

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
N° :...../2018.....



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

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: BENSEFA Lwiza

Intitulé

**Effet du désordre compositionnel sur les
propriétés électroniques et optiques des alliages
ternaires semiconducteurs $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$**

Soutenu le 26/06 /2018 devant le jury composé de:

Nadir Bouarissa	Université de M'sila	Président
Mezrag Fadila	Université de M'sila	Rapporteur
Saib Salima	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2017/2018

REMERCIEMENTS

Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

J'adresse mes vifs remerciements à mon Encadreur Dr Mezrag Fadila pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet et pour les précieux conseils qu'elle m'a donné, et pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs.

Je tiens à remercier, le président de jury, Professeur Nadir Bouarissa et l'examineur, professeur Saib Salima, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail.

Je ne pourrais jamais oublier le soutien moral, l'aide et l'encouragement de mon amie manel , en un mot, merci pour leur amitié précieuse.

Enfin, je destine mes derniers remerciements à ma famille.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

A mes chers Parents

A ma Sœur: Douaa

A mes Frères : Yacine, Islam, Radwane

A toute ma famille et à mes amis

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

LOUIZA

Tables des matières

Remerciement..... I

Dédicace II

Tables des matières..... III

Introduction Générale..... 1

Références bibliographiques.....3

Chapitre I : Propriétés Fondamentales Des Semi-conducteurs III-V

I.1.Introduction4

I.2. Définition d'un semi-conducteur4

I.3. Différents types de semi-conducteurs.....4

 I.3.1. Semi-conducteur intrinsèque5

 I.3.2. Semi-conducteur extrinsèque5

I.4. Propriétés électroniques des semi-conducteurs III-V.....6

 I.4.1. La structure de bande.....6

 I.4.2.Gap énergétique.....6

I.5. Propriétés optiques des semi-conducteurs III-V.....8

 I.5.1. l'indice de réfraction.....9

 I.5.2. transition radiative (interaction électron-photon).....10

 I.5.3. Le spectre électromagnétique.....10

I.6. Propriétés diélectriques.....11

I.7. Conclusion.....12

Références bibliographiques.....13

**Chapitre II : Méthodes de calcul de la structure de bandes
électroniques des semi-conducteurs**

II.1 Introduction.....	14
II.2.Hamiltonien total du cristal.....	14
II.3. L'approximation adiabatique.....	15
II.4. L'approximation à un électron de Hartee-Fock.....	16
II.4.1. Théorie des électrons presque libres.....	16
II.4.2. Théorie des liaisons fortes.....	18
II.5.La méthode des pseudopotentiels (P.M).....	19
II.5.1) Formalisme mathématique de la méthode.....	20
II.5.2) Caractéristiques du pseudo potentiel.....	22
II.5.2.1) Le modèle local.....	22
II.5.2.1.1) Le modèle d'Ashcrof.....	23
II.5.2.1.2) Le modèle de Heine Aberenkov.....	23
II.5.2.2) Le modèle non local.....	23
II.5.2.2.1) Modèle d'Ashcroft.....	24
II.5.2.2.2) Modèle de Heine-Abarenkov.....	24
II.5.2.2.3) Modèle de Gauss.....	25
II.6. La méthode empirique des pseudopotentiels (E.P.M).....	26
II.7. La méthode du calcul.....	27
II.8. Conclusion.....	28
Références bibliographiques.....	29

Chapitre III : Théorie des alliages

III.1 Introduction.....	31
III.2. L'approximation du cristal virtuel (VCA).....	31
III.2.1. Cas d'un alliage ternaire.....	31
III.2.2. Propriétés physiques : Cas de l'alliage $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$	32
III.2.2.1. Constante du réseau de l'alliage ternaire.....	32
III.2.2.2. Gap énergétique de l'alliage ternaire.....	33
III.3. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).....	34
III.4. Conclusion.....	35
Références bibliographiques.....	36

Chapitre IV: Résultats et discussions

IV.1. Etude des propriétés électroniques.....	37
IV.2. Propriétés optiques.....	46
IV.2.1 L'indice de réfraction.....	46
IV.2. 2 La constante diélectrique.....	49
IV.2.3 transition radiative (interaction électron-photon).....	51
Références bibliographiques.....	54
Conclusion Générale.....	55

Listes des figures et Listes des tableaux

Résumé

Introduction Générale

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

Le gap énergétique et les constantes optiques sont des paramètres importants et jouent un rôle important en physique. Une connaissance précise de la structure de bandes du matériau étudié est nécessaire pour l'évaluation de son domaine d'application, les transitions directs et indirects en fonction de la composition sont particulièrement d'une importance principale pour l'étude et la fabrication des guides d'ondes.[2,3]

Quoique plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel reste la méthode la plus simple et rapide, ainsi elle donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience, cependant l'approximation du cristal virtuel VCA est connue pour rendre les paramètres du bowing (courbure) du gap fondamental aussi faible que les résultats trouvés expérimentalement [4], pour remédier à ce problème, il est nécessaire d'introduire l'effet du désordre compositionnel dans la VCA.

Dans notre présent travail, nous avons investi la dépendance en composition des quantités physiques liées à la structure de bandes électronique tels que, les gaps énergétiques, de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ on utilisant la méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M) avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. La connaissance du gap énergétique nous a permis de calculer quelques paramètres optiques tels que l'indice de réfraction, la constante diélectrique de haute fréquence et de voir leur dépendance en fonction de la concentration x du phosphore on utilisant bien sûr différents relations empiriques liant l'indice de réfraction au gap énergétique. Une attention particulière est donnée à la

variation de la longueur d'onde en fonction du gap autrement dit en fonction de la concentration x du phosphore de notre alliage d'étude dans le but d'évaluer son spectre d'émission.

Le plan de travail que nous présentons dans ce mémoire est organisé comme suit :

Après une introduction générale, le premier chapitre nous présenterons les propriétés fondamentales des semi-conducteurs.

Le deuxième chapitre est consacré à un rappel de principe de certaines méthodes théoriques utilisées dans le calcul de la structure de bandes électronique et se concentre sur l'une des méthodes théoriques principales de notre travail appelée méthode empirique du pseudopotentiel (E.P.M).

Le troisième chapitre à fait l'objet d'un rappel de la théorie des alliages, ainsi nous avons exposé l'approximation du cristal virtuel avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel comme potentiel effectif.

Nos résultats d'étude, leurs interprétations leur comparaison avec d'autres travaux expérimentaux et théoriques sont présentés dans le quatrième chapitre.

Finalement, notre travail est achevé par une conclusion générale.

Références bibliographiques

[1] N.Bouarissa, R.Bachiri ,Phys B .322(2002)193.

[2] I.Vurgaftman ,J.R.Meyer , L.R.Ram-Mohon,J.Appl.Phys.89(2001).

[3] N.Bouarissa,Mater.Sci.Eng.B86(2001)53.

[4] K.Kassali,Thèse de magister,Univ.de Sétif ,Algeria (1996), and references cited therein.

Chapitre I

Propriétés Fondamentales des Semiconducteurs III-V

I.1.Introduction :

Dans l'ensemble des matériaux, les semiconducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semiconducteur.[1]

Dans ce chapitre, nous allons rappeler quelques propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs.

I.2. Définition d'un semi-conducteur :

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

- La température,
- L'éclairement
- La présence d'impuretés (dopage)

I.3. Différents types de semi-conducteurs :

Par son habilité à conduire le courant, un semi-conducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant. Un semi-conducteur à l'état pur (intrinsèque) n'est pas un bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments uniques les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le silicium, le germanium et le carbone. [2]

Il existe deux types de semi-conducteurs, l'un pur dit intrinsèque et l'autre dopé appelé extrinsèque.

I.3.1. Semi-conducteur intrinsèque :

Si le cristal est si pur que les impuretés, il donne une contribution négligeable aux densités de porteurs de charge, on parle de semi-conducteur intrinsèque. Dans ce cas, les électrons de la bande de conduction ne peuvent provenir que des niveaux de la bande de valence autre fois occupés, laissant des trous derrière eux. Le nombre d'électrons de la bande de conduction est donc égal au nombre de trous dans la bande de valence. [3]

$$n_c(T) = n_i(T) = p_v(T) \quad (I - 1)$$

I.3.2. Semi-conducteur extrinsèque :

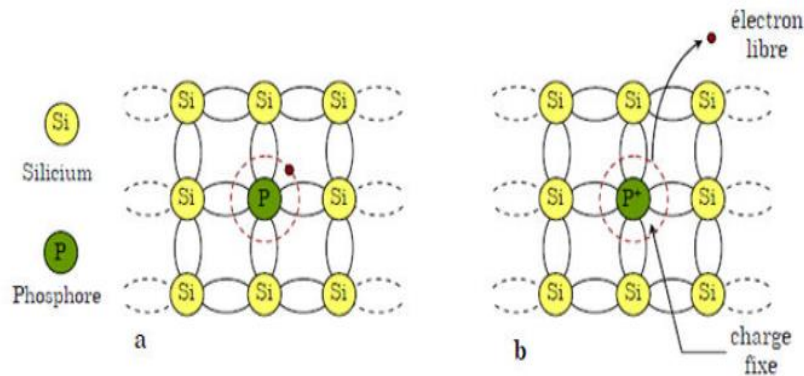
Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques lui conférant des propriétés électriques adaptées au domaine d'utilisation de ce matériau. L'introduction de ces dopants perturbe les bandes interdites, en créant des états accessibles à l'intérieur de ces bandes et rend le gap plus perméable. Selon le type de dopage, on distingue deux types de semi-conducteurs .[4]

I.3.2.1. Semi-conducteur extrinsèque de type N :

L'insertion d'atomes pentavalents dans la structure cristalline d'un semi-conducteur permet d'introduire artificiellement des électrons libres. En effet, un des cinq électrons de la couche périphérique des atomes pentavalents ne participe pas aux liaisons de valence.

Dans un semi-conducteur de type N les électrons libres sont donc majoritaires alors que les trous sont minoritaires. Les atomes donneurs sont les atomes pentavalents que l'on introduit dans le semi-conducteur pour le rendre extrinsèque de type N, ces atomes sont susceptibles de donner un électron libre.

On parle de dopage de type N (Figure.I.1)

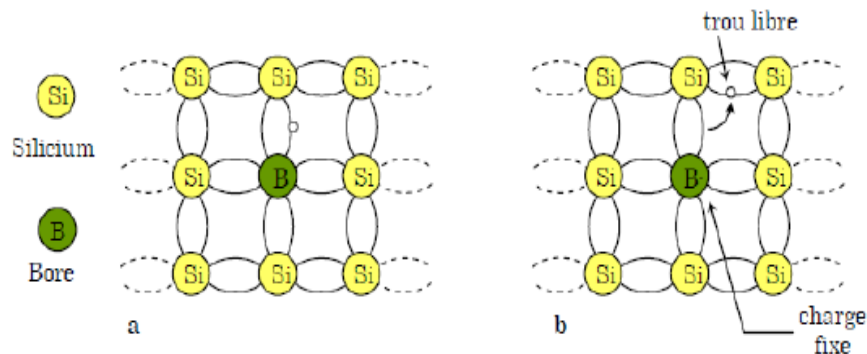


Figure(I.1): Silicium dopé au Phosphore. a) $k=0k$ et b) $k \neq 0k$ [3]

I.3.2.2. Semi-conducteur extrinsèque de type P :

Dans le semi-conducteur, il est également possible d'introduire artificiellement des trous plutôt que des électrons libres, il suffit d'insérer des atomes trivalents dans la structure cristalline. Les électrons de la couche périphérique de ces atomes prennent part à trois liaisons de valences, laissant un trou dans la quatrième. Un électron quelconque peut quitter la liaison qu'il occupe, laissant à son tour un trou derrière lui et venir occuper la place vacante. Tout se passe alors comme si le trou introduisant était libre de se déplacer dans un réseau cristallin.

Nous appelons atomes accepteurs, les atomes trivalents introduits dans le semi-conducteur pour le rendre extrinsèque de type P, sont susceptibles d'accepter un électron de valence. On parle de dopage de type P (Figure.I.2).



Figure(I.2): Silicium dopé au Bore. a) $k = 0k$ et b) $k \neq 0k$

I.4. Propriétés électroniques des semi-conducteurs III-V :

I.4.1. La structure de bande :

La périodicité dans le cristal conduit à une distribution des états énergétiques sous la forme de bandes définies par la relation de dispersion. L'allure générale des bandes est la même pour tous les composés III-V considérés. Leur structure c'est-à-dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence correspondent à la même valeur du vecteur d'onde k dans la structure de bandes. Dans ces matériaux, les transitions entre les bandes de valence et de conduction seront alors le plus souvent radiatives. Cette caractéristique leur confère des propriétés optiques remarquables :

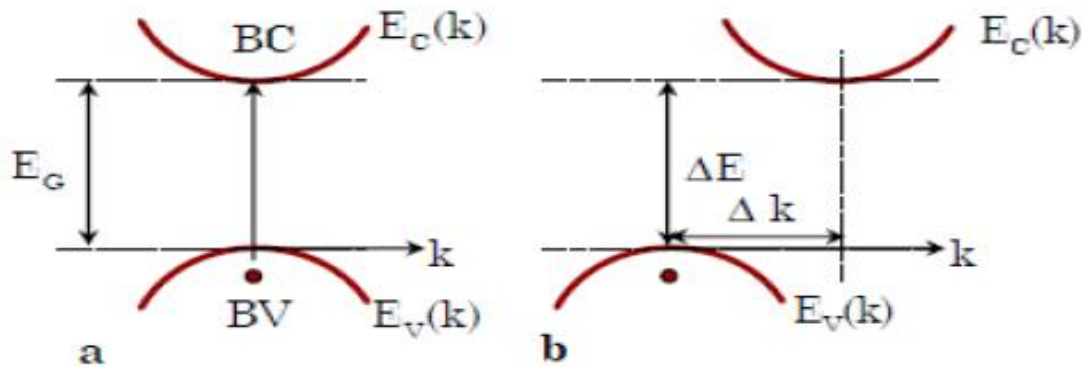
L'émission de photons par recombinaison des porteurs en excès permet leur utilisation pour la fabrication de diodes lasers ou électroluminescentes.

Le bon rendement de conversion de photons en électrons peut être utilisé dans la Photo détection.[5]

I.4.2. Gap énergétique :

Les courbes $E_{cv}(k)$ dites aussi relations de dispersion où E_c est le minimum de la bande de conduction, E_v le maximum de la bande de valence et \vec{K} le vecteur d'onde associé à un électron, ces courbes font apparaître deux types de semi-conducteur.

Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{K} on dit que le semi-conducteur est à gap direct. Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{K} différentes, on dit que le semi-conducteur est à gap indirect. (Figure.I.3).



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

Figure (I.3): Semiconducteur a gap direct et indirect

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique (en particulier lumineux), et donc dans le fonctionnement des composants utilisés en optoélectronique. Nous peut remarquer, que dans un semi-conducteur à gap direct un électron du haut de la bande de valence qui acquière une énergie passe dans la bande de conduction sans changer de quantité.

I.5. Propriétés optiques des semi-conducteurs III-V

La matière est formée d'atomes, souvent regroupés par molécules. L'interaction entre la matière et une onde électromagnétique incidente met en jeu l'excitation des nuages électroniques des atomes. Une description rigoureuse de l'interaction entre le champ électromagnétique et les atomes ou molécules nécessite le formalisme de la mécanique quantique.[6.7]

Un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, c'est l'absorption fondamentale. Ce processus sera mis à profit dans les capteurs de rayonnement.

Un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon, c'est l'émission spontanée.

Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs de rayonnements tels que les diodes électroluminescentes.

Un photon présent dans le semi-conducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence, avec émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semi-conducteur .[8]

I.5.1. l'indice de réfraction

Plusieurs approches ont été envisagées pour corrélérer le gap énergétique des semi-conducteurs à leur indice de réfraction.

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques, les fibres optiques ...etc. [9]

1. Modèle de Moss :[10]

Etait le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction n et le gap d'énergie E_g basée sur le modèle atomique.

$$n^4 E_g = K \quad (I - 2)$$

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

2.Modèle de Gupta et Ravindra [11]

ont proposé une relation linéaire entre n et E_g donnée par

$$n = 4.084 - 0.62E_g \quad (I - 3)$$

3. Modèle de Hervé et Vandamme [12]

$$n = [1 + (\frac{13.6}{E_g + 3.4})^2]^{1/2} \quad (I - 4)$$

4. Modèle de Reddy et Anjaneyulu [13]

$$E_g e^n = 36.3 \quad (I - 5)$$

5. Modèle de Ravindra [7]

$$n = 4.16 - 0.85E_g \quad (I - 6)$$

6. Modèle de Reddy et Ahammed [14]

$$n^4(E_g - 0.365) = 154 \quad (I - 7)$$

I.5.2. transition radiative (interaction électron-photon):

Si on repère par les indices i et f , les états : initial et final de l'électron, et par p l'état du photon, les règles de conservation s'écrivent :

$$E_f - E_i = \pm E_p \quad (I - 8)$$

$$\text{ou: } \vec{K}_f - \vec{K}_i = \pm \vec{K}_p \quad (I - 9)$$

Où le signe (+) correspond à l'absorption et le signe (-) à l'émission.

Dans l'étude des composants optoélectroniques, il est utile d'avoir en permanence à l'esprit, la relation énergie - longueur d'onde, pour traduire en (eV) la caractéristique d'un rayonnement définie en $m\mu$ [15].

$$E = h\nu = \frac{h}{T} = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (I - 10)$$

$$\text{donc: } E(eV) = \frac{1.24}{\lambda(\mu m)} \quad (I - 11)$$

I.5.3. Le spectre électromagnétique :

Les ondes électromagnétiques couvrent un grand nombre de phénomènes, elles sont extrêmement utiles dans notre vie de tous les jours.

Il faut dire que ces rayonnements ont la même nature. D'ailleurs ils portent des noms différents, mais c'est aussi parce qu'ils se manipulent très différemment les uns des autres, ces ondes sont : Les ondes radio, Micro Ondes, Infrarouges, Lumière visible, Ultraviolet, Rayon X, Rayons gammas.

Tous ces noms désignent en fait le même phénomène onde électromagnétique. Chaque type de rayonnement est caractérisé par une gamme de fréquence, en partant de

ceux qui ont les plus faibles fréquences, c'est ce qu'on appelle spectre électromagnétique présenté sur la figure (I-4) .[16]

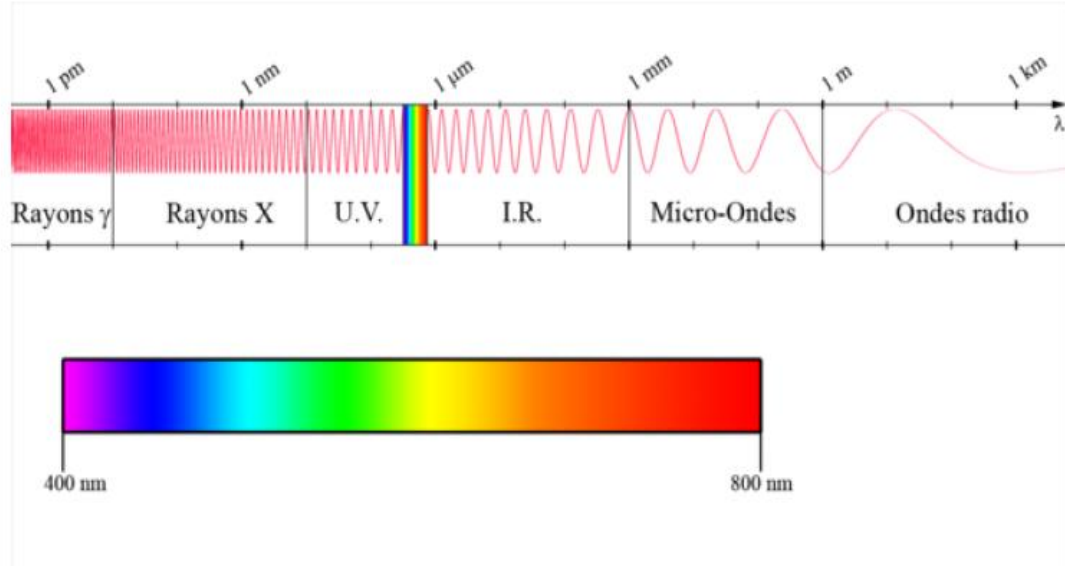


Figure (I.4): Le spectre électromagnétique.

I.6 . Propriétés diélectriques:

Les constantes diélectriques montrent la relation qui relie la polarisation diélectrique et le champ macroscopique induit dans le matériau. La contribution à la polarisabilité est électronique, ionique et dipolaire. La contribution électronique provient du déplacement des couches électroniques par rapport au noyau. La partie ionique résulte du déplacement d'un ion chargé par rapport aux autres ions. La polarisabilité dipolaire provient des moments dipolaires électriques permanents dans les molécules. Dans le domaine des fréquences optiques, la constante diélectrique provient pratiquement de la polarisation électronique.

Pour toutes les modèles, relations I (2,3,4,5,6,7) on considère que la constante diélectrique à haute fréquence est donnée par:

$$\varepsilon_{\infty} = n^2 \quad (I - 12)$$

n : l'indice de réfraction.

I-7. Conclusion :

De nombreux efforts sont consacrés à la compréhension des propriétés fondamentales des matériaux semiconducteurs soumis à une interaction optique ou électrique. Ces propriétés sont essentiellement optiques, structurales et diélectriques.

Cependant, la connaissance de ces propriétés représente un intérêt fondamental dans la détermination des structures électroniques et atomiques de ces semiconducteurs et par la suite l'évaluation de leurs paramètres physiques, ce qui permet ainsi leurs caractérisation.

La maîtrise de ces paramètres physiques rende ces matériaux d'un potentiel technologique, ils sont très exploitables surtout en photonique et en optoélectronique.

Références Bibliographiques

- [1] I.Hernández.Calderon," Opitical properties and electronic of wide band gap II-VI Semi-conductors ",in II-VI semi-conductor Materials and their Applications Taylor and Francis New York ,113-170 (2002).
- [2] T.L. Floyd « Electronique : Composants et systèmes d'application », Ed Reynald Gouletinc , (2004).
- [3] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, « Physique des solides », Ed EDP Science, France, (2002).
- [4] R. Omnès, « Comprendre la mécanique quantique », Ed EDP sciences, France (1999).
- [5] p.kirevv,la physique de semi-conducteurs ,2 e édition,édition Mir.Moscou ,(1975).
- [6] G. Grynberg, A. Aspect, and C. Fabre, « Introduction aux lasers et à l'optique quantique« Ed Ellipses, Paris, (1997).
- [7] J.L. Coutaz « Optoélectronique » Ed EDP Sciences, France, (2008).
- [8] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.V. R. Rao, Infrared Phys, Vol.34, No.1, (1993) 95
- [9] N. M. Ravindra, V. K. Srivastava, Infrared Phys. 19 (1979) 603.
- [10] V. P. Gupta, N. M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. B 100 (1980) 715.
- [11] P. Hervé, L. K. J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [12] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. B 174 (1992) k91.
- [13] R. R. Reddy, Y. N. Ahammed, Infrared Phys. Technol. 36 (1995) 825.
- [14] J. C. Charmet, Mécanique du solide et des matériaux, Elasticité-Plasticité-Rupture, ESPCI Paris Tech (2007).
- [15] www.sbarbati.wordpress.com.
- [16] J. C. Charmet, Mécanique du solide et des matériaux, Elasticité-Plasticité-Rupture, ESPCI Paris Tech (2007).

Chapitre II

Méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques des semi-conducteurs

II.1 Introduction:

On peut interpréter plusieurs phénomènes physiques qui se passent dans les corps solides d'après l'étude de la structure de bandes. Mais il est difficile de trouver une solution générale à l'équation de Schrödinger qui décrit tous les interactions entre les particules constituant un solide [1-2]: les électrons et les noyaux atomiques, où la distribution de ces derniers et leurs mouvements déterminent l'ensemble des propriétés du matériau [3]. Le problème principal qu'on retrouve dans le calcul de la structure de bandes d'un cristal est l'absence d'une formule analytique du potentiel cristallin.

Nous allons décrire dans ce chapitre, les différentes Méthodes du calcul de la structure de bandes électroniques. Ces méthodes permettent de simplifier les résolutions des équations générales de Schrödinger pour certains systèmes .[1, 4, 5]

II.2.Hamiltonien total du cristal:

Le cristal est un ensemble de noyaux et des électrons en interaction, il est décrit par l'Hamiltonien total défini par [3,4] :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (\text{II} - 1)$$

Ou

T_e :Représente l'énergie cinétique des électrons.

T_n L'énergie cinétique des noyaux.

V_{ee} l'énergie d'attraction électron – électron.

V_{en} l'énergie d'attraction électron – noyau.

V_{nn} l'énergie d'attraction noyau – noyau.

La résolution de l'équation de Schrödinger donne les énergies propres et les fonctions d'ondes propres

$$H\Psi(R, r) = E\Psi(R, r) \quad (\text{II} - 2)$$

Où :

R représente, les coordonnées des noyaux et r celles des électrons, E l'énergie totale du système et $\psi(r, R)$ la fonction d'onde du système [6].

Cependant la résolution de l'équation (II-2) ne peut pas être résolu qu'en faisant certains approximations.

II.3. L'approximation adiabatique:

L'approximation de Born Oppenheimer dite adiabatique est la première des approximations utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger pour les systèmes complexes, contenant plus d'un où deux électrons, elle sépare le mouvement des électrons et des noyaux en se basant sur la différence de masse entre les noyaux atomiques et les électrons $M_n \gg m_e$, elle conduit donc à la séparation du l'Hamiltonien total en une partie électronique et une partie nucléaire reliée aux noyaux, ces derniers sont considérés fixes. Les états propres du système sont alors caractérisés par des fonctions d'onde produit d'une fonction d'onde électronique par une fonction d'onde nucléaire

$$\psi(R, r) = \psi_n(R) \psi_e(R, r) \quad (\text{II} - 3)$$

Compte tenu de cette hypothèse, l'hamiltonien total s'écrit:

$$[T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn}] \psi_n(R) \psi_e(R, r) = E \psi_n(R) \psi_e(R, r) \quad (\text{II} - 4)$$

et se ramène aux deux équations interdépendantes

$$[T_e + V_{ee} + V_{en}] \psi_e(R, r) = E_e(R) \psi_e(R, r) \quad (\text{II} - 5)$$

On peut écrire:

$$[T_n + V_{nn} + E_e(R)] \psi_n(R) = E \psi_n(R) \quad (\text{II} - 6)$$

Pour les états d'énergie électroniques du cristal on n'utilise que l'équation (II-5), les noyaux étant supposés fixes à leur position d'équilibre. Mais cette équation traduit l'évolution d'un système à n corps et demeure un problème très difficile encore à

résoudre. Pour simplifier ce problème on se place dans l'approximation à un électron dite l'approximation de Hartree-Fock. [7]

II.4. L'approximation à un électron de Hartree-Fock :

Cette approximation proposée par Hartree-Fock consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment dans un champ moyen créé par tous les autres électrons et noyaux.

L'Hamiltonien total H du système définit comme la somme d'Hamiltoniens des électrons H_i constituant ce système, où chaque Hamiltonien H_i peut décrire tout le système.

$$H = \sum_i H_i \quad (II - 7)$$

$$\text{avec: } H_i = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (II - 8)$$

L'équation générale du solide s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = E(k)\psi(r) \quad (II - 9)$$

Avec $\psi(r)$ et $E(k)$ sont respectivement la fonction d'onde propre et l'énergie propre du système.

$V(r)$ est le potentiel du système, possède la périodicité du réseau de ce dernier. La détermination de ce potentiel est l'un des problèmes du calcul de la structure de bandes électroniques.

Nous présenterons par la suite un rappel sur des méthodes du calcul élémentaires : Méthode des électrons presque libres [4] et méthode des liaisons fortes (ou les électrons fortement liés) qui peuvent résoudre le problème du mouvement de l'électron dans un champ périodique et donner les états électroniques du cristal.

II.4.1. Théorie des électrons presque libres:

Dans l'approximation des électrons presque libres, on suppose que l'interaction avec le champ périodique du réseau est beaucoup plus faible que l'énergie cinétique de

cet électron et que l'influence du potentiel du réseau est similaire à une perturbation périodique.

$$H = T + V(r) \quad (II - 10)$$

Avec: $V(r) = W(r)$ est la perturbation

La théorie des perturbations permet la détermination des corrections portées sur l'énergie E^0 et la fonction ψ^0 d'un système non perturbé, quand on lui impose une perturbation.

$$H = H_0 = T = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \quad (II - 11)$$

L'équation de Schrödinger pour une particule libre est:

$$H_0 \psi^0(r) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \Delta \psi^0(r) = E^0(k) \psi^0(k) \quad (II - 12)$$

Si nous appliquons la théorie de perturbations d'ordre zéro, on trouve:

$$E^0(k) = \frac{-\hbar^2 k^2}{2m} \quad (II - 13)$$

$$\text{et: } \psi^0(r) = V^{-1/2} \exp(ikr) \quad (II - 14)$$

Où V : est le volume total du cristal.

Les fonctions d'ondes $\psi^0(r)$ sont orthonormées.

Pour appliquer la théorie de perturbations du premier ordre, il faut connaître les éléments de la matrice de la perturbation périodique $V(r)$. Nous peut alors mettre le potentiel en termes de série de Fourier. [5]

$$V(r) = \sum_G V_G \exp\left(iG \frac{2\pi}{a} r\right) \quad (II - 15)$$

Par l'application de la théorie des perturbations du premier ordre, on trouve:

$$E^1 = \langle \psi_{k'}^0(r) | V(r) | \psi_k^0(r) \rangle = \int \psi_{k'}^0(r) V(r) \psi_k^0(r) dr = W_{KK'} \quad (II - 16)$$

$$E^1 = \begin{cases} 0 & \text{pour } k \neq \frac{n\pi}{a} \\ \pm V_G & \text{pour } k = \frac{n\pi}{a} \end{cases} \quad (\text{II} - 17)$$

ainsi:

$$E(k) = E^0(k) + E^1 = E^0(k) + \begin{cases} 0 & \text{pour } k \neq \frac{n\pi}{a} \\ \pm V_G & \text{pour } k = \frac{n\pi}{a} \end{cases} \quad (\text{II} - 18)$$

Par l'application de l'approximation d'ordre deux, on trouve:

$$E^2 = \sum_{k'} \frac{W_{kk'}^2}{E^0(k) - E^0(k')} = \sum_{k'} \frac{\langle \psi_{k'}^0 | V(r) | \psi_k^0 \rangle}{E^0(k) - E^0(k')} \quad (\text{II} - 19)$$

L'énergie total du système s'écrit:

$$\Theta(r) = E(k) = E^0(k) + W_{kk'} + \sum_{k'} \frac{W_{kk'}^2}{E^0(k) - E^0(k')} \quad (\text{II} - 20)$$

le troisième terme est très négligeable par rapport aux deux autre termes.

Donc :

$$E(k) = E^0(k) + \Theta(r) + W_{kk'} = \frac{\eta^2 k^2}{2m} + \Theta(r) + \begin{cases} 0 \\ \pm V_G \end{cases} \quad (\text{II} - 21)$$

Physiquement, ce terme signifie que les états en $k = \pm \frac{n\pi}{a}$ sont des états dégénérés [9].

II.4.2. Théorie des liaisons fortes:

La méthode des liaisons fortes procède de l'idée que, les états électroniques dans le cristal, sont essentiellement des états atomiques plus ou moins perturbés par la nature périodique du cristal, dont les niveaux d'énergie électroniques et les fonctions d'ondes ainsi que le potentiel du solide sont de nature atomique.

Dans cette méthode, nous suppose que l'énergie d'interaction de l'électron avec le noyau est bien supérieure que l'énergie cinétique, dans ce cas on adopte l'état d'un électron dans un atome isolé.[7]

L'Hamiltonien total du cristal peut être approximé comme suit:

$$H = H_a = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_a(r) \quad (\text{II} - 22)$$

Où $V_a(r)$ est l'énergie potentielle de l'électron lié à l'atome considéré.

Les fonctions propres et les valeurs propres sont déterminées par l'équation de Schrödinger:

$$H_a \psi_a(r) = E_a \psi_a(r) \quad (\text{II} - 23)$$

E_a étant l'énergie de l'atome isolé et $\psi_a(r)$ fonction d'onde correspondant à cette énergie et normée à l'unité.

La fonction d'un électron doit obéir à la condition de transition de Bloch de la forme :[8]

$$\psi(r) = \sum_n C_n \psi_a(r - n) \quad (\text{II} - 24)$$

$\psi(n-r)$ fonction d'onde de l'électron appartenant à la $n^{\text{ième}}$ atome.

C_n coefficient choisis de telle sorte que $\psi_a(r)$ vérifie la condition de périodicité de Bloch.

$$C_n = \exp(ikn) \quad (\text{II} - 25)$$

la méthode des liaisons fortes est bien adaptée au calcul de bandes profondes étroites, un peu moins adaptée au calcul de bande de valence et peu adaptée au calcul de bande de conduction. [5]

L'étude de structure de bandes ramène à utiliser certaines méthodes développées qui s'améliorent le calcul de ces structures.

II.5. La méthode des pseudopotentiels (P.M):

La méthode du pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies $E_n(k)$ et d'autres propriétés des semiconducteurs, la vertu majeure de cette approche est seulement les électrons de valence qui sont considérés.

Autrement dit, les électrons du coeur sont supposés gelés dans la configuration atomique et les électrons de valence se meuvent dans un potentiel périodique d'un seul électron.

Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode N.F.E.M pour résoudre l'équation de Schrödinger.[10] L'explication se repose également, sur une hypothèse importante qui utilise les propriétés d'orthogonalités des états de valence et de conduction avec les états du coeur, il faut dire que, dans ce contexte cette approche est similaire à la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W).

L'effet de l'orthogonalité est incluse dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel. Néanmoins, l'effet d'orthogonalisation aux états du coeur revient à extraire du potentiel cristallin, la contribution rapidement variable de la région du coeur. Le pseudopotentiel V_p est alors lentement variable, ce qui autorise à envisager un traitement du problème en terme de perturbation .[11,14]

II.5.1) Formalisme mathématique de la méthode:

Nous adopte ici l'hypothèse suivant laquelle, la fonction d'onde exacte pour un électron de valence ψ_k est une combinaison linéaire d'ondes planes orthogonalisées (O.P.W). Soit Φ_k^V l'onde plane pour ce développement et Φ_k^C les états atomiques occupés du cœur .[10]

Il l'en résulte que l'on peut écrire ψ_k de la manière suivante :

$$\psi_k(r) = \Phi_k^V(r) + \sum b_c \Phi_k^C(r) \quad (II - 26)$$

La fonction d'onde doit être orthogonale aux états du cœur Φ_c ,

$$\langle \Phi_k^V | \psi_k \rangle = 0 \quad (II - 27)$$

Par ailleurs la fonction d'onde ψ_k satisfait à la relation :

$$\psi_k = \Phi_k^V - \sum_c \langle \Phi_k^C | \Phi_k^V \rangle \Phi_k^C \quad (II - 28)$$

Cette expression de ψ_k sera substituée dans l'équation de Schrödinger:

$$H \psi_k = E_k \psi_k \quad (II - 29)$$

En reportant les développements des équations (26) et (28) dans (29) on trouve :

$$H \Phi_K^V - H \sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \psi_K \quad (II - 30)$$

Sachant que :

$$H \Phi_K^C = E_K^C \Phi_K^C \quad (II - 31)$$

Et par la suite :

$$H \Phi_K^V - E_K^C \sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \psi_K \quad (II - 32)$$

Et d'une façon équivalente :

$$H \Phi_K^V - E_K^C \sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \left[\Phi_K^V - \sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \right] \quad (II - 33)$$

Où :

$$H \Phi_K^V + \sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_K \Phi_K^V \quad (II - 34)$$

Nous faisant intervenir le potentiel $V(r)$ en posant :

$$V(r) \Phi_K^V = \sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \quad (II - 35)$$

L'équation (30) peut s'écrire alors de la façon condensée :

$$(H + V_R) \Phi_K^V = E_K \Phi_K^V \quad (II - 36)$$

Si l'énergie est séparée en énergie cinétique et en énergie potentielle , l'expression (31) devient :

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V_C + V_R \right) \Phi_K^V = \left(\frac{P^2}{2m} + V_P \right) \Phi_K^V = E_K \Phi_K^V \quad (II - 37)$$

V_C : Est le potentiel attractif (négatif) du coeur.

V_R : Est le potentiel répulsif (positif).

V_P : Est le pseudopotentiel faible qu'on peut l'écrire comme : $V_P = V_C + V_R$

Φ_K^V : Est la pseudofonction d'onde.

Par ailleurs, il est important de noter que l'énergie ε_K correspondant à Φ_K^V n'est pas une pseudoénergie mais la vraie énergie correspondante à la fonction d'onde du système. Ce qui permet de dire que, la résolution de l'équation de Schrödinger se base sur la considération de ce pseudopotentiel en terme de perturbation.

II.5.2) Caractéristiques du pseudo potentiel :

Le pseudopotentiel V_P est un opérateur qui n'a pas une expression locale $V_P(r)$, pour le connaître et l'introduire dans les calculs, il suffit de connaître ses éléments de matrice déterminés sur une base complète de fonctions.

Etant donné que E_K^V est légèrement supérieur à E_K^C , donc V_R est toujours positif, ainsi $V_P = V_C + V_R$ est très faible, d'où l'utilisation de la théorie des électrons presque libres pour le calcul des niveaux de valence.

Si on néglige l'effet du cœur, le pseudopotentiel devient local et dépend explicitement de la position r , sinon, le potentiel devient non local. [14]

II-5-2-1) Le modèle local

Dans cette méthode, pour déterminer les fonctions propres et les valeurs propres de l'équation de Schrödinger, on s'attend nécessairement que l'on ait toujours une forme du potentiel.

En fait, un potentiel local dépendant de la variable r , reste le modèle le plus simple pour ce fait, plusieurs formes du potentiel ont été proposées

Le premier modèle consiste en un potentiel de coulomb à une large distance et un potentiel constant dans la région du cœur. Le potentiel $V(r)$ est donné par la relation [10]:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ \frac{-Ze}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II} - 38)$$

Avec : Z est le nombre d'électron et r_c est le rayon du coeur.

II.5.2.1.1) Le modèle d'Ashcroft:

Heine et Abarenkov ont introduit plus de flexibilité pour cet ajustement par l'introduction d'un potentiel A considéré constant dans la région du cœur. Dans ce cas, la forme du potentiel sera .[12]

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (II - 39)$$

II-5-2-1-2) Le modèle de Heine Aberenkov:

Finalement, Nous rencontre ici un modèle qui ajoute une flexibilité [13] pour cet ajustement en utilisant un potentiel A supposé constant dans la région du coeur, dans ce cas le potentiel est :

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (II - 40)$$

Ce potentiel peut être non local (dépendant du moment angulaire), ceci dépend du choix de la constante A. La dépendance en énergie peut être introduite par la forme

$$A = A(E).$$

II.5.2.2) Le modèle non local

Le but de l'approche non locale est de combler les insuffisances de l'approche précédente. Des expériences aux rayons X ont prouvé que la technique du pseudo potentiel local ne donne pas de bons résultats concernant la densité de charges de quelques composés [15]. Cette approche a fait son apparition en 1976 [16] pour apporter une correction de la dépendance énergétique du potentiel répulsif.

Chaque matériau possède sa propre correction qui dépend de la configuration des électrons par rapport au cœur ionique. Cette correction non locale est introduite pour évaluer l'influence du cœur ionique sur les électrons. Elle est déterminée pour chaque moment angulaire ($l = 0, 1, 2, \dots$) par la relation :[17]

$$V_{NL}(r) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (II - 41)$$

où:

$A_l(E)$ représente la constante de la dépendance du pseudopotentiel en énergie des états du coeur,

P_l est l'opérateur de projection de la $l^{\text{ème}}$ composante du moment angulaire,

$f_l(r)$ est une fonction qui représente l'effet de l'état du coeur et qui a plusieurs formes dont celle d'Ashcroft, de Heine-Abarenkov et la forme gaussienne.

II-5-2-2.1) Modèle d'Ashcroft

Dans ce modèle $f_l(r) = 0$ [18] (Figure II.1), le potentiel répulsif dû à l'orthogonalisation de la fonction d'onde des électrons de conduction sur les états du coeur, annule très exactement le potentiel coulombien à l'intérieur du coeur ionique.

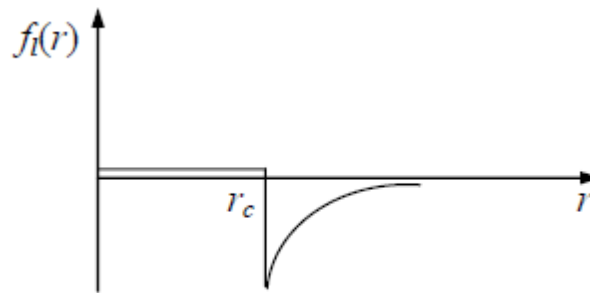


Figure (II.1): Modèle d'Ashcroft.

II-5-2-2.2) Modèle de Heine-Abarenkov

La forme carrée de Heine-Abarenkov [19], représentée sur la Figure II.2, est très utilisée à cause de sa simplicité.

$$f_l(r) \begin{cases} 1 & \text{pour } r < r_c \\ 0 & \text{pour } r \geq r_c \end{cases} \quad (II - 42)$$

r_c étant le rayon du coeur.

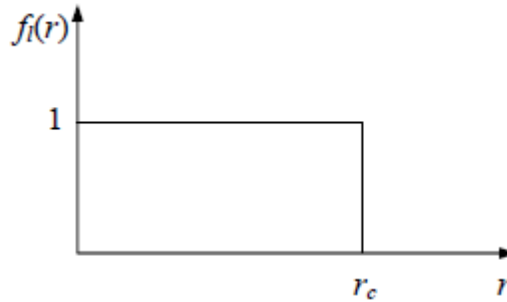


Figure (II.2): Modèle de Heine-Abarenkov.

II-5-2-2.3) Modèle de Gauss

La forme gaussienne est représentée sur la Figure (II.3) et est donnée par l'expression suivante : [17]

$$f_i(r) = \exp\left(\frac{-r^2}{r_c^2}\right) \quad (II - 43)$$

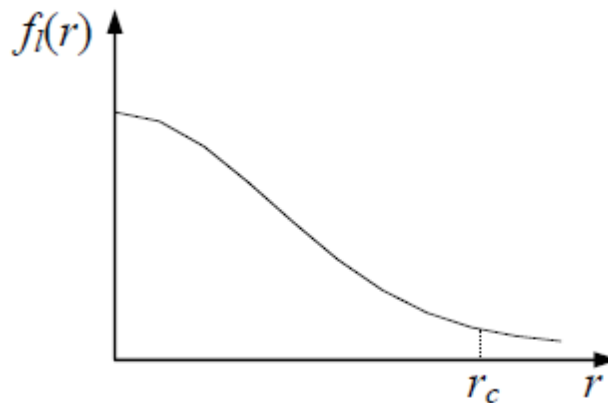


Figure (II.3): Modèle de Gauss.

Du fait de la nature non locale du pseudopotentiel, les facteurs de forme $V(G)$ sont non seulement fonction de G mais aussi du vecteur d'onde k .

Pour les formes carrée et gaussienne, les expressions analytiques des éléments de matrices ont été déjà déterminées. Les corrections non locales sont négligeables pour les Semi-conducteurs, néanmoins elles peuvent modifier la topologie de la relation de dispersion de quelques structures de bandes de même que la valeur des gaps.

II.6. La méthode empirique des pseudopotentiels (E.P.M):

Il s'agit d'une approche dérivée de la méthode des pseudopotentiels décrite précédemment, mais dans laquelle les pseudopotentiels sont supposés locaux .[20]

L'E.P.M est la méthode empirique la plus utilisée dans le calcul de la structure de bandes. La méthode empirique des pseudopotentiels est appliquée dans les semi-conducteurs [21] de structure diamant ou zinc blende [22]. Les ajustements théoriques aux observations sur les expériences de la réflexion et l'absorption des cristaux déterminent des paramètres entrants dans le calcul de la structure de bandes comme $V(G)$.

La méthode empirique des pseudopotentiels (EPM) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux $V(G)$ [23] du pseudopotentiel $V_P(r)$ qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques .[24]

$$V_p(r) = \sum_{R,\tau} V_a(r - R - \tau) \quad (II - 44)$$

R : est un vecteur du réseau direct. et τ : est le vecteur de translation du réseau direct.

Dans le réseau réciproque, le potentiel $V_P(r)$ prend la forme suivante : [25]

$$V_p(r) = \sum_G s(G) V_a(G) \exp(i \cdot g \cdot r) \quad (II - 45)$$

$V_a(G)$ est le facteur de forme.

Le facteur de forme joue un rôle important dans la théorie des pseudopotentiels. Il intervient dans le calcul des propriétés électroniques des matériaux .[26]

$S(G)$ est le facteur de structure. Ce facteur a la forme: [27]

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-i \cdot G \cdot r) \quad (II - 46)$$

Où N_a est le nombre des atomes de base.

La fonction d'onde $\Psi_{n,k}(r)$ et les valeurs d'énergie de bandes $E_n(k)$ sont les solutions de l'équation:

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_P(r) \right] \psi_{n;k}(r) = E_n(K) \psi_{n;k}(r) \quad (II - 47)$$

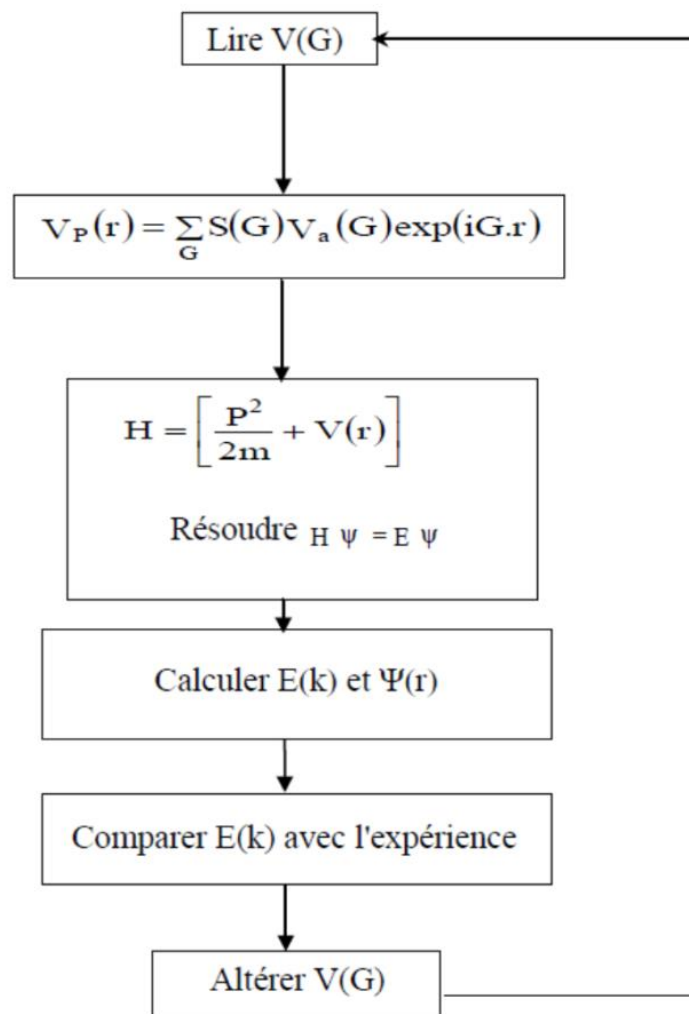
Où n indique l'indice de la bande.

$V_p(r)$: est le pseudopotentiel.

$\psi_{n,k}(r)$: Sont les fonctions de Bloch qui peuvent être développées en une série d'ondes planes.

II.7. La méthode du calcul:

La procédure du calcul de la méthode EPM est illustrée dans le diagramme suivant :[28]



Figure(II.4): Organigramme de la procédure du calcul par E.P.M .

II.8. Conclusion

La théorie quantique des solides, a pour objet l'étude de leurs propriétés physiques à partir de leurs constituants microscopiques. Il s'agit donc de décrire et de prédire les propriétés d'un solide à partir de sa structure microscopique, et des interactions entre particules qui le composent.

Dans ce chapitre nous avons présenté les approximations de base, en passant par la première approximation dite de Born-Oppenheimer qui consiste à séparer l'équation de Schrödinger en deux équations aux valeurs propre des électrons et des noyaux. Tenant compte du fait que les noyaux sont fixes vue leur masse élevée par rapport à celle des électrons.

Une deuxième approximation s'impose, c'est l'approximation du champ autocohérent, vu le grand nombre de particules à traiter (N électrons), cette approximation nous permet de simplifier le problème à un électron qui évolue dans un potentiel moyen résultant des autres électrons. Ensuite, on a exposé quelques méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger, telle que la méthode de l'électron libre, méthode des électrons presque libres et la résolution par la méthode des ondes planes augmentées et orthogonales.

Dans le chapitre suivant, on fera un gros zoom sur la méthode des pseudopotentiels empirique qui s'avère très efficace pour déterminer et étudier les propriétés électroniques des structures cristallines Zinc blende.

Références Bibliographiques

- [1] Z. Chafi, Thèse de doctorat, Université de Constantine, Algérie (2009).
- [2] A. R. Leach, Molecular Modeling - Principles and Applications, Addison Wesley Longman Limited (1996).
- [3] N. Koubaa, Thèse de doctorat, Université de Metz (1990).
- [4] S. Ouendadji, Thèse de doctorat, Université d'Annaba, Algérie (2010).
- [5] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tokyo University, 2 (1993) 7.
- [6] J. Boucher, J. Simonne, Principe et Fonction de l'électronique Intégrée, Ed Cepadues, (1977), 129.
- [7] S. Bounab, Thèse de magister, Univ. de Constantine, Algeria, (2002).
- [8] F. Mezrag. Thèse de magister, Univ. de M'sila, Algeria, (2003).
- [9] L. Bouchlaleg. Thèse de magister, Univ. de Batna, Algeria (2000)
- [10] M.L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences, Ed. Springer, New York, (1989).
- [11] H. Mathieu, «Physique des Semiconducteurs et des Composants électronique », 4 Ed. Masson (1998).
- [12] N. W. Ashcroft, Phys. Lett. 23, 48 (1966).
- [13] V. Heine and J.V. Abarenkov, Philos. Mag. 9, 451 (1964).
- [14] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Université de Biskra, Algérie (2012).
- [15] J.C. Phillips, and L. Kleinman, Phys. Rev. 116 (1956) 287.
- [16] J.R. Chelikowsky and M.L. Cohen, Phys. Rev. B 14 (1976) 552.
- [17] H. Aourag, Pseudopotential Method, Theory and Practice, Winter College on Computational Condensed Matter Physics, Sidi Bel Abbès Univ. Algeria, 1995.

- [18] W.A.Harrison, Pseudopotential Theory of Metals, Benjamin, New York, 1966.
- [19] I.V.Abarenkov, and V.Heine, Phil. Mag. 12 (1965) 529.
- [20] M. Bescond, Thèse de doctorat, Université de Provence (Aix-Marseille I), France (2004).
- [21] A. Zaoui, Thèse de doctorat, Université de Metz (1999).
- [22] N. Y. Aouina, Thèse de magister, Université de M'sila, Algérie (2003).
- [23] M. M. Diarra, Thèse de doctorat, Université des sciences et Technologies de Lille, France (2009).
- [24] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [25] P. Vogl, J. Phys. C11 (1978) 251.
- [26] N. Koubaa, Thèse de doctorat, Université de Metz (1990).
- [27] J. M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287.
- [28] S. Y. Davydov and S. K. Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947.

Chapitre III

Théorie des alliages

III.1 Introduction:

La structure électronique des solides cristallins est basée sur l'hypothèse de la périodicité du cristal par translation du réseau primitif. Que devient la structure de bande si le cristal n'est plus périodique? Soit qu'il contient des impuretés occupant au hasard les sites du réseau où qu'il soit un alliage dont on peut faire varier la concentration relative de ses constituants, il peut être binaire, ternaire, quaternaire suivant qu'il renferme deux, trois ou quatre éléments, la symétrie de translation n'est plus parfaite et le désordre est primordial .[1]

Les alliages semi-conducteurs ternaires III-V de la forme $A_xB_{1-x}C$, sont composés de molécules AC avec une fraction molaire (x) et des molécules BC avec une fraction (1-x) .[2] En raison de la variation de la largeur de bande, ces matériaux sont utilisés dans de nombreuses applications optoélectroniques .[3]

Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques (optiques, électroniques, structurales, etc..) des alliages ternaires, telle que l'approximation du cristal cohérent (CPA) [4,5] et l'approche du cristal virtuel (VCA) .[6]

Mais l'approche des pseudopotentiels empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) en tenant compte de l'effet du désordre, reste l'approche la plus simple et offre des résultats compatibles avec les données expérimentales .[7,8]

III.2. L'approximation du cristal virtuel (VCA):

III.2.1. Cas d'un alliage ternaire

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

et les paramètres du nouveau matériau ainsi obtenu dépendront de l'amplitude de ces distorsions.

Dans l'approximation du cristal virtuel (VCA) [9,10], Nous considère que ces distorsions sont suffisamment faibles. Pour préserver la structure de bande du cristal parfait, ce qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Ce modèle prévoit une variation linéaire des principaux paramètres dans l'alliage. [11]

$$V(x) = xV_{AC} + (1 - x)V_{BC} \quad (III - 1)$$

III.2.2. Propriétés physiques : Cas de l'alliage InP_xSb_{1-x}

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter cet alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques .[11] Ces propriétés physiques sont notées par $F(x)_{InP_xSb_{1-x}}$, peuvent être liées linéairement à la concentration stœchiométriques x par la relation suivante:

$$\overline{F(x)}_{InP_xSb_{1-x}} = x F_{InP} + (1 - x)F_{InSb} \quad (III - 2)$$

Avec :

$$F(x)_{InP_xSb_{1-x}} = \overline{F(x)}_{P_xSb_{1-x}In} + d x(1 - x) \quad (III - 3)$$

Où:

F : Propriété physique quelconque.

x: Fraction moléculaire (paramètre stœchiométrique).

d: Paramètre de courbure (bowing).

III.2.2.1. Constante du réseau de l'alliage ternaire:

Expérimentalement, la constante du réseau $a(x)$ de l'alliage ternaire est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires de l'alliage. Cette constante suit la loi de Vegard. [12]

$$a(x)_{InP_xSb_{1-x}} = \overline{a(x)}_{InP_xSb_{1-x}} = xa_{InP} + (1 - x)a_{InSb} \quad (III - 4)$$

Où:

a_{InSb} : Paramètre du réseau du composé binaire InSb.

a_{InP} : Paramètre du réseau du composé binaire InP.

Dans ce cas le paramètre de courbure est nul.

La Figure(III.1) présente les différents paramètres du réseau en fonction de la bande interdite et la longueur d'onde pour quelques composés binaires.

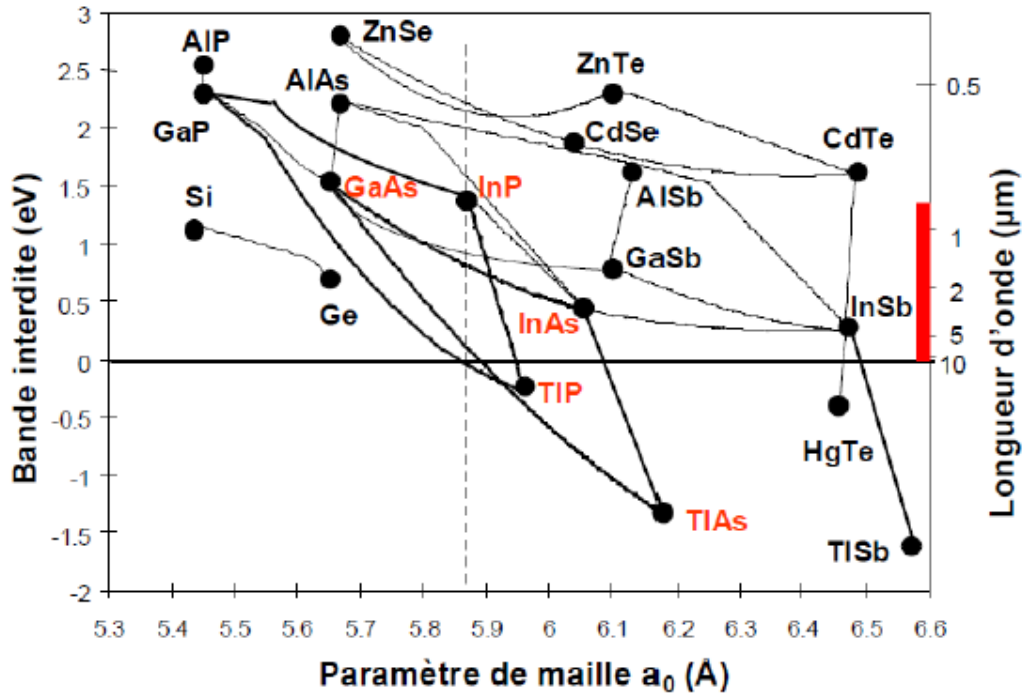


Figure (III.1): Paramètre de réseau de quelques composés binaires.

III.2.2.2. Gap énergétique de l'alliage ternaire:

Le gap énergétique $E_g(x)$ de l'alliage ternaire suit une dépendance quadratique, il est de la forme: [13,14]

$$E_g(x)_{P_xSb_{1-x}In} = xE_{InP} + (1 - x)E_{InSb} + dx(1 - x). \tag{III - 5}$$

Avec :

E_{InP} : Gap du composé InP.

E_{InSb} : Gap du composé InSb.

d : Paramètre de courbure optique.

Le paramètre de courbure optique (d) pour des gaps d'énergie basse est généralement positif [15,16] sauf quelques exceptions pour quelques alliages où on le trouve négatif [17].

Quelques paramètres physiques des alliages changent de l'interpolation linéaire vers l'interpolation quadratique, des équations III-2 et III-3, on a:

$$F(x)_{InP_xSb_{1-x}} = xF_{InP} + (1-x)F_{InSb} + dx(1-x) \quad (III - 6)$$

En développant l'équation (III-6) on a une équation quadratique de la forme:

$$F(x)_{InP_xSb_{1-x}} = A + Bx + Cx^2 \quad (III - 7)$$

Où : $A = F_{InSb}$, $B = F_{InP} - F_{InSb} + d$ et $C = -d$

Le paramètre de non linéarité (C) est appelé paramètre de courbure ou bowing. Sachant que la VCA néglige l'effet de désordre, ce paramètre est très différent de celui donné par l'expérience. Pour pallier le de désaccord, le bowing est calculé différemment comme suit .[18]

$$C_{exp} = C_i + C_e \quad (III - 8)$$

Tels que le C_i est le bowing intrinsèque dû à la VCA et C_e est le bowing extrinsèque dû au désordre.

L'inconvénient de la VCA est qu'elle donne un paramètre de courbure du gap fondamental très différent de celui trouvé par l'expérience. Ce désaccord est dû au fait d'avoir négliger l'effet du désordre compositionnel.

III.3. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA):

Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel dû au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudo potentiel du système s'écrit sous la forme : [7]

$$V(r) = V_{VCA}(r) + V_{dés}(r) \quad (III - 9)$$

$V_{VCA}(r)$: Potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}(r)$: Potentiel non périodique dû au désordre compositionnel..

En considérant tous les sites du cristal étudié, l'expression du potentiel de désordre $V_{dés}(r)$ s'écrit:

$$V_{dés}(r) = -P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (III - 10)$$

P est le paramètre d'ajustement produisant le bowing.

Enfin en additionnant ce potentiel du désordre avec le potentiel périodique effectif du cristal, on aura l'expression finale du pseudopotential comme suit :

$$V(r) = V_{VCA}(r) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (III - 11)$$

Le potentiel de l'alliage, calculé par la VCA auquel on ajoute le potentiel non-périodique du désordre, est donné par : [7]

$$V(r) = xV_{InP}(r) + (1-x)V_{InSb}(r) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{InSb}(r) - V_{InP}(r)] \quad (III - 12)$$

Ce même potentiel peut s'écrire sous forme de séries de Fourier:

$$V(r) = \sum_G V(G)e^{iGr} \quad (III - 13)$$

Avec V(G) est le facteur de forme de l'alliage ternaire donné par :

$$V(G) = xV_{InP}(G) + (1-x)V_{InSb}(G) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{InSb}(G) - V_{InP}(G)] \quad (III - 14)$$

$V_{InP}(G)$, $V_{InSb}(G)$ sont respectivement les facteurs de formes des potentiels des composés *InP* et *InSb*.

III.4. Conclusion:

Les alliages sont des matériaux ayant une vaste utilisation dans l'industrie des nouvelles technologies, couvrant une gamme allant des alliages métalliques, mis au point dans le but de contrôler les propriétés mécaniques et magnétiques des systèmes, aux cristaux semi-conducteurs mixtes, où les propriétés électroniques sont ajustées par la teneur en un composant de l'alliage.

Références Bibliographiques

- [1] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed Dunod, Paris,(1998).
- [2] N. Bouarissa, Matter. Chem. Phys. 72 (2001) 387.
- [3] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.
- [4] A. B. Chen, A. Sher, Phys. Rev. B 19 (1979) 3057.
- [5] V. B. Gera, R. Gupta, K.T. Jain, Phys. Rev. B 36 (1987) 9657.
- [6] M. Jaros, Rep. Prog. Phys. 48 (1985) 1091.
- [7] S. J. Lee, T. S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter 2 (1990) 3253.
- [8] N. Bouarissa, Superlatt. Microstruct. 26 (1999) 279
- [9] C. Nordheim, Phys. K 9 (1931) 607.
- [10] R. Parmenter, Phys. Rev. 97 (1955) 587.
- [11] J. E. Bernard and A. Zunger, Phys. Rev. B36 (1987) 3199.
- [12] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [13] S. Adachi, J, Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [14] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, Journal of applied physics. 89 (2001) 11.
- [15] D. Richardson, J. Phys.Solid Stat. Phys. 5 (1972) 27.
- [16] O. Madelung, «Phys of III-V compound », Ed Wiley, New-York (1964).
- [17] A. Baldereschi and K. Maschke, Solid Stat. Commun. 16 (1975) 99.
- [18] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, Phys. Rev. B 1 (1970) 3351.

Chapitre IV

Résultats et discussions

IV.1. Etude des propriétés électroniques :

La méthode de pseudo potentiel empirique locale, couplée à l'approximation du cristal virtuel qui introduit l'effet du désordre compositionnel, comme un potentiel effectif est utilisée pour étudier les propriétés électroniques, à savoir : le gap énergétique, la structure de bandes électronique, ainsi que leur variations en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Les paramètres du pseudopotentiel empirique d'un semi-conducteur sont définis comme une superposition des potentiels pseudo-atomiques qu'on écrit sous la forme:

$$V_P(r) = V_L(r) + V_{NL}(r) \quad (IV - 1)$$

$V_L(r)$ et $V_{NL}(r)$ sont respectivement les parties locale et non locale.

Dans notre cas nous n'avons considéré que la partie locale.

$$V_P(r) = V_L(r) = \sum_G V(G)S(G) \exp(iGr) \quad (IV - 2)$$

$S(G)$ est le facteur de structure et $V(G)$ sont les paramètres du pseudopotentiel ou facteurs de formes. Ces derniers ont été au départ tirés de la littérature, ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [1] dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie définit par :

$$\delta = \sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m-N} \quad (IV - 3)$$

$$\text{Où : } \Delta E_{ij} = E_{ij}^{exp} - E_{ij}^{cal} \quad (IV - 4)$$

$E_{i,j}^{exp}$ et $E_{i,j}^{cal}$ sont respectivement les énergies observées et calculées entre l'état i avec $k = k_i$ et l'état j avec $k = k_j$, du m^{ieme} paire (i, j) et N est le nombre de paramètres du pseudopotentiel empirique. Les valeurs des facteurs de formes sont modifiées par itération jusqu'à minimiser le δ .

Les facteurs de formes de pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires semi-conducteurs InP et le InSb dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau (IV-1)

Tableau (IV.1): Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs InSb et InP dans la phase zinc blende ainsi que les constantes du réseau a en (Å).

Composés	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau (Å)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
InP	-0.213862	0.00	0.070499	0.088818	0.06	0.03	11.0910
InSb	-0.201822	0.01	0.028443	0.064645	0.03	0.015	12.2645

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

Tableau (IV.2): Gaps énergétiques des composés zinc-blende InSb et InP.

Composants	Gaps d'énergie (ev)					
	E_{Γ}^T		E_{Γ}^X		E_{Γ}^L	
	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal
InP	1.35 ^a , 1.50 ^b	1.35 ^c	2.21 ^a , 2.44 ^b	2.21 ^c	2.05 ^a , 2.19 ^b	2.05 ^c
InSb	0.17 ^a , 0.25 ^b	0.19 ^c	1.63 ^a , 1.71 ^b	1.64 ^c	0.93 ^a , 1.03 ^b	0.94 ^c

^a Ref [2],[3], ^b Ref [4], ^c Nos calculs

Nous avons étudié les structures de bandes électroniques de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculées le long des points de haute symétrie de la première zone de Brillouin, pour quelque valeurs de x , avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nos résultats pour les composés binaires InSb, InP sont présentées par la figure (IV-1) et la figure (IV-2) respectivement.

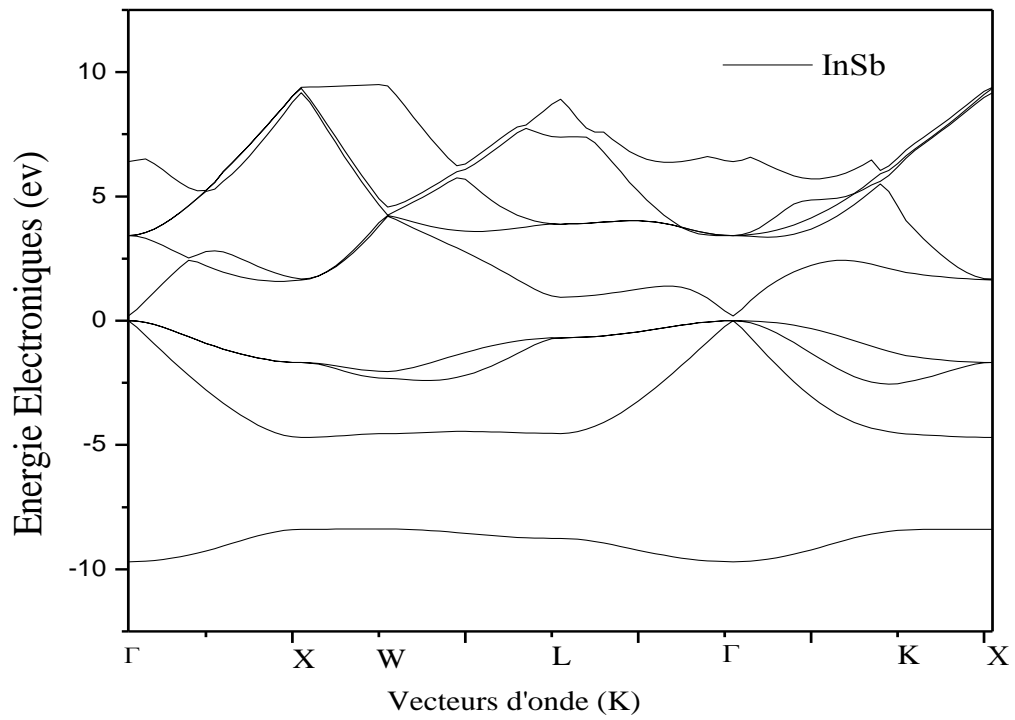


Figure (IV.1): Structures de bandes électroniques des composés InSb.

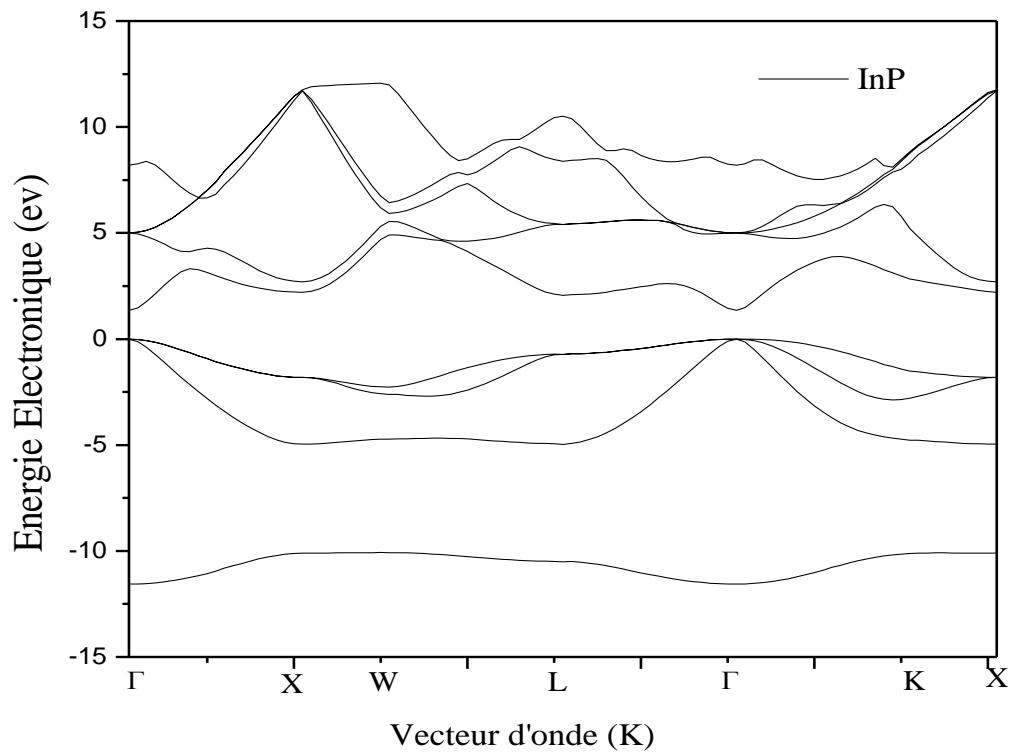


Figure (IV.2) : Structures de bandes électroniques des composés InP.

Ces deux figures nous indiquent que le maximum de la bande de valence est au point Γ et le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ , donc les composés binaire InSb et InP sont des semi-conducteurs à gaps d'énergie directs.

Les bandes de conduction sont plus dispersées que celles des bandes de valences, cela est dû au fait que les électrons des bandes de conduction sont plus libres. Nous remarquons que les bandes de conduction dans la structure de bandes du InP sont plus dispersées que celles de la structure de bandes du InSb, cela est dû au fait que les électrons de la bande de conduction du InP sont plus libres que les électrons de la bande de conduction du InSb.

Pour les alliages $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ le potentiel est calculé en utilisant l'approximation du cristal virtuel VCA auquel on ajoute le potentiel non périodique du désordre et en tenant compte du paramètre ajustable produisant le bowing donnée par l'expression suivante (III-12)

La figure (IV-3) présente la structure de bande de l'alliage $\text{InSb}_{0.5}\text{P}_{0.5}$, où le maximum de la bande de valence est au point Γ et le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ , donc l'alliage ternaire semiconducteur $\text{InP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$, est à gap direct, d'autre part on remarque que l'effet du désordre compositionnel pour les différentes valeurs de x est important et on ne peut pas le négliger.

Nous remarquons aussi que les bandes de conduction sont plus dispersées que celles de valence, donc les électrons de la bande de conduction sont plus libres.

Les gaps énergétiques pour les alliages ternaires semiconducteurs $\text{InP}_{0.3}\text{Sb}_{0.7}$, $\text{InP}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}$, $\text{InP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$, et leurs composés binaires avec et sans tenir compte l'effet du désordre sont présentés au tableau (IV-3)

Tableau (IV.3): Les gaps énergétiques aux points Γ , X et L de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec et sans l'effet du désordre compositionnel pour les différentes valeurs de X

Matériaux	Energie E_{Γ}^I (eV)		Energie E_{Γ}^X (eV)		Energie E_{Γ}^L (eV)	
	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp
InSb	0.185	0.17 ^a 0.25 ^b	1.64	1.63 ^a 1.71 ^b	0.94	0.93 ^a , 1.03 ^b
InP_{0.3}Sb_{0.7}	0.60* 0.13**		1.89* 1.42**		1.33* 0.78**	
InP_{0.5}Sb_{0.5}	0.85* 0.35**		2.01* 1.50**		1.56* 0.98**	
InP_{0.7}Sb_{0.3}	1.07* 0.63**		2.11* 1.64**		1.77* 1.25**	
InP	1.35	1.35 ^a 1.50 ^b	2.21* 2.21**	2.21 ^a 2.44 ^b	2.05* 2.05**	2.05 ^a 2.19 ^b

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre , ^a Réf.[2, 3] , ^b Réf. [4]

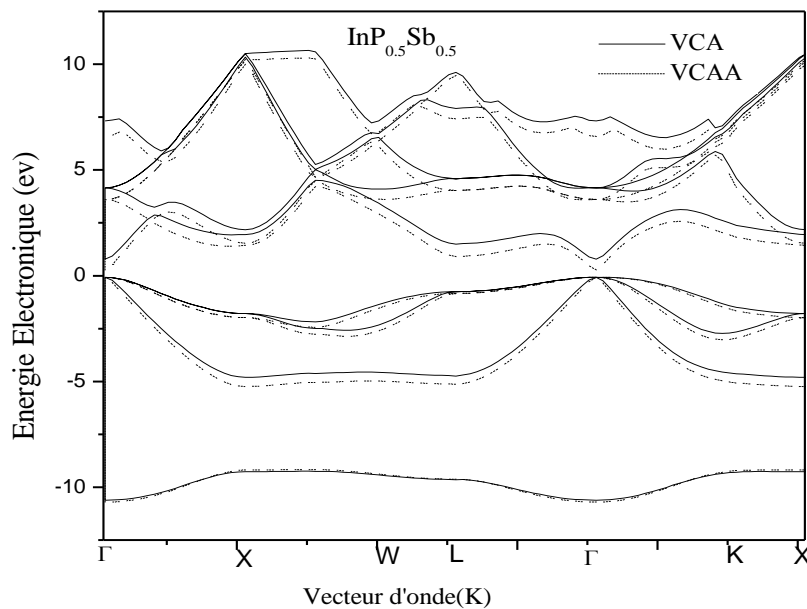


Figure (IV.3) : Structures de bandes électroniques de l'alliage ternaire $\text{InP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$.

Il est important de voir la dépendance en composition des gaps d'énergies de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$, nommés gap direct E_F^{Γ} et gaps indirects E_F^X, E_F^L

Les figures IV-(4, 5, 6) montrent la variation de ces gaps d'énergie en fonction de la concentration x , en allant de InSb ($x=0$) vers le InP ($x=1$) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

D'après les figures nous remarquons que la variation des gaps d'énergie le long de l'intervalle de la concentration x du Phosphore ont un caractère non linéaire, et on constate aussi que l'effet du désordre est très claire. Le gap d'énergie E_F^{Γ} diminue non linéairement en fonction de la fraction molaire x du Phosphore P.

Les courbes correspondantes à des interpolations quadratiques de la forme suivante:

$$E = A + B X + C X(X - 1) \quad (IV - 5)$$

Où, C : Le paramètre de la courbure (Bowling).

Leurs expressions analytiques sont exprimées par les relations quadratiques suivantes:

$$E_F^{\Gamma} = 0.18727 + 1.48091X - 0.31818X^2 \quad (VCA) \quad (IV - 6)$$

$$E_F^{\Gamma} = 0.10803 - 0.39454X + 1.59982X^2 \quad (VCAA) \quad (IV - 7)$$

$$E_F^X = 1.65168 + 0.89487X - 0.34033X^2 \quad (VCA) \quad (IV - 8)$$

$$E_F^X = 1.56368 - 0.9996X + 1.58966X^2 \quad (VCAA) \quad (IV - 9)$$

$$E_F^L = 0.93762 + 1.38131X - 0.2704X^2 \quad (VCA) \quad (IV - 10)$$

$$E_F^L = 0.86362 - 0.84506X + 1.97839X^2 \quad (VCAA) \quad (IV - 11)$$

D'après l'équation (IV-6), on note que pour la VCA ($p=0$) le bowing est égale à (-0.31818) eV qui est en désaccord avec l'expérience qui a un bowing optique de 1.6 (eV) [5], mais lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre c.à.d. la VCAA ($p \neq 0$), on obtient un très bon accord avec celui trouvé expérimentalement $C=1.59982$ (eV) ce qui donne un paramètre d'ajustement $p=0.611$.

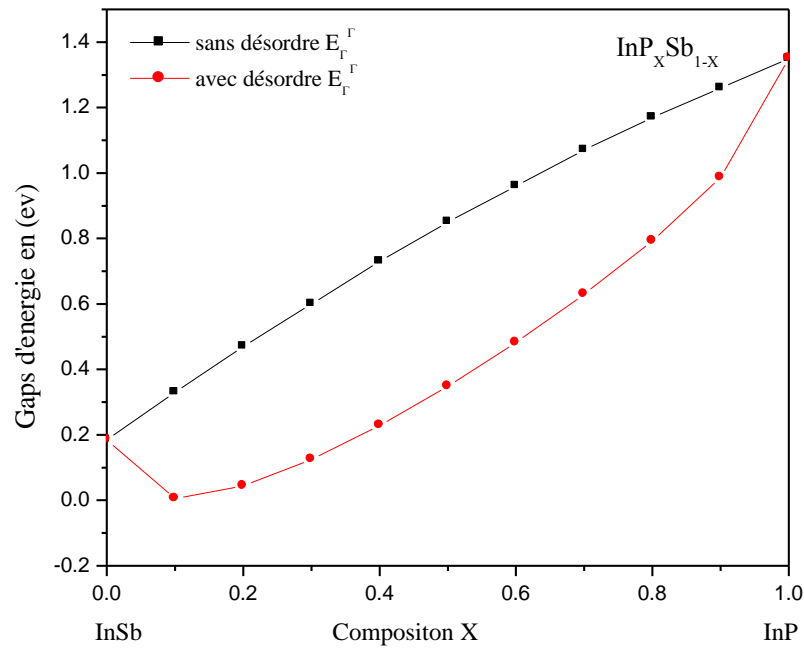


Figure (IV.4): La variation du gap E_{Γ}^{Γ} en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

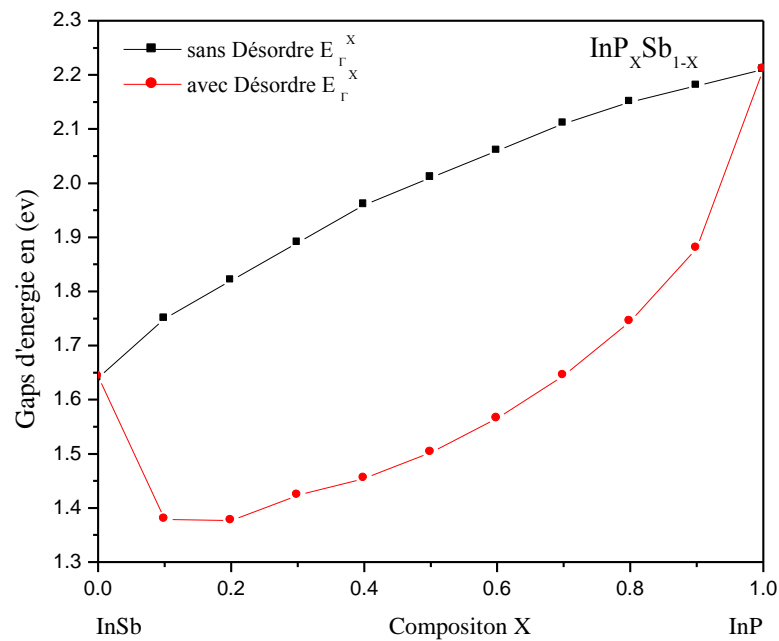


Figure (IV.5): La variation du gap E_{Γ}^X en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

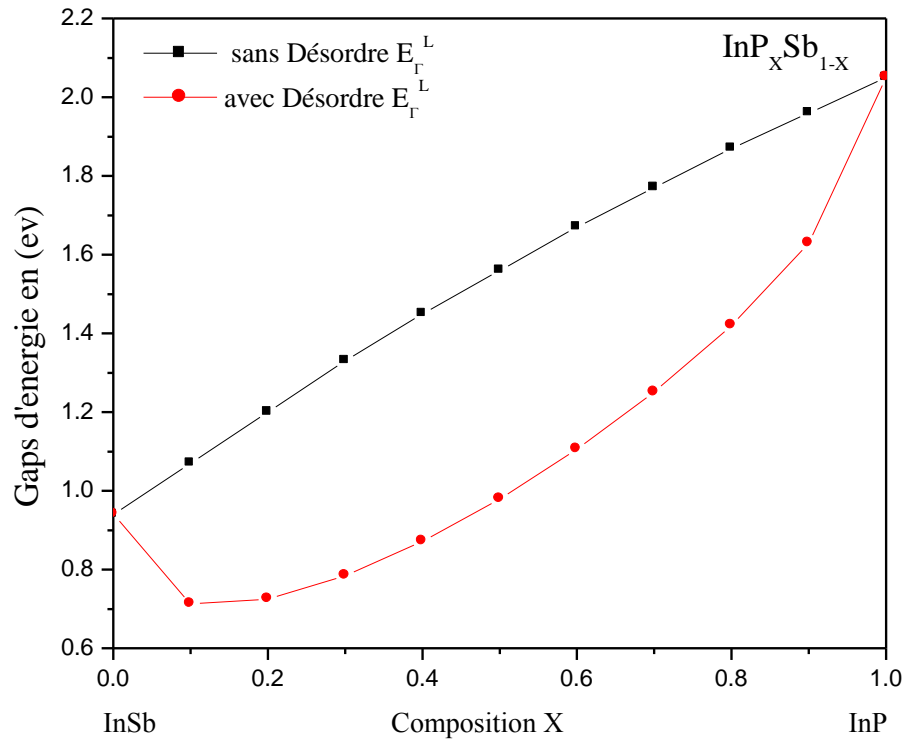


Figure (IV.6): La variation du gap E_{Γ}^L en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Les figures IV (7-8) représente les courbes de la variation des gaps énergétiques E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X et E_{Γ}^L en fonction de la composition x calculés par la VCA et VCAA respectivement. On constate qu'il n'y a pas des transitions entre les gaps énergétiques. Ce qui confirme nos résultats précédents, que notre alliage à un gap direct en allant de $x=0$ vers $x=1$ de la concentration du phosphore.

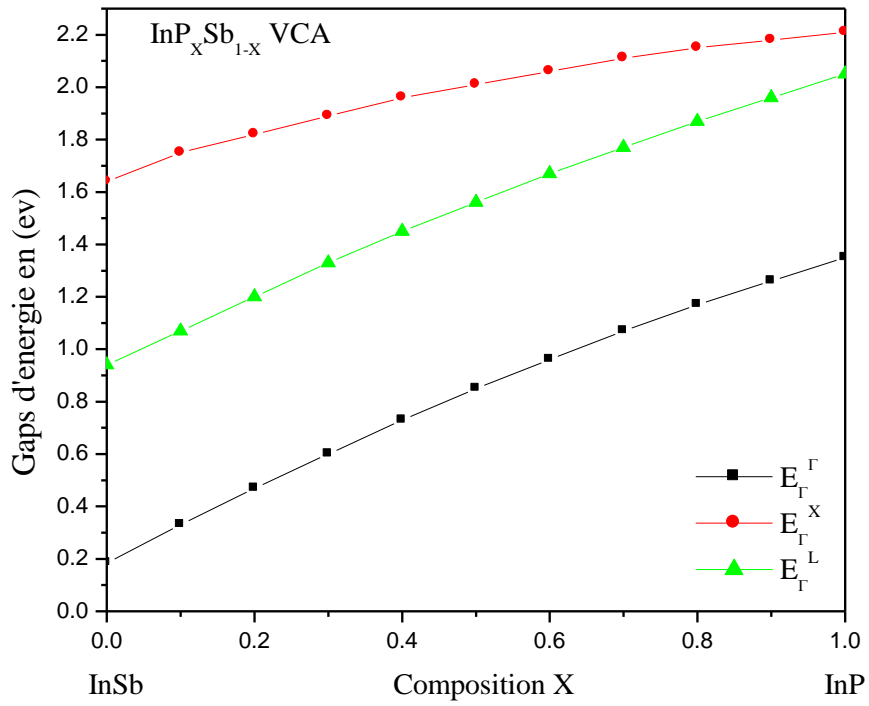


Figure (IV.7): Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans désordre compositionnel.

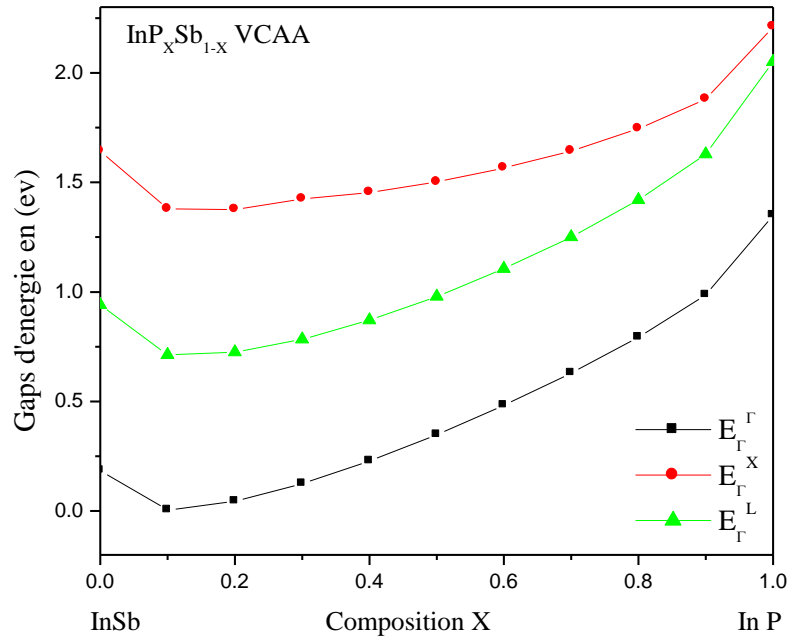


Figure (IV.8) : Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec désordre compositionnel.

IV.2. Propriétés optiques

IV.2.1 L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est un paramètre physique très important qui est lié aux interactions atomiques microscopiques. Il représente un aspect physique fondamental qui caractérise les propriétés optiques et électroniques des matériaux. La connaissance du n est essentielle pour les dispositifs tels que les guides d'onde, les cristaux photoniques, les piles solaires, et les détecteurs [6].

La connaissance du gap d'énergie nous a permis de calculer l'indice de réfraction et de voir sa dépendance en fonction de la concentration x suivant les relations (I-2, I-3, I-4, I-5, I-6, I-7) données au chapitre (I). Nos résultats pour quelques concentrations x comparés aux données de la littérature sont présentés dans le tableau IV-4 avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Tableau (IV.4) : L'indice de réfraction calculé par les différentes relations et le gap d'énergie fondamental de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Matériau	n						
	Exp	Moss (I-2)	Gupta et Ravindra (I-3)	Herve et Vandamme (I-4)	Reddy et Anjaneyulu (I-5)	Ravindra (I-6)	Reddy et Ahammd (I-7)
InSb	3.91 ^a 3.96 ^b	4.92	3.97	3.92	5.28	4.00	
InP_{0.3}Sb_{0.7}		3.66* 5.42**	3.71* 4.01**	3.54* 3.99**	4.10* 5.67**	3.65* 4.05**	5.06*
InP_{0.5}Sb_{0.5}		3.36* 4.19**	3.56* 3.87**	3.35* 3.76**	3.75* 4.64**	3.44* 3.86**	4.22*
InP_{0.7}Sb_{0.3}		3.17* 3.62**	3.42* 3.69**	3.20* 3.52**	3.52* 4.06**	3.25* 3.63**	3.84* 4.91**
InP	3.15 ^a 3.1 ^b	3.00	3.25	3.03	3.29	3.01	3.54

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre ,^a Ref[7] ,^bRef [8]

Les figures IV (9-10) montrent la dépendance de la concentration du phosphore avec l'indice de réfraction n pour tous les modèles avec et sans désordre. Nous notons la même tendance de n pour tous les modèles utilisés, l'augmentation de la concentration du phosphore mène à une diminution de l'indice de réfraction n lorsque on ne tient pas compte de l'effet du désordre.

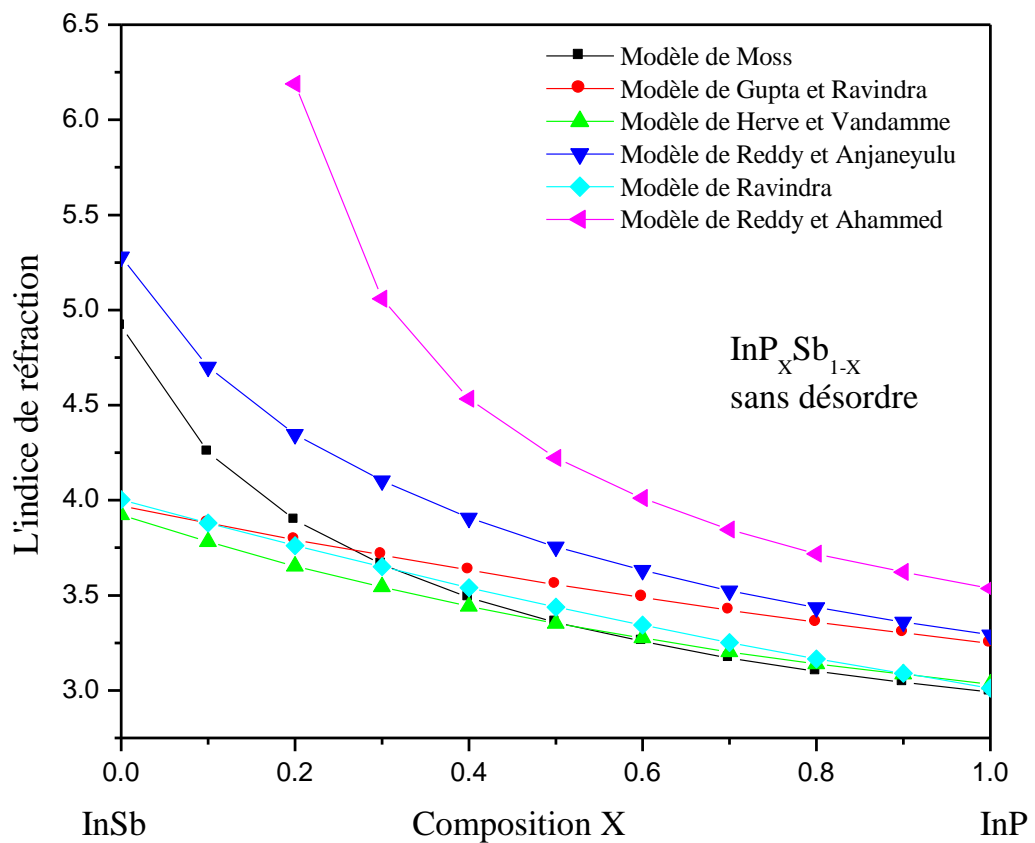


Figure (IV.9): La variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration x du Phosphore de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans désordre calculée pour différentes relations.

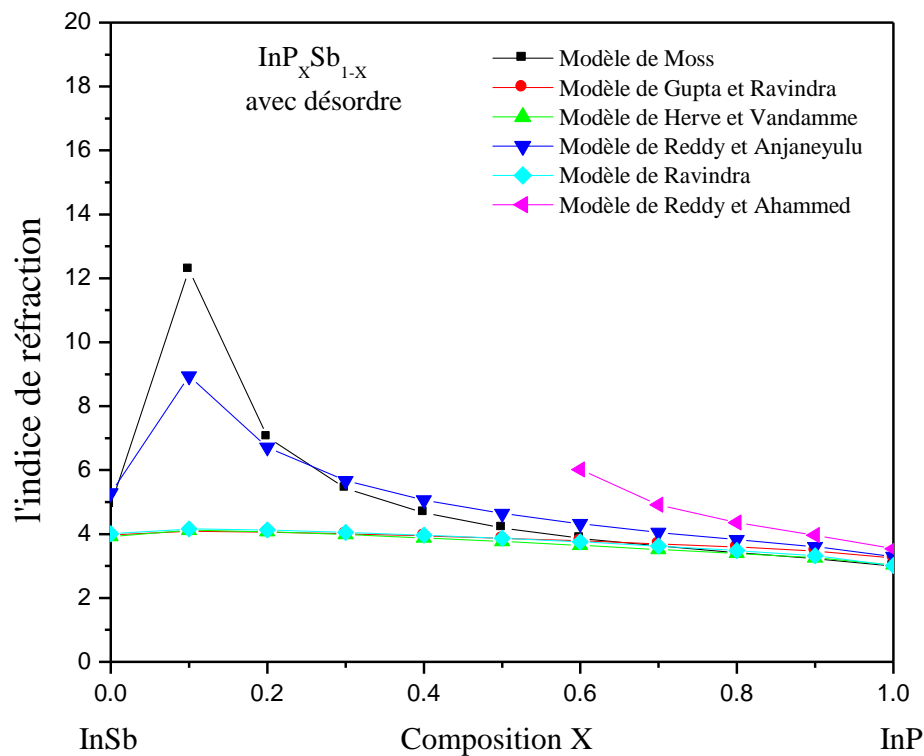


Figure (IV.10): La variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration x du Phosphore de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec désordre calculée pour différentes relations.

Nous remarquons aussi, que les indices de réfractons sans désordre calculés par le modèle Reddy et Ahammed pour les concentrations allant de 0 à 0.1 n'est pas valide suite aux faibles valeurs du gap fondamental pour ces concentrations. La même chose est remarquée pour le même modèle et cette fois ci avec désordre pour les concentrations allant de 0 à 0.5, pour les autres modèles nous remarquons le même comportement de l'indice de réfraction la variation est donc non linéaire et non monotone, il faut dire que le modelé de Herve et Vandamme est celui qui donne des valeurs proches aux données théoriques.

IV.2. 2. La constante diélectrique:

d'après la relation (I-12) présentée dans le chapitre I, la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} est calculé suite aux différents modèles de calcul de l'indice de réfraction donnés par les relations (I-2, I-3,I-4,I-5,I-6,I-7) du chapitre I, en fonction de la concentration x du phosphore de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Le tableau (IV-5) présente les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Tableau(IV.5) : La constante diélectrique à haute fréquence calculé par les différentes relations de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Matériau	ϵ_{∞}						
	Exp	Moss (I-2)	Gupta et Ravinda (I-3)	Herve et Vandame (I-4)	Reddy et Anjaneyulu (I-5)	Ravindra (I-6)	Reddy et Ahammd (I-7)
InSb	15.3 ^a 15.7 ^b	24.16	15.76	15.39	27.87	16.02	
InP_{0.3}Sb_{0.7}		13.42* 29.39**	13.78* 16.05**	12.56* 15.89**	16.83* 32.16**	13.32* 16.43**	25.60*
InP_{0.5}Sb_{0.5}		11.27* 17.59**	12.65* 14.96**	11.24* 14.16**	14.10* 21.58**	11.82* 14.93**	17.82*
InP_{0.7}Sb_{0.3}		10.05* 13.10**	11.70* 13.65**	10.26* 12.39**	12.42* 16.44**	10.57* 13.14**	14.78* 24.15**
InP	9.9 ^a 9.61 ^b	8.94	10.54	9.20	10.84	9.08	12.50

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre, ^a Ref [7], ^b Ref [8]

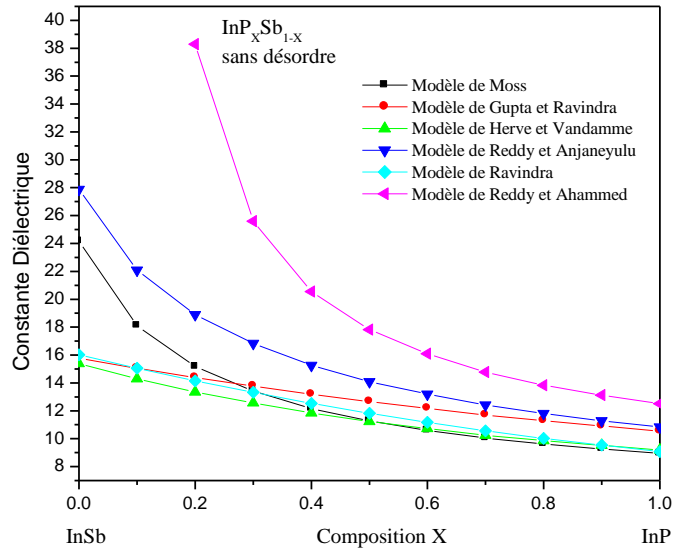


Figure (IV.11) : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la concentration x du Phosphore de l’alliage ternaire InP_xSb_{1-x} sans désordre calculée pour différentes relations.

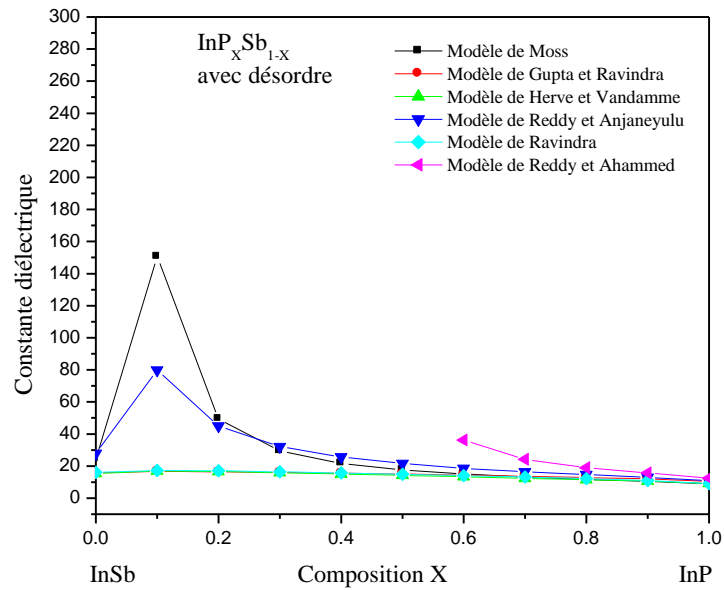


Figure (IV.12) : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la concentration x du Phosphore de l’alliage ternaire InP_xSb_{1-x} avec désordre calculée pour différentes relations.

La constante diélectrique à haute fréquence en fonction de la concentration x du phosphore suit le même comportement que l’indice de réfraction avec et sans désordre .

IV.2.3 transition radiative (interaction électron-photon):

Notant que le rayonnement est communément caractérisé par sa longueur d'onde dans le vide mesurée en μm , le semiconducteur est quand à lui communément caractérisé par son gap d'énergie mesuré en électronvolt.

En utilisant la relation (I-11) du chapitre I donnant le gap énergétique en fonction de la longueur d'onde pour la concentration x du phosphore de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$, on a pu calculer λ par la relation (IV – 5) dans le but de voir le spectre d'émission de notre alliage.

$$\lambda(\mu\text{m}) = \frac{1.24}{E(\text{eV})} \quad (\text{IV} - 5)$$

Le tableau (IV-6): présente les valeurs de la longueur d'onde avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Tableau(IV.6) : la longueur d'onde calculée pour quelques valeurs de la concentration x du Phosphore de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Matériau	$\lambda(\mu\text{m})$	
InSb	6.70*	6.70**
$\text{InSb}_{0.7}\text{P}_{0.3}$	2.07*	9.92**
$\text{InSb}_{0.5}\text{P}_{0.5}$	1.46*	3.55**
$\text{InSb}_{0.3}\text{P}_{0.7}$	1.16*	1.97**
InP	0.92*	0.92**

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

Le résultat est donné dans les figures (IV-13) et (IV-14) sans et avec désordre respectivement.

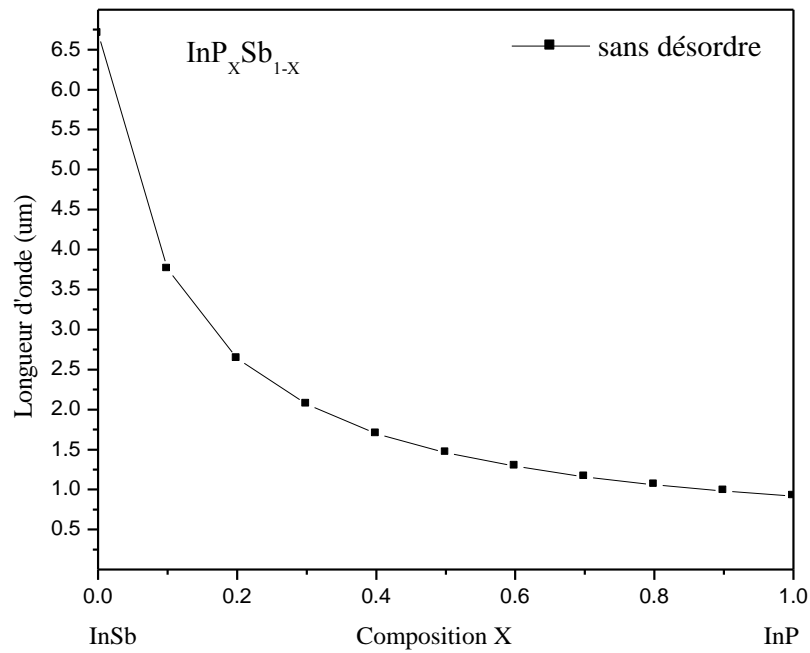


Figure (IV.13): la longueur d'onde de la concentration X de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans l'effet désordre.

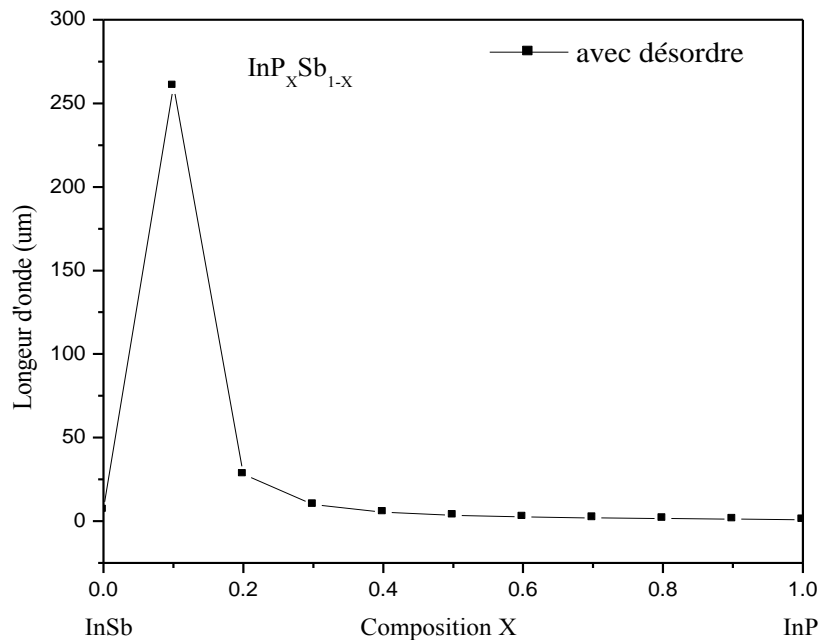


Figure (IV.14): la longueur d'onde de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec désordre.

L'examen des figures IV (13-14) et en comparant avec le spectre électromagnétique de la figure (I-4) du chapitre I nous remarquons que le gap d'énergie de notre d'alliage semi-conducteur appartient au spectre infrarouge. La figure IV-15) confirme le résultat trouvé pour les deux composés binaires InP et InSb entrant dans la composition de l'alliage d'intérêt.

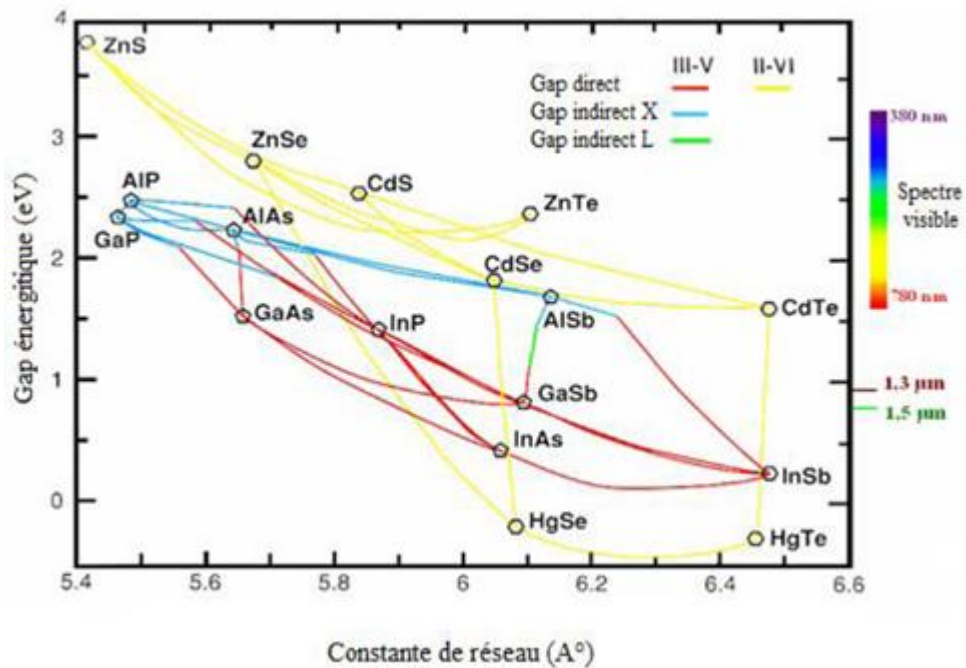


Figure (IV.15) : Semiconducteurs à gap direct et à gap indirect et leur spectre d'émission.[9]

Références Bibliographiques

- [1] T.Kobayasi,H.Nara,Bull.Coll.Med.Sci.,Tohoku.Univ.2(1993)7.
- [2] S.Adachi ,J.Appl.Phys. 61 (1987) 4869.
- [3]S.Adachi,PropertiesofSemiconductorAlloys:Group-IV,III–VandII–VI Semiconductors, JohnWileyandSonsLtd.Publication,2009.
- [4] J.Chelikowsky,M.L.Cohen,Phys.Rev.B14(1976)556.
- [5] N.Bouarissa,N.Amrane,H.Aourag,InfraredPhys.Technol.36(1995)755.
- [6] N. M. Ravindra, P. Ganapathy ,J. Choi, Energy gap-refractive index relations in semiconductors –an overview.Infrared Phys Thecnol (2007) :50 :21-9.
- [7] S. Adachi, Properties of Group IV III–V and II–VI Semiconductors, Wiley· Chichester, 2005.
- [8] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.
- [9] <http://ebookbrowse.com/ele101-cnam-7-2008> dispositifs optoélectroniques.

Conclusion Générale

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

L'effet du désordre influe sur les structures des bandes de l'alliage semiconducteur, nous constatons que cet effet est très clair. En conséquence, les gaps d'énergie E_F^c, E_F^x et E_F^l ont un caractère non linéaire le long de la variation de la concentration x du phosphore et qu'aucune transition de gaps n'est remarquée. Ce qui permet de conclure que l'alliage est un semi-conducteur à gap direct sur tout l'intervalle de la concentration x du Phosphore. .

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

Quel que soit le modèle utilisé, le comportement de la constante diélectrique ϵ_∞ en fonction de la composition x du phosphore pour l'alliage semi-conducteur d'intérêt est le même que celui de l'indice de réfraction. La tendance de ϵ_∞ indique que cette constante diélectrique diminue pour des grandes concentrations du phosphore.

La longueur d'onde de notre d'alliage semi-conducteur appartient au spectre infrarouge. Les résultats obtenus pour nos composés sont en bon accord avec ceux déterminés théoriquement et expérimentalement .

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

Liste des Figures et des Tableaux

Figures :

Figure (I.1): Silicium dopé au Phosphore.

Figure(I.2): Silicium dopé au Bore.

Figure (I.3): Semi-conducteur à gap direct et indirect.

Figure (I.4): Le spectre électromagnétique.

Figure (II.1): Modèle d'Ashcroft.

Figure (II.2): Modèle de Heine-Abarenkov.

Figure (II.3): Modèle de Gauss.

Figure (II.4): Organigramme de la procédure du calcul par E.P.M.

Figure (III.1): Paramètre de réseau de quelques composés binaires.

Figure (IV.1): Structures de bandes électroniques des composés InSb.

Figure (IV.2) : Structures de bandes électroniques des composés InP.

Figure (IV.3) : Structures de bandes électroniques de l'alliage ternaire $\text{InP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$.

Figure (IV.4): La variation du gap E_F^F en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Figure (IV.5): La variation du gap E_F^X en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Figure (IV.6): La variation du gap E_F^L en fonction de la concentration X de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Figure (IV.7): Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans désordre compositionnel.

Figure (IV.8) : Gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec désordre compositionnel.

Figure (IV.9): Comparaison de la variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration x du Phosphore, calculé avec des différentes relations de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans l'effet désordre.

Figure (IV.10): Comparaison de la variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration x du Phosphore, calculé avec des différentes relations de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec l'effet désordre.

Figure (IV.11) : Comparaison de la variation de la constante diélectrique en fonction de la concentration x du Phosphore, calculé avec des différentes relations de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans l'effet désordre.

Figure (IV.12) : Comparaison de la variation de la constante diélectrique en fonction de la concentration x du Phosphore, calculé avec des différentes relations de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec l'effet désordre.

Figure (IV.13): la longueur d'onde de la concentration X de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans l'effet désordre.

Figure (IV.14): la longueur d'onde de la concentration X de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec l'effet désordre.

Figure (IV.15): Semiconducteurs à gap direct et à gap indirect et leur spectre d'émission.

Tableaux :

Tableau (IV.1): Les facteurs de formes symétriques (VS) et antisymétriques (VA) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs InSb et InP dans la phase zinc blende ainsi que les constantes du réseau a en (Å).

Tableau (IV.2): Gaps énergétiques des composés zinc-blende InSb et InP.

Tableau (IV.3): Les gaps énergétiques aux points Γ , X et L de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec et sans l'effet du désordre compositionnel pour les différentes valeurs de X.

Tableau (IV.4) : L'indice de réfraction calculé par les différentes relations et le gap d'énergie fondamental de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Tableau(IV.5) : La constante diélectrique à haute fréquence calculé par les différentes relations de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Tableau(IV.6) : la longueur d'onde calculé pour la concentration x du Phosphore de l'alliage ternaire $\text{InP}_x\text{Sb}_{1-x}$.

تلخيص :

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص الالكترونية، الضوئية ، طول الموجة و خواص العزل الكهربائي للمركبات الثنائية InP و InSb و سبائكهما الثلاثية InP_xSb_{1-x} مع و بدون أخذ اعتبار لتأثير العشوائي في التركيب. في هذه الدراسة تم استعمال الطريقة التجريبية لشبه الكمون (EPM) مقرونة بتقريب البلورة الافتراضية (VCA). هذه السبائك لها اهمية كبيرة في تصميم الأجهزة الالكترونية الضوئية مثل : الخلايا الشمسية و المركبات المضاءة و الديودات الليزرية.

كل المقادير المحسوبة تمت دراسة تغيرها بدلالة التركيز x للفسفور علي طول المجال [0-1]. في هذه الطريقة المستعملة ، الحسابات تكون بسيطة ، سريعة و اكثر دقة . التوافق بين النتائج المتحصل عليها و المعطيات المتوفرة النظرية منها و التجريبية هو عموما مقبول.

في بنية عصابات الطاقة للمركب النصف ناقل InP_xSb_{1-x} يحدث انتقال علي الشكل المباشر. يجب لفت النظر إلى أن تأثير العشوائي في التركيب للدراسة تغير E_F^L و E_F^X , E_F^L , قرينة الانكسار ، طول الموجة و ثوابت العزل الكهربائي للسبيكة InP_xSb_{1-x} يجب اخذه بعين الاعتبار ولا يمكن اهماله

Résumé:

Dans ce travail, nous avons étudié quelques propriétés optoélectroniques, diélectriques et la longueur d'onde avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel des composés binaires semi-conducteurs InSb, InP et leurs alliages ternaires InP_xSb_{1-x} . Ces alliages ont un intérêt important pour la conception des dispositifs optoélectroniques tels que, les cellules solaires, les dispositifs luminescents et les diodes laser.

La méthode utilisée est celle du pseudopotentiel empirique local (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui inclut l'effet du désordre compositionnel par l'introduction d'un potentiel effectif du désordre. Cette méthode est simple et donne des résultats rapides et en général fiables. L'accord entre nos résultats et les données connues dans les littératures, sur les paramètres étudiés, s'avère raisonnablement bon. Tous les paramètres étudiés varient monotoniquement en fonction de la composition x du phosphore.

Une attention particulière a été accentuée sur l'effet du désordre compositionnel sur les gaps d'énergies E_F^L , E_F^X et E_F^L , l'indice de réfraction, la longueur d'onde et les constantes diélectriques de l'alliage InP_xSb_{1-x} . Ce dernier s'avère très important et nous ne pouvons pas le négliger.