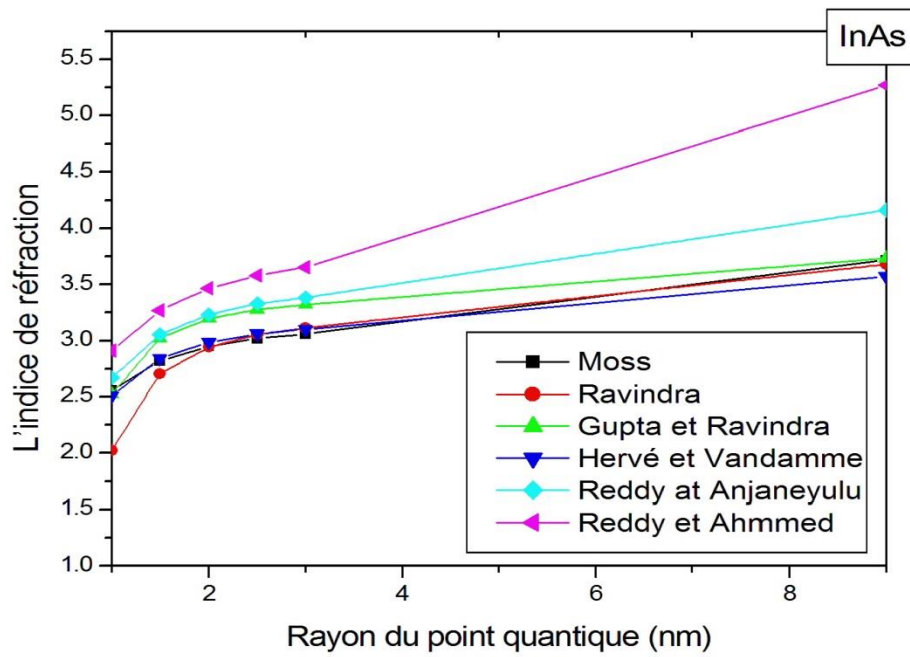
**Figure III-15** Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction du rayon du point quantique.



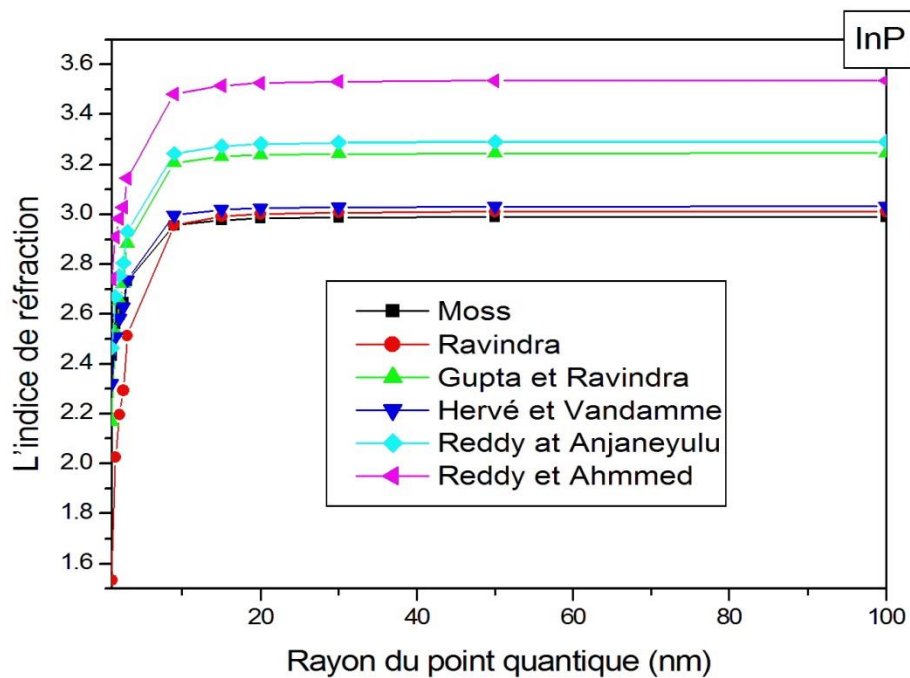
**Figure III-16** Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-17** Variation de l'indice de réfraction du l'InAs en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-18** Variation de l'indice de réfraction du l' InAs en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-19** Variation de l'indice de réfraction du l'InP en fonction du rayon de point quantique.

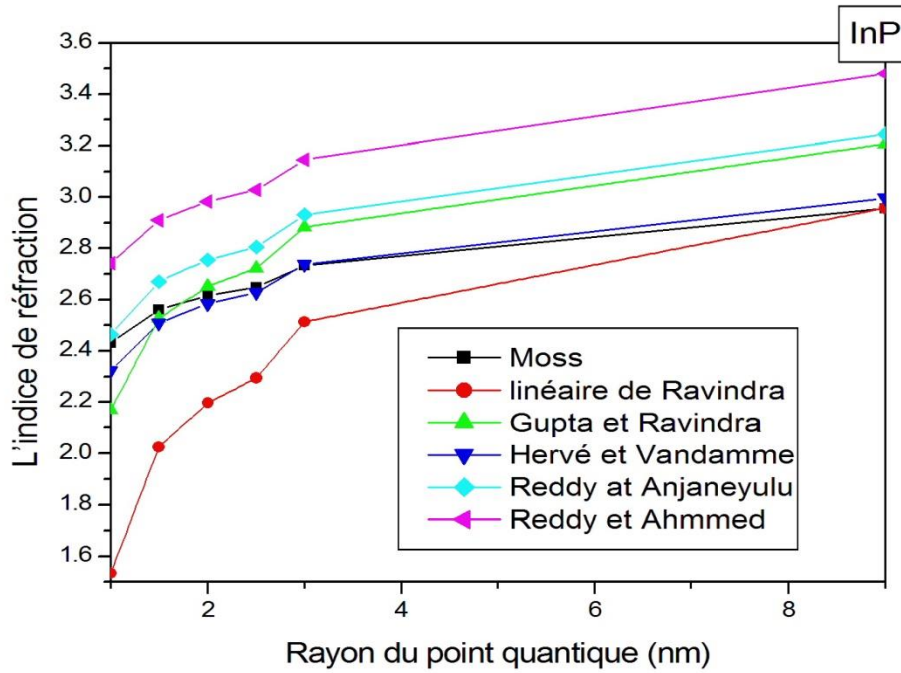


Figure III-20 Variation de l'indice de réfraction du l'InP en fonction du rayon du point quantique.

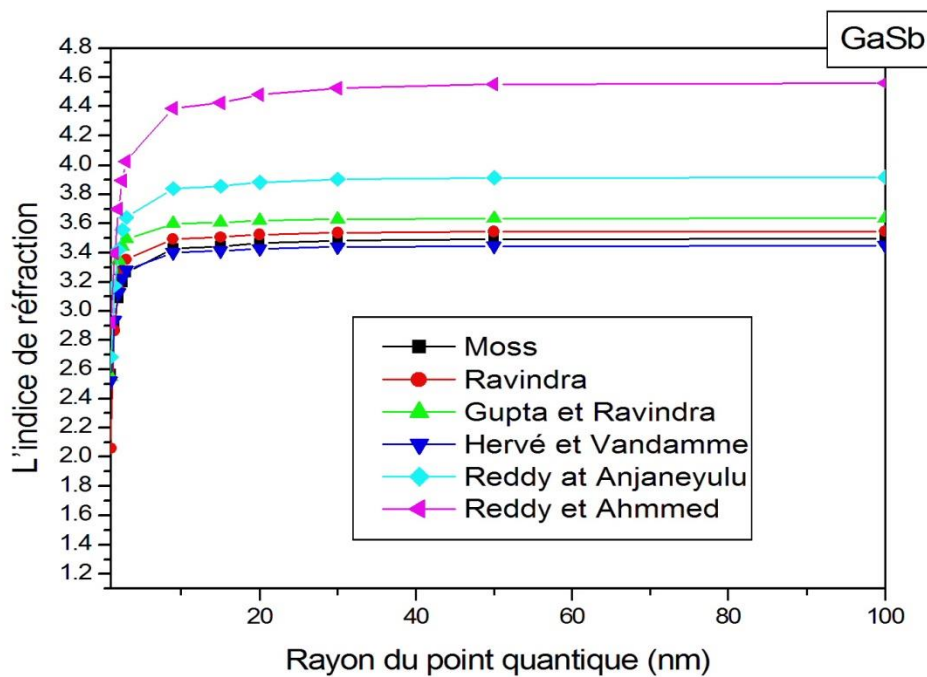
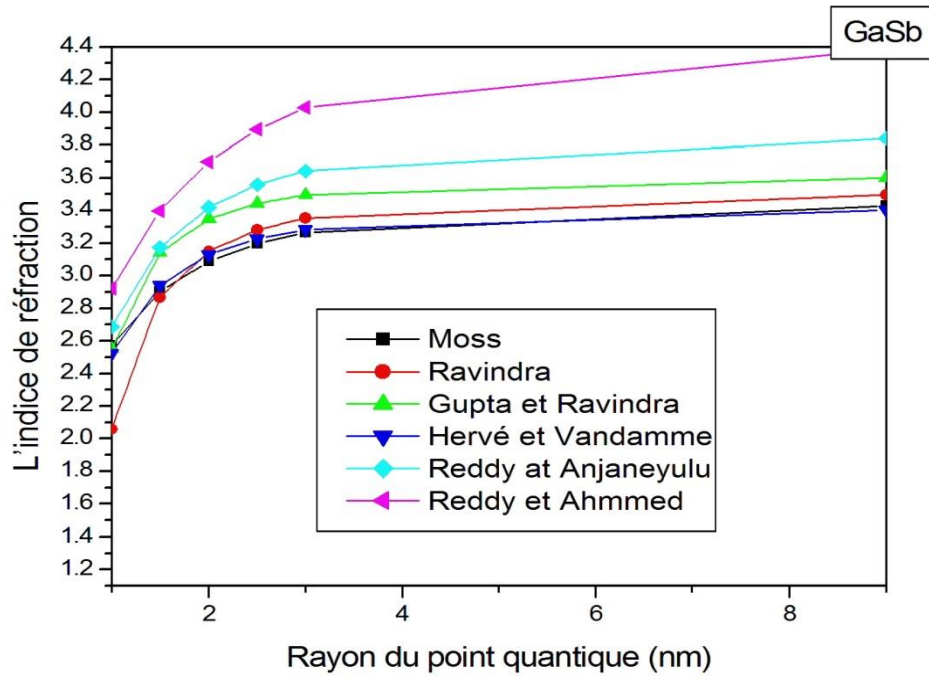
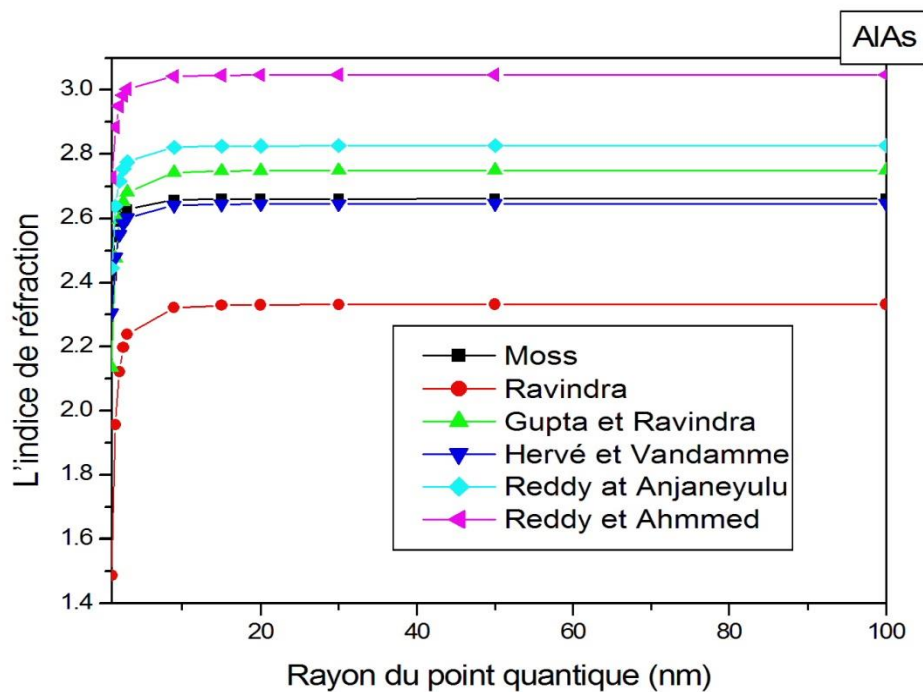


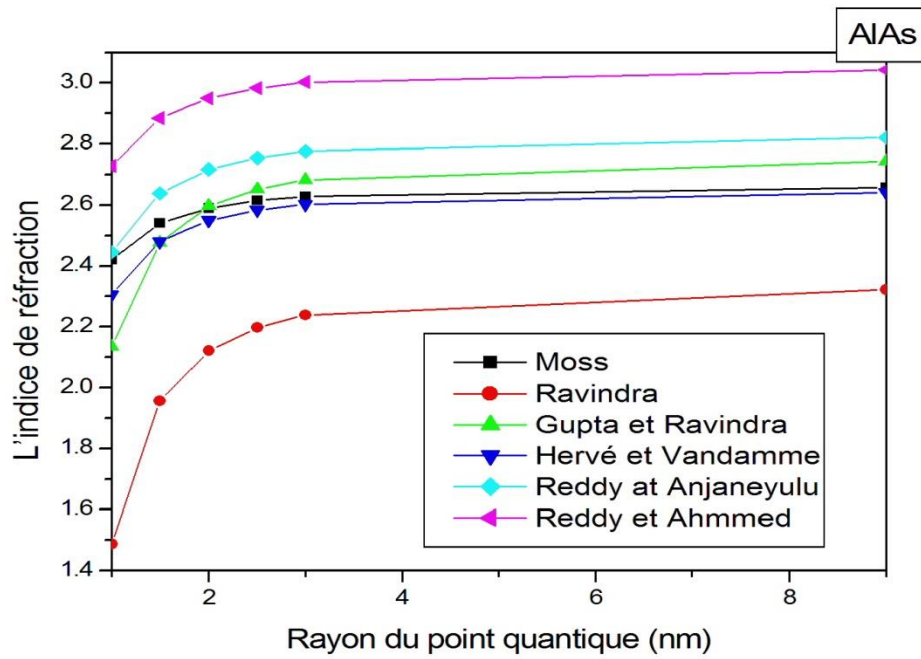
Figure III-21 Variation de l'indice de réfraction du GaSb en fonction du rayon du point quantique.



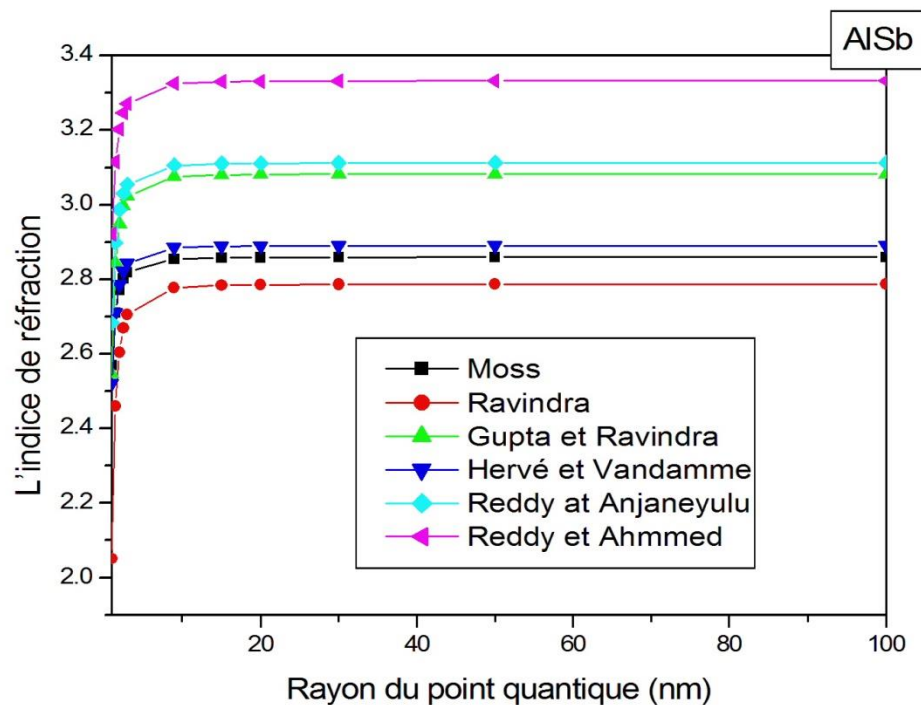
**Figure III-22** Variation de l'indice de réfraction du GaSb en fonction du rayon du point quantique.



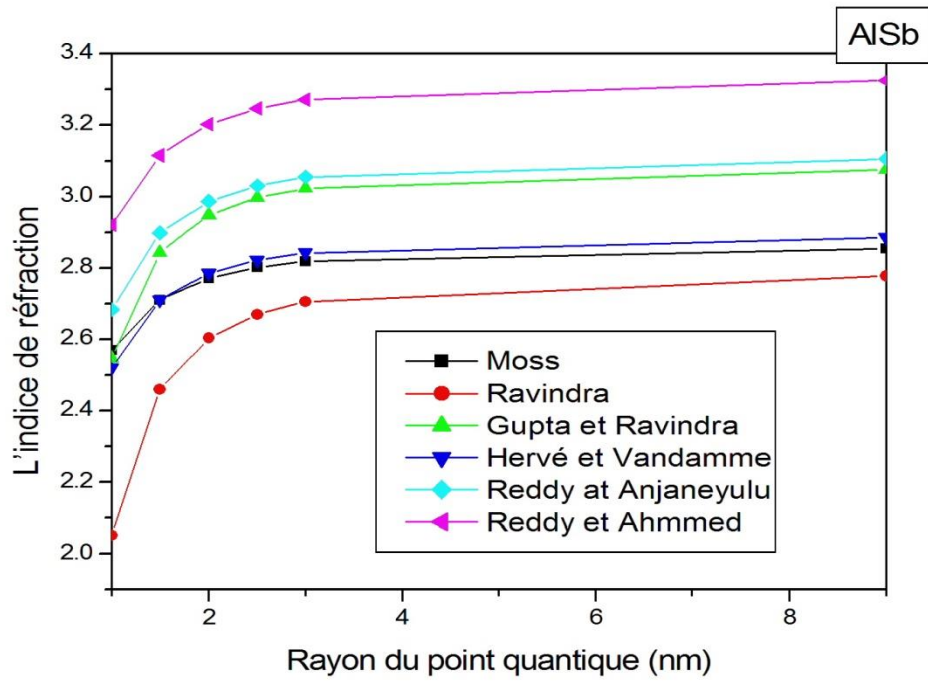
**Figure III-23** Variation de l'indice de réfraction de l'AlAs en fonction du rayon du point quantique.



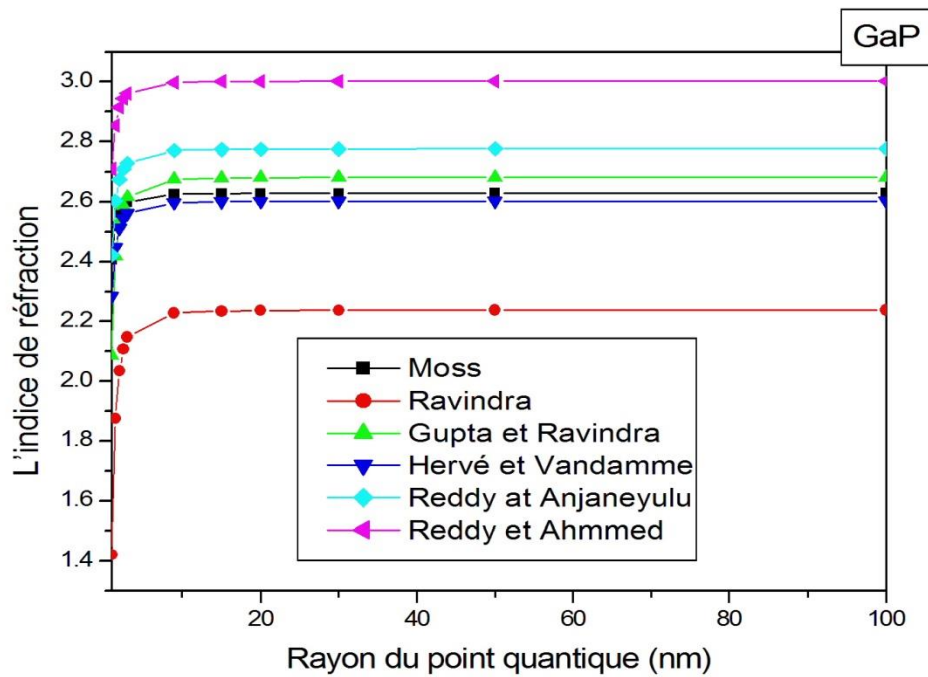
**Figure III-24** Variation de l'indice de réfraction de l'AlAs en fonction de rayon du point quantique.



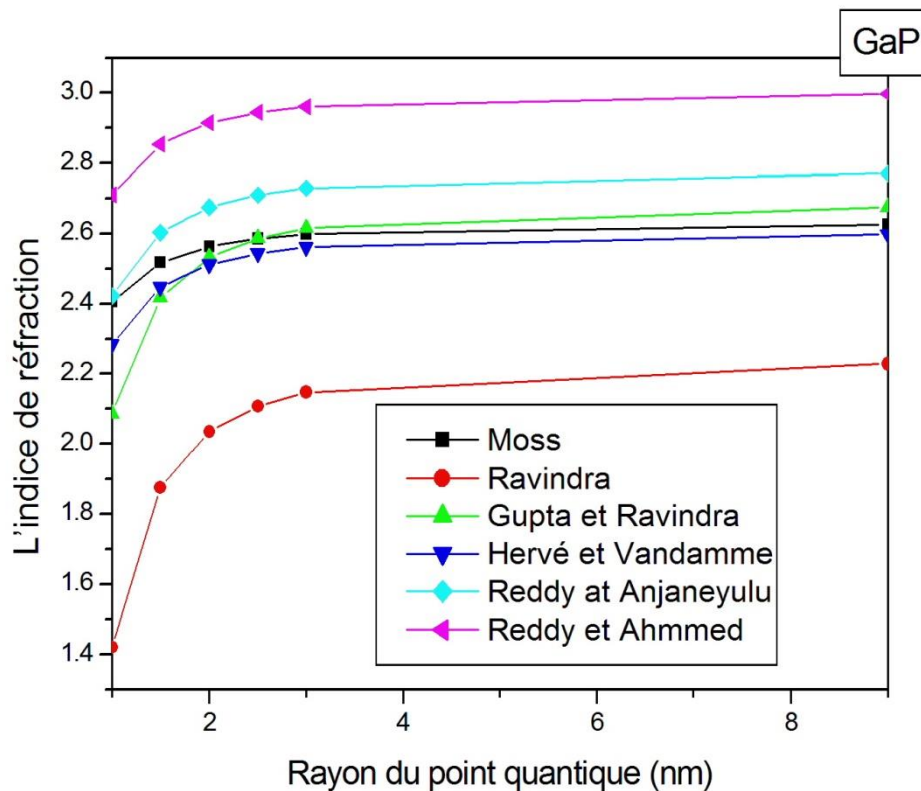
**Figure III-25** Variation de l'indice de réfraction du l'AlSb en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-26** Variation de l'indice de réfraction du l'AlSb en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-27** Variation de l'indice de réfraction du GaP en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-28** Variation de l'indice de réfraction du GaP en fonction du rayon du point quantique.

Pour tous les composés semi-conducteurs nanostructurés, l'indice de réfraction se comportent de la même manière comme le montrent les figures précédentes, sauf pour les valeurs où l'indice ne peut pas être calculé pour certains modèles et pour certains composés semiconducteurs, dans ce cas l'indice de réfraction sera une valeur négative ou inférieur à 1.

Cet indice est inversement proportionnel au gap d'énergie autrement dit, il diminue une fois le rayon du point quantique diminue alors qu'il augmente de manière non linéaire avec l'augmentation du rayon ( $a$ ) et il commence à se stabiliser une fois que nous dépassons une valeur de rayon de point quantique  $a=20\text{nm}$ ,

Le tableau III-7 donne les valeurs de l'indice de réfraction calculées et comparées à des valeurs théoriques pour une valeur de  $a = 100\text{nm}$ , cette valeur représente le cas massif.

**Tableau III-7** Calcul des indices de réfraction des semiconducteurs nanostructurés étudiés pour ( $a=100\text{nm}$ ), comparés aux données théoriques.

Composés	n calculé à partir :						valeurs théoriques de l'indice de réfraction
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vadamme	Reddy et Anjneyulu	Reddy et Ahmmed	
GaAs	2.95	2.94	3.20	2.99	3.23	3.47	3.3 <sup>a)</sup>
InAs	4.16	3.85	3.86	3.75	4.61		3.51 <sup>a)</sup>
InP	2.99	3.01	3.25	3.03	3.29	3.54	3.1 <sup>a)</sup>
GaSb	3.5	3.56	3.64	3.45	3.92	4.56	3.79 <sup>b)</sup>
AlAs	2.66	2.33	2.75	2.65	2.03	3.05	2.86 <sup>a)</sup>
AlSb	2.86	2.79	3.08	2.89	3.11	3.33	3.3289 <sup>c)</sup>
GaP	2.63	2.24	2.68	2.60	2.28	3.00	3.02 <sup>a)</sup>

a) Valeur théorique indiquée dans Ref. [24].

b) Valeur théorique indiquée dans Ref. [25].

c) Valeur théorique indiquée dans Ref. [26].

Le calcul de la valeur de l'erreur relative  $\Delta x/x$  des résultats obtenus et des données théoriques de l'indice de réfraction, permet de valider le modèle le plus proche qui permettra le calcul de l'indice de réfraction ( $n$ ) et par la suite les propriétés diélectriques, ses valeurs sont présentées dans le tableau III-8. La valeur d'erreur relative la plus basse c'est celle la plus précise.

**Tableau III-8** Validation du modèle empirique et détermination de la précision pour les composés binaires semiconducteurs nanostructurés III-V

Composé	Modèle de calcul le plus proche	Valeur de l'erreur relative
GaAs	Reddy at Anjaneyulu	2.12%
InAs	Hervé et Vandamme	6.84%
InP	Hervé et Vandamme	2.26%
GaSb	Reddy at Anjaneyulu	3.43%
AlAs	Reddy at Anjaneyulu	1.05%
AlSb	Reddy et Ahmmed	0.03%
GaP	Reddy et Ahmmed	0.66%

Après une validation des modèles utilisés pour le calcul de l'indice de réfraction, nous avons opté pour un fit quadratique d'ordre deux pour une éventuelle modélisation de l'indice de réfraction en fonction du rayon du point quantique, les résultats du fit obtenus sont donnés par les équations suivantes :

$$\text{GaAs : } n(a) = 2.80 + 0.02a - 1.61 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy at Anjaneyulu)} \quad \text{III-20}$$

$$\text{InAs : } n(a) = 2.92 + 0.04a - 2.97 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Hervé et Vandamme)} \quad \text{III-21}$$

$$\text{InP : } n(a) = 2.58 + 0.02a - 1.72 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Hervé et Vandamme)} \quad \text{III-22}$$

$$\text{GaSb : } n(a) = 3.31 + 0.03x - 2.23 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy at Anjaneyulu)} \quad \text{III-23}$$

$$\text{AlAs : } n(a) = 2.67 + 0.07a - 6.06 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy at Anjaneyulu)} \quad \text{III-24}$$

$$\text{AlSb : } n(a) = 3.167 + 0.008a - 6.837 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy et Ahmmed)} \quad \text{III-25}$$

$$\text{GaP : } n(a) = 2.880 + 0.006a - 4.766 \times 10^{-4}a^2 \text{ (Reddy et Ahmmed)} \quad \text{III-26}$$

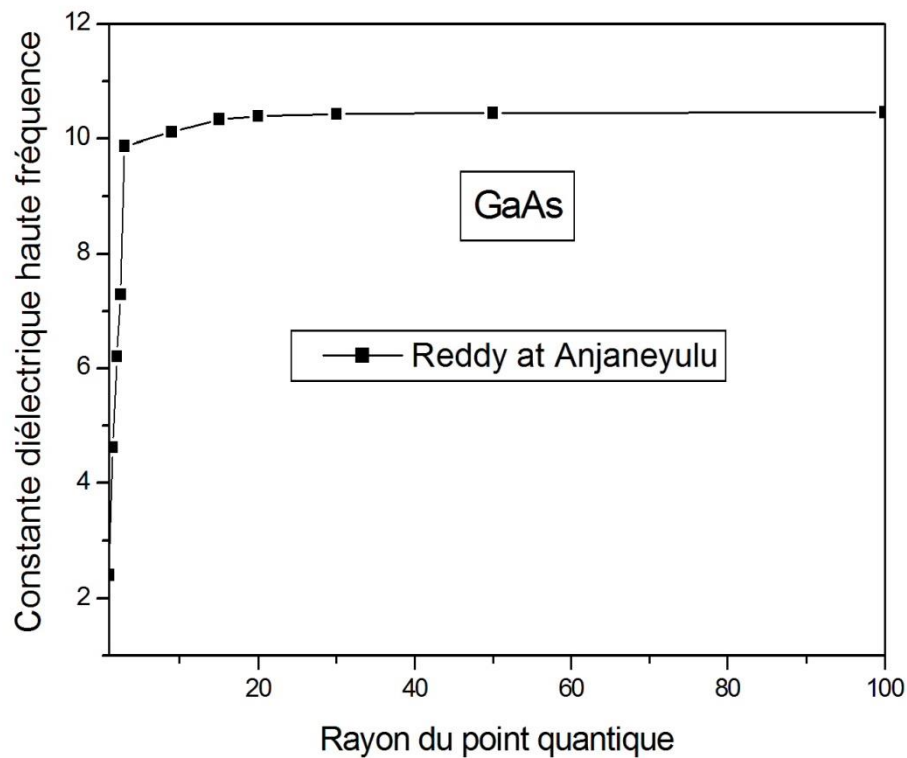
### III-4 Etude des propriétés diélectriques

#### III-4-1 Constante diélectrique de haute fréquence ( $\epsilon_\infty$ )

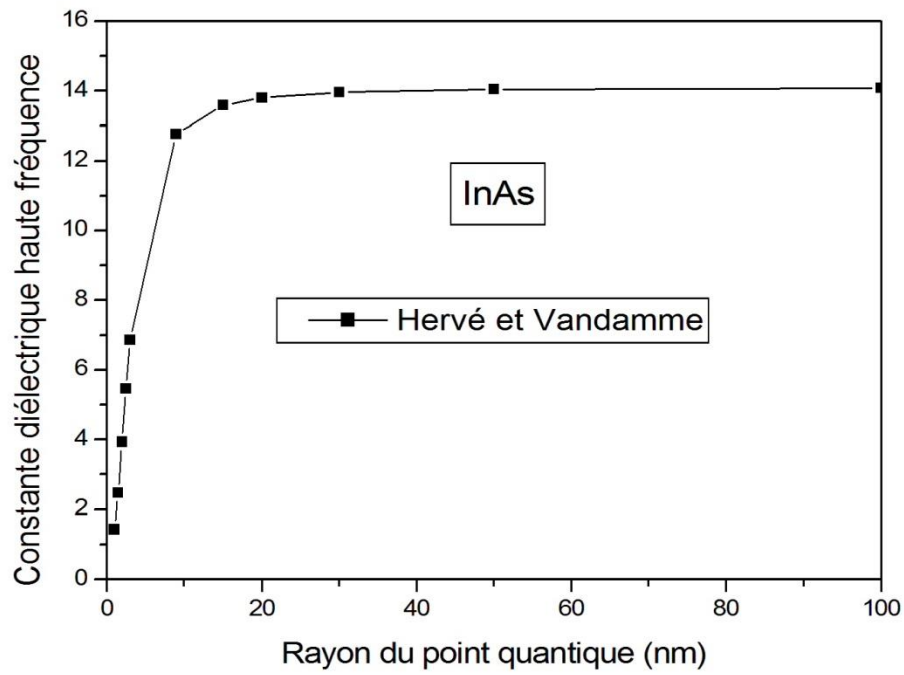
Basé sur les valeurs calculées de l'indice de réfraction  $n$  obtenus à partir des différents modèles utilisés, la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_\infty$  a été estimée en utilisant l'expression suivante [27].

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad \text{III-27}$$

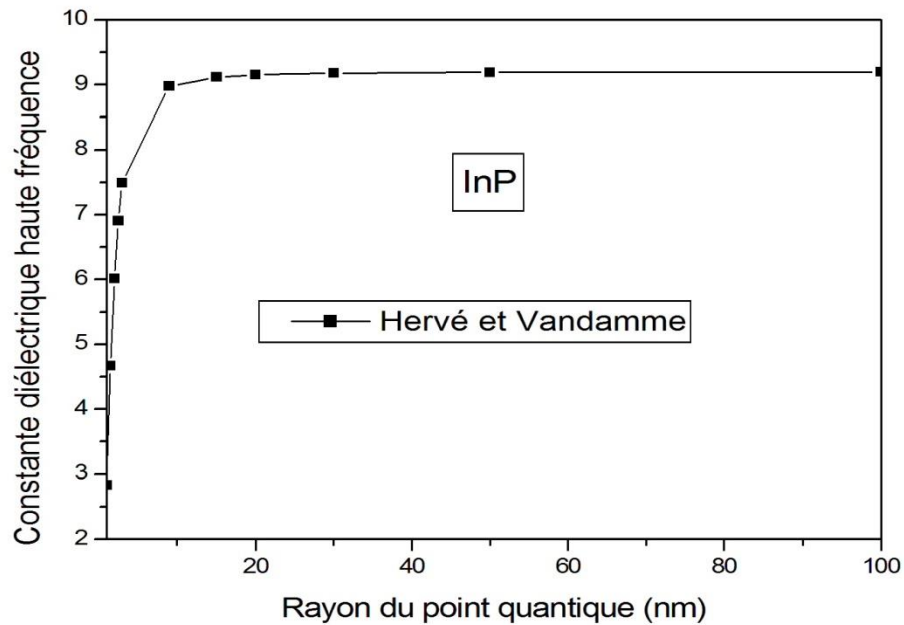
Les résultats du tableau III-7 permettent de calculer la constante diélectrique haute fréquence et d'obtenir les figures suivantes :



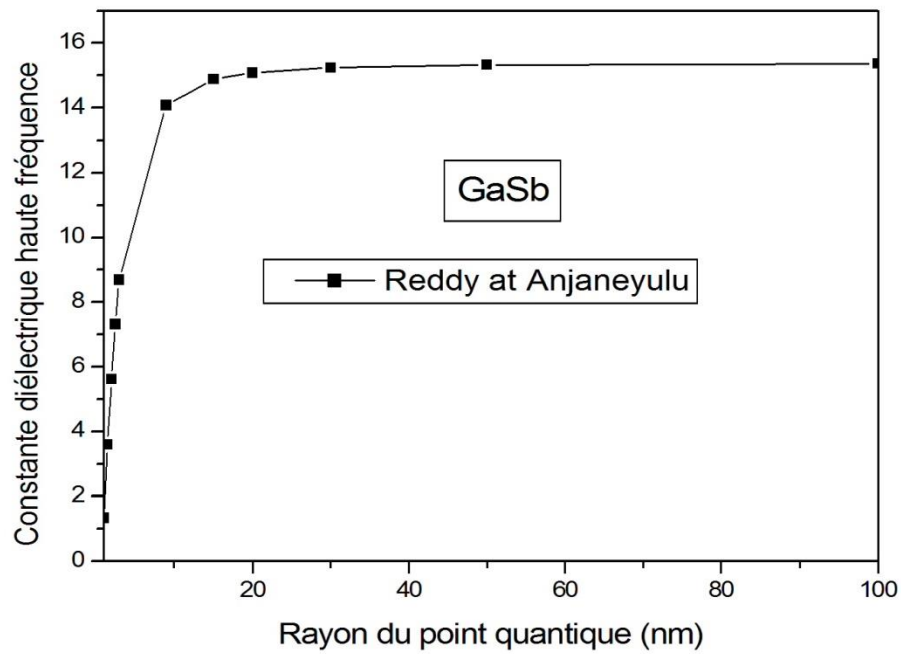
**Figure III-29** Constante diélectrique de haute fréquence du GaAs en fonction du rayon du point quantique.



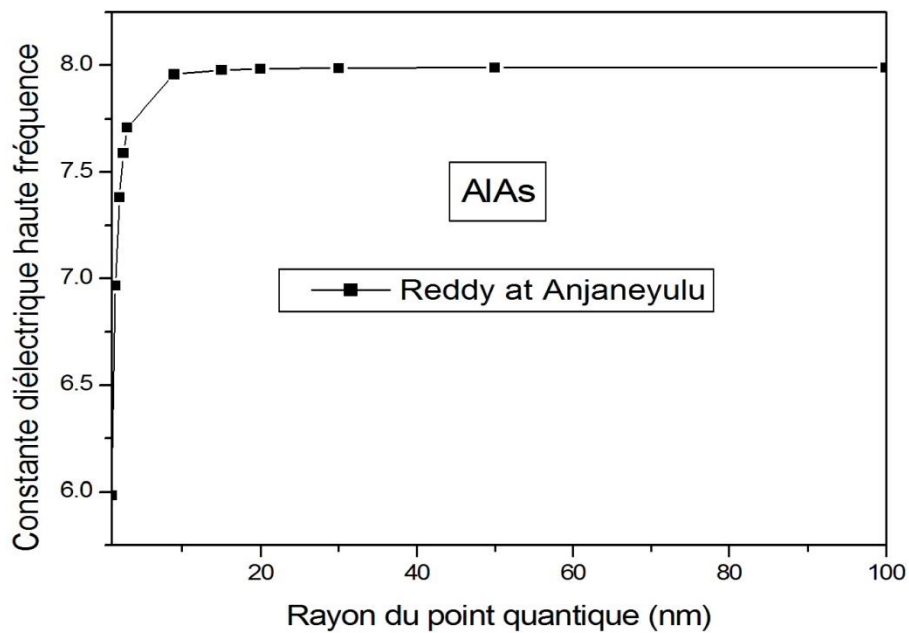
**Figure III-30** Constante diélectrique de haute fréquence du InAs en fonction du rayon du point quantique.



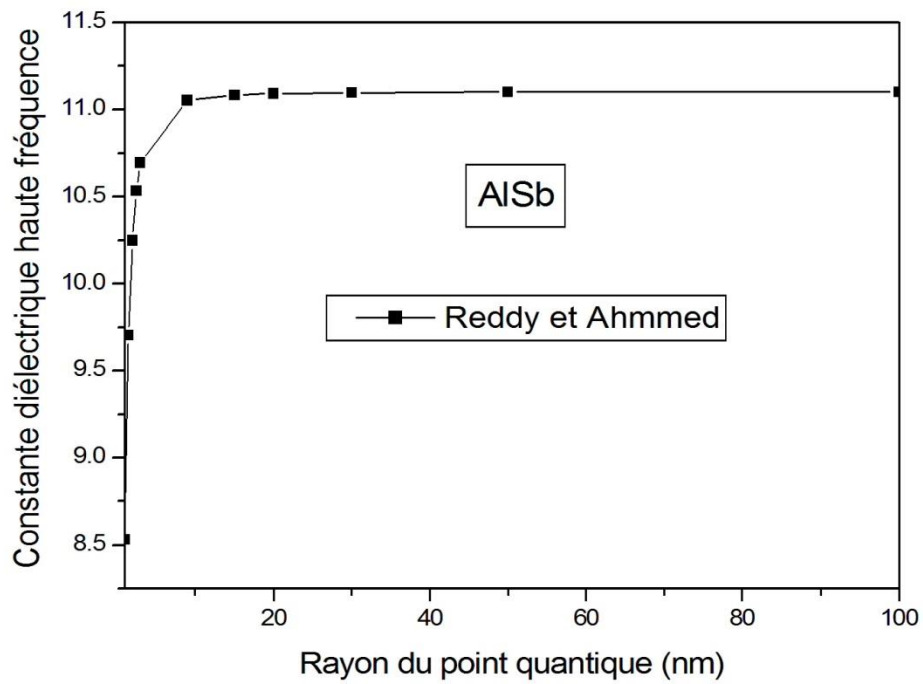
**Figure III-31** Constante diélectrique de haute fréquence du InP en fonction du rayon du point quantique.



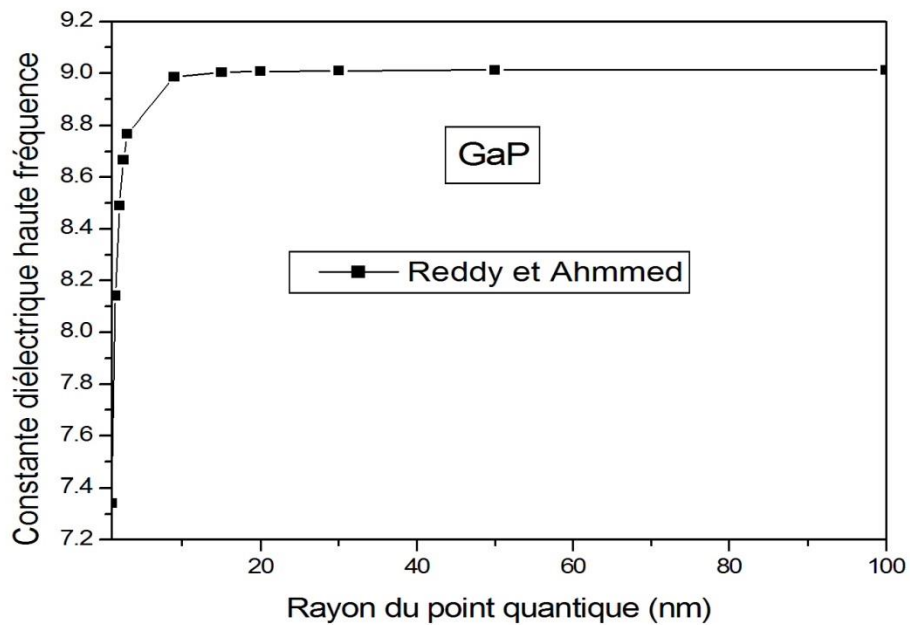
**Figure III-32** Constante diélectrique de haute fréquence du GaSb en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-33** Constante diélectrique de haute fréquence du AlAs en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-34** Constante diélectrique de haute fréquence de l'AlSb en fonction du rayon du point quantique.



**Figure III-35** Constante diélectrique haute fréquence du GaP en fonction du rayon du point quantique.

Dans ces figures, nous observons que le comportement de la constante diélectrique haute fréquence en fonction du rayon ( $a$ ) est similaire au comportement de l'indice de réfraction, elle augmente rapidement puis elle commence à se stabiliser une fois que le rayon du point quantique dépasse la valeur 20nm. Cette similitude s'explique par la relation III-27. Notant aussi que les valeurs de la constante  $\epsilon_{\infty}$  est différente d'un composé à un autre.

L'étude de la constante diélectrique haute fréquence est importante pour étudier la densité de flux électrique des matériaux étudiés, car l'augmentation des valeurs de la constante diélectrique augmente la densité de flux.

Généralement, les matériaux à haute constante diélectrique sont utilisés dans la fabrication de condensateurs de grandes capacités.

Les équations du fit quadratique pour chaque modèle sont données par les expressions suivantes :

$$\text{GaAs} : \epsilon_{\infty}(a) = 6.23 + 0.20a - 0.02a^2 \quad (\text{Reddy et Anjaneyulu}) \quad \text{III-28}$$

$$\text{InAs} : \epsilon_{\infty}(a) = 4.446 + 0.442a - 0.004a^2 \quad (\text{Hervé et Vandamme}) \quad \text{III-29}$$

$$\text{InP} : \epsilon_{\infty}(a) = 5.729 + 0.164a - 0.001a^2 \quad (\text{Hervé et Vandamme}) \quad \text{III-30}$$

$$\text{GaSb} : \epsilon_{\infty}(a) = 5.703 + 0.445a - 0.004a^2 \quad (\text{Reddy et Anjaneyulu}) \quad \text{III-31}$$

$$\text{AlAs} : \epsilon_{\infty}(a) = 7.16 + 0.04a - 3.27a^2 \quad (\text{Reddy et Anjaneyulu}) \quad \text{III-32}$$

$$\text{AlSb} : \epsilon_{\infty}(a) = 9.98 + 0.05a - 4.36a^2 \quad (\text{Reddy et Ahmmed}) \quad \text{III-33}$$

$$\text{GaP} : \epsilon_{\infty}(a) = 8.31 + 0.03a - 2.77a^2 \quad (\text{Reddy et Ahmmed}) \quad \text{III-34}$$

### III-4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés physiques : électroniques, optiques et diélectriques telles que le gap énergétique, l'indice de réfraction et la constante diélectriques de haute fréquence, des composés binaires semiconducteurs III-V nanostructurés ( GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP ), nous avons utilisé la méthode empirique des pseudo-potentiels, et la méthode de la masse effective.

Les matériaux semiconducteurs III-V étudiés tels que GaAs, InAs, InP et GaSb sont à gap direct et le AlAs, AlSb et GaP sont à gap indirect, toutefois l'étude à l'échelle nanométrique fait augmenter le gap direct  $E_F^I$  avec la diminution du rayon du point quantique (a), en raison de l'effet du confinement quantique sur le gap d'énergie.

L'indice de réfraction a été calculé selon six modèles où un calcul de l'erreur relative a été adopté afin de connaître le modèle le plus proche pour l'utiliser dans la détermination de constante diélectrique haute fréquence pour chaque composé semiconducteur nanostructuré étudié. L'étude à l'échelle nanométrique de l'indice de réfraction et de la constante diélectrique haute fréquence a montré la réduction de ces deux paramètres quand le rayon (a) diminue.

**Références bibliographiques citées dans le chapitre III :**

- [1] G. J. Ackland, Rep. Prog. Phys. 64 (2001) 483.
- [2] Mezrag Fadila, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteur, thèse de Doctorat, 2012, Université, Biskra.
- [3] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer, Berlin, 1988.
- [4] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 2 (1993) 7.
- [5] N. Bouarissa, M. Boucenna, Phys. Scr. 79 (2009) 015701.
- [6] F. Mezrag, N. Aouina, N. Bouarissa, Optoelectronic and dielectric properties of  $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$  ternary alloys, Journal of materials science, 41 (2006) 5323-5328.
- [7] M. Boucenna, N. Bouarissa, F. Mezrag, Composition and lattice mismatch dependent dielectric constants and optical phonon modes of  $\text{InAs}_{1-x-y}\text{Sb}_x\text{Py}$  quaternary alloys, Infrared Physics & Technology, 67 (2014) 318-322.
- [8] N. Bouarissa, Phonon confinement in nanostructured InP, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, 10 (2013) 1284-1289.
- [9] M.S. Al-Assiri, N. Bouarissa, Electronic band structure and derived properties of  $\text{AlAs}_x\text{Sb}_{1-x}$  alloys, Superlattices and Microstructures, 59 (2013) 144–154.
- [10] W. Kara Mohamed, F. Mezrag, N. Bouarissa, Energy gaps and carrier effective masses of quasi-binary  $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$  crystals, Superlattices and Microstructures, 47 (2010) 341-348.
- [11] S. Adachi, Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors, John Wiley & Sons, 2009.
- [12] DE. Aspnes, CG. Olson, Lynch DW (1976) Phys Rev Lett 37:766
- [13] S. Zollner, M. Garriga, J. Humlicek, S. Gopalan, M. Cardona (1991) Phys Rev p43:4349
- [14] C. Alibert, A. Joullié, A.M. Joullié, C. Ance, Phys. Rev. B 27 (1983) 4946.

- [15] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 4869 (and references therein).
- [16] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds), *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, vol. 1, World Scientific, 1996.
- [17] T. S. Moss, *Proc. Phys. Soc. B* 63 (1950) 167.
- [18] N. M. Ravindra, V. K. Srivastava, *Infrared Phys.* 19 (1979) 603.
- [19] V. P. Gupta, N. M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715.
- [20] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [21] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu, *Phys. Stat. Sol. (b)* 174 (1992) K 91.
- [22] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J.Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [23] R. R. Reddy, Y. N. Ahmmed, *Infrared Phys. Technol.* 36 (1995) 825.
- [24] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur, (eds) (1996) *Handbook series on semiconductor parameters*, vol 1. World Scientific, Singapore
- [25] C. Kittel, P. McEuen, J. Dion, P. McEuen, *Physique de l'état solide: cours et problèmes*, Dunod, 2007.
- [26] H. Algarni, O. Al-Hagan, N. Bouarissa, M. Khan, T. Alhuwaymel, Pseudopotential calculations of AlSb under pressure, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 190 (2018) 215-219.
- [27] K. Mohamed Wahiba, *Thèse de doctorat*, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).

## *Conclusion générale*

## Conclusion générale

En conclusion, dans ce présent travail nous avons étudié l'effet du confinement quantique sur les propriétés physiques (électroniques, optiques et diélectriques) des matériaux semiconducteurs III-V binaires nanostructurés : GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP dans la phase zinc-blende. Toutes ces propriétés ont été examinées en fonction du rayon du point quantique. Les calculs sont principalement effectués par l'emploi de la méthode du pseudo-potentiel empirique EPM.

Les résultats obtenus pour le calcul des propriétés électroniques, autrement dit calcul des gaps énergétiques, suggèrent que pour les composés binaires GaAs, InAs, InP et GaSb ont un gap direct  $E_F^I$  une fois que le rayon du point quantique augmente, cela veut dire lorsqu'on s'approche des dimensions du volume, alors que pour les composés AlAs, AlSb et GaP ont un gap indirect  $E_F^X$  pour toute la plage du rayon quantique allant de 1 à 100 nm.

Nos résultats ont montré aussi que pour tous matériaux semiconducteurs binaires que nous avons étudié, tous les gaps d'énergie augmentent avec la diminution du rayon quantique et varient de façon non linéaire avec ce dernier lorsque sa valeur appartient à l'intervalle ( $1\text{nm} \leq a \leq 15\text{nm}$ ), ces gaps commencent à se stabiliser quand le rayon dépasse 20 nm.

Une attention est donnée à la transition du gap pour les matériaux en question, nous remarquons que les gaps du GaAs, InAs, InP et GaSb présentent une transition du gap indirect  $E_F^I$  au gap direct  $E_F^I$  quand le rayon de point quantique ( $a$ ) dépasse une certaine valeur, cette valeur est propre à chaque composé semiconducteur nanostructuré, par contre, aucune transition n'a été observée pour les composés binaires AlAs, AlSb et GaP.

L'indice de réfraction a été calculé selon six modèles empiriques pour les semiconducteurs binaires il varie en fonction de rayon du point quantique d'une manière non linéaire pour  $1\text{nm} \leq a \leq 15\text{nm}$ , nous remarquons une croissance de l'indice de réfraction quand le rayon quantique augmente, puis il commence à se stabiliser quand le rayon dépassé 20 nm. Toutefois La diminution de taille réduit énormément

l'indice de réfraction par rapport au volume et son comportement est l'inverse de celui du gap énergétique.

Le calcul de l'erreur relative de nos résultats par rapport aux valeurs théoriques nous a permis de connaître le modèle le plus précis des six modèles utilisés dans le calcul de l'indice de réfraction. Notant que pour les matériaux : GaAs, AlAs le modèle de Reddy et Anjaneyulu paraît le plus proche mais pour l'InAs, le GaSb, AlSb et GaP le modèle de Hervé et Vandamme est plus recommandé.

La constante diélectrique statique à haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$  est aussi calculée en utilisant le modèle prouvé dans le calcul de l'indice de réfraction et cela pour chaque composé nanostructuré, la variation de cette constante en fonction du rayon du point quantique est similaire à la variation de l'indice de réfraction. La réduction de sa valeur est remarquable avec la diminution de la taille.

Comme perspectives, cette étude théorique peut être faite avec d'autres méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques comme la méthode des ondes planes augmentées (APW). Comme nous pouvons exploiter d'autres nouvelles propriétés à l'échelle nanométrique.

Enfin ce travail nous a été très enrichissant. Il nous a permis de toucher de près à une partie très importante de matériaux qui sont les matériaux nanostructurés et voir l'effet du confinement sur leurs propriétés physiques.

## Liste des figures

### Chapitre I : Généralités sur les Semiconducteurs

Figure I-1 Matériaux semiconducteurs(a) silicium, (b) GaAs wafer .....	5
Figure I-2 Représentation schématique de la substitution d'un atome de phosphore à un atome de silicium(exemple du dopage N) .....	6
Figure I-3 Représentation schématique de la substitution d'un atome de Bore à un atome de silicium (exemple du dopage P).....	7
Figure I-4 Modèle proposant une structure des semi-conducteurs intrinsèques et semi-conducteurs extrinsèques avec dopage type n et p, à $T > 0K$ .....	8
Figure I-5 Le tableau périodique des éléments. ....	10
Figure I-6 Schéma montrant les structures atomiques des semi-conducteurs. (a) La structure Zinc-Blende des semi-conducteurs III-V et II-VI étudiés dans le présent travail (GaAs, InAs, InSb, InP, AlSb, CdSe, CdTe, HgTe).....	11
Figure I-7 Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées.....	11
Figure I-8 Les structures (a) Wurtzite et (ZnO). (b) La structure Rock-Salt des semiconducteurs IV-VI (PbSe). Les sphères bleues et jaunes indiquent les deux types d'atomes. Les cylindres rouges indiquent les liaisons aux premiers voisins.....	12
Figure I-9 Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel .....	13
Figure I-10 Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux.....	15
Figure I-11 Structure de bande d'énergie : (a) gap direct.....	16
Figure I-12 Structure de bande d'énergie : (b) gap indirect .....	16
Figure I-13 L'onde électromagnétique. ....	17

## Chapitre II : Semiconducteurs nanostructurés

Figure II-1 Des nanotechnologies aux nanomatériaux et aux nanodispositifs .....	24
Figure II-2 Proportion d'atomes en surface en fonction de la taille d'une particule .....	25
Figure II-3 Classification des nanomatériaux selon R.W. Siegel .....	25
Figure II-4 Exemples de nano-objets : nano TiO <sub>2</sub> , nano CeO <sub>2</sub> , nano SiO <sub>2</sub> , nanotube de carbone .....	26
Figure II-5 Schéma des nanoparticules de CdSe et ZnS .....	27
Figure II-6 Divers types de confinements .....	29
Figure II-7 Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des Nanocristaux .....	34
figure II-8 Illustration représentant les approches pour atteindre des nanostructures ....	35

## Chapitre III : Résultats et discussion

Figure III-1 Variation du gap d'énergie $E_F^F$ en fonction du rayon du point quantique pour l'GaAs. ....	47
Figure III-2 Variation du gap d'énergie $E_F^F$ en fonction du rayon du point quantique pour l'InAs .....	47
Figure III-3 Variation du gap d'énergie $E_F^F$ en fonction du rayon du point quantique pour l'InP. ....	48
Figure III-4 Variation du gap d'énergie $E_F^F$ en fonction du rayon du point quantique pour l'GaSb .....	48
Figure III-5 Variation du gap d'énergie $E_F^X$ en fonction du rayon du point quantique pour l'AlAs .....	49

Figure III-6 Variation du gap d'énergie $E_F^X$ en fonction du rayon du point quantique pour l'AlSb. ....	50
Figure III-7 Variation de gap d'énergie $E_F^X$ en fonction du rayon du point quantique pour l'GaP.....	50
Figure III-8 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'GaAs. ....	52
Figure III-9 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'InAs.....	52
Figure III-10 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'InP.....	53
Figure III-11 Variation des gaps d'énergie en fonction de rayon du point quantique pour l'GaSb.....	53
Figure III-12 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'AlAs. ....	54
Figure III-13 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour l'AlSb. ....	54
Figure III-14 Variation des gaps d'énergie en fonction de rayon du point quantique pour l'GaP.....	55
Figure III-15 Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction du rayon du point quantique.....	59
Figure III-16 Variation de l'indice de réfraction du GaAs en fonction du rayon du point quantique.....	60
Figure III-17 Variation de l'indice de réfraction du l'InAs en fonction du rayon du point quantique.....	60
Figure III-18 Variation de l'indice de réfraction du l' InAs en fonction du rayon du point quantique.....	61

Figure III-19 Variation de l'indice de réfraction du l'InP en fonction du rayon de point quantique.....	61
Figure III-20 Variation de l'indice de réfraction du l'InP en fonction du rayon du point quantique.....	62
Figure III-21 Variation de l'indice de réfraction du GaSb en fonction du rayon du point quantique.....	62
Figure III-22 Variation de l'indice de réfraction du GaSb en fonction du rayon du point quantique.....	63
Figure III-23 Variation de l'indice de réfraction du l'AlAs en fonction du rayon du point quantique.....	63
Figure III-24 Variation de l'indice de réfraction de l'AlAs en fonction de rayon du point quantique.....	64
Figure III-25 Variation de l'indice de réfraction du l'AlSb en fonction du rayon du point quantique.....	64
Figure III-26 Variation de l'indice de réfraction du l'AlSb en fonction du rayon du point quantique.....	65
Figure III-27 Variation de l'indice de réfraction du GaP en fonction du rayon du point quantique.....	65
Figure III-28 Variation de l'indice de réfraction du GaP en fonction du rayon du point quantique.....	66
Figure III-29 Constante diélectrique de haute fréquence du GaAs en fonction du rayon du point quantique. ....	70
Figure III-30 Constante diélectrique de haute fréquence du InAs en fonction du rayon du point quantique. ....	70
Figure III-31 Constante diélectrique de haute fréquence du InP en fonction du rayon du point quantique. ....	70

Figure III-32 Constante diélectrique de haute fréquence du GaSb en fonction du rayon du point quantique. ....	71
Figure III-33 Constante diélectrique de haute fréquence du AlAs en fonction du rayon du point quantique. ....	71
Figure III-34 Constante diélectrique de haute fréquence de l'AlSb en fonction du rayon du point quantique. ....	72
Figure III-35 Constante diélectrique haute fréquence du GaP en fonction du rayon du point quantique. ....	72

## Liste des Tableaux

### Chapitre I : Généralités sur les Semiconducteurs

Tableau I-1 Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V..... 13

Tableau I-2 Les valeurs expérimentales statique et optique de quelques matériaux Semi-conducteurs à 300 K..... 19

### Chapitre III : Résultats et discussion

Tableau III-1 Les facteurs de forme pseudopotentiels des composés GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb et GaP. .... 43

Tableau III-2 Les paramètres de maille des composés binaires semiconducteurs III-V 43

Tableau III-3 Les valeurs des gaps d'énergie en massif théoriques et calculés des composés semiconducteurs (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP). .... 44

Tableau III-4: Les masses effectives des électrons et des trous ..... 46

Tableau III-5 Tableau des transitions des gaps des composés binaires semiconducteurs III-V.....57

Tableau III-6 Valeurs des gaps d'énergie des composés III-V obtenues par la méthode de la masse effective et comparées aux données théoriques. .... 58

Tableau III-7 Calcul des indices de réfraction des semiconducteurs nanostructurés étudiés pour ( $a=100\text{nm}$ ), comparés aux données théoriques. .... 69

Tableau III-8 Validation du modèle empirique et détermination de la précision pour les composés binaires semiconducteurs nanostructurés III-V..... 70

## ***Abstract***

Based on the empirical pseudo-potential method, the present study focuses on the effect of quantum confinement on physical properties of zinc-blende (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP) spherical quantum dots. The size dependence of all features: energy levels, direct and indirect energy band gap, refractive index and high-frequency dielectric constant being considered here have been analyzed and discussed. . As a result of the quantum confinement effect, the predicted direct energy band gap is found to be significantly augmented relative to the bulk value, whereas the obtained refractive index and high-frequency dielectric constant is shown to be significantly reduced.

## ***Résumé***

Sur la base de la méthode empirique du pseudo-potentiel, la présente étude se concentre sur l'effet du confinement quantique sur les propriétés physiques du zinc blende (GaAs, InAs, InP, GaSb, AlAs, AlSb, GaP) points quantiques sphériques. La dépendance de la taille de tous les propriétés physiques : niveaux d'énergie, gap énergétiques direct et indirect, l'indice de réfraction et la constante diélectrique haute fréquence examinés ici ont été analysés et discutés. En raison de l'effet du confinement quantique, le gap direct est considérablement augmentée par rapport au la valeur du volume, tandis que l'indice de réfraction obtenu et les constantes diélectriques à haute fréquence sont considérablement réduites.

## ***المخلص***

بناءً على طريقة الإمكانات الزائفة التجريبية ، تركز الدراسة الحالية على تأثير الحبس الكمي على الخصائص الفيزيائية لمزيج الزنك، (GaP ، AlSb ، AlAs ، GaSb ، InP ، InAs ، GaAs) للنقاط الكمية الكروية. اعتماد الحجم على جميع الخصائص الفيزيائية: مستويات الطاقة ، فجوة نطاق الطاقة المباشرة وغير المباشرة ، ومعامل الانكسار وثابت العزل الكهربائي عالي التردد التي يتم النظر فيها هنا تم تحليلها ومناقشتها . ونتيجة لتأثير الحبس الكمي ، تم زيادة فجوة نطاق الطاقة المباشرة المتوقعة بشكل كبير بالنسبة إلى القيمة المدرجة للحجم ، في حين يظهر أن معامل الانكسار الذي تم الحصول عليه وثابت العزل الكهربائي عالي التردد قد انخفض بشكل كبير