

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Mohamed Boudiaf de M'sila
Faculté des Sciences et Sciences de L'Ingénieur
Département de Physique

Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

Option : Physique et Chimie des Matériaux

Par

M^{me} Mezrag Fadila

Thème

.....

**Effet du désordre compositionnel sur
les propriétés optoélectroniques et diélectriques
de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$**

.....

soutenu le:30 / 06 / 2003

Devant le jury:

<i>M^r A. Chikouche</i>	Directeur de recherche	Université de M'sila	Président
<i>M^r N. Bouarissa</i>	Professeur	Université de M'sila	Rapporteur
<i>M^r A. Barhdadi</i>	Professeur	E.N.S Rabat Maroc	Examineur
<i>M^{me} F. Hobar</i>	Professeur	Université de Constantine	Examinatrice
<i>M^r Y. Ben Arrioua</i>	Maître de conférence	Université de M'sila	Examineur

Effet du désordre compositionnel sur les propriétés optoélectroniques et diélectrique de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$

Résumé :

En utilisant la méthode des pseudopotentiels empirique (E.P.M) avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel, les propriétés optoélectroniques de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ ont été étudié. Nos résultats présentent généralement un bon accord avec les données de l'expérience. Notre matériau est trouvé qu'il présente des transitions de gap directe et indirecte fonction de la variation de la concentration molaire. Cette méthode est combiné au model de Harrison est employée pour le calcul des constantes diélectriques et leur dépendance en composition.

The effect of compositional disorder on the optoelectronic and dielectric properties of GaAs_xSb_{1-x} ternary alloy semiconductor

Abstract

Based on the pseudopotential scheme under the virtual crystal approximation in which the effect of compositional disorder is involved, the dependence of optoelectronic properties of GaAs_xSb_{1-x} on alloy composition x have been studied. Our results showed generally good agreement with the available experimental data. The material of interest is found to exhibit features of both direct and indirect band-gap semiconductor depending on the alloy composition x . The method used has been combined with the Harrison bond-orbital model and employed to calculate the dielectric constants and their composition dependence.

Remerciements

Dieu tout puissant, Merci de m'avoir donné cette volonté et ce courage pour faire naître ce travail, j'adresse mes remerciements les plus sincères au professeur Nadir Bouarissa pour les conseils qu'il m'a prodigué et le temps précieux qu'il m'a consacré, aussi d'avoir été au dessus de tout Eloge, mes remerciements vont également à mon enseignant Dr A. Chikouche d'avoir bien voulu présider mon jury. J'exprime toute ma reconnaissance aux membres de jury, Professeur A. Barhdadi, Professeur Mme F. Hobar et Mr Y. Ben Arioua qui m'ont fait l'honneur d'accepter de juger ce travail. Je tiens à remercier en particulier Dr B. Bouderah Vice recteur de la recherche scientifique pour son aide et sa coopération. Ma gratitude va vers ma chère mère qui a sacrifié de plus cher pour m'éclaircir le chemin de la vie, à mon mari Beddar Mohamed pour sa gentillesse et ses sacrifices, grand merci à mon amie Aouina Nabila Yasmina, pour son soutien moral en permanence et son encouragement sans cesse.

Sommaire

Introduction générale.....	1
Chapitre I. Méthodes de calcul de la structure de bandes électronique des semiconducteurs.....	4
I-1 Introduction.....	4
I-2 Hamiltonien total du cristal.....	4
I-3 L'approximation adiabatique.....	5
I-4 L'approximation à un électron de Hartee-Fock.....	6
I-4-1 Théorie des électrons presque libres.....	7
I-4-2 Théorie des liaisons fortes.....	10
I-5 Méthodes de calcul des structures de bandes électronique.....	12
I-5-1 La méthode cellulaire.....	12
I-5-2 La méthode des ondes planes.....	13
I-5-3 La méthode des ondes planes Augmentées (A.P.W).....	14
I-5-4. La méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W).....	15
I-5-5. La méthode du pseudopotentiel.....	16
Chapitre II La méthode du pseudopotentiel.....	17
II-1 Introduction.....	17
II-2 Le formalisme mathématique	17
II-3. caractéristiques du pseudopotentiel.....	19
II-4. Les modèles du pseudopotentiel	20
II-4-1 Le modèle local.....	20

II-4-2	Modèle non local.....	21
II-5	La méthode empirique du pseudopotentiel.....	22
	Chapitre III. Théorie des alliages.....	25
III-1	Introduction.....	25
III-2	La dépendance en composition des propriétés physiques des alliages semiconducteurs AB_xC_{1-x}	25
III-2-1	L'approximation du cristal virtuel (VCA).....	27
III-2-2	Le potentiel du désordre effectif	28
III-2-3	L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)	31
	 Chapitre IV. Etude des propriétés optiques et diélectriques des alliages ternaires semiconducteurs	 33
IV-1	Introduction	33
IV-2	Interaction rayonnement matière.....	34
IV-2-1	photons et électrons	34
IV-2-2	La réflexion des ondes planes.....	34
IV-3	Interaction électron-photon (Transition radiative).....	37
IV-4	Transitions direct et indirect.....	39
IV-5	Propriétés diélectriques.....	42
IV-5-1	Relation de dispersion.....	42
IV-6	Calcul de l'indice de réfraction	44
III-7	calcul de la constante diélectrique statique $\epsilon_0(\omega)$	47
	 Chapitre .V Résultats et discussions.....	 49
V-1	Etude des propriétés électroniques	49
IV-1-1	Structure de bandes d'énergie.....	52

V-2. Etude des propriétés optiques et diélectriques.....75

Conclusion.....90

Références.

Annexes

Introduction générale

Les alliages ternaires des composés semiconducteurs 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].

Plusieurs dispositifs ont été développés, la cellule solaire à base de GaAs et de GaAlAs, la diode électroluminescente à base de GaAsP, les détecteurs infrarouges et d'autres applications lasers [2].

En utilisant le GaAs et le GaSb, composés binaires semiconducteurs à gaps directs, se cristallisant dans la structure zinc-blende, l'arsenic d'antimoine de galium peut être obtenu, ce dernier est souvent rencontré avec la concentration $x = 0.5$ sur un substrat à base de InP [3] et avec la concentration $x = 0.91$ investi sur un substrat à base de InAs [3].

Le gap énergétique, les constantes optiques et diélectriques sont des paramètres fondamentaux et jouent un rôle important en physique [5]. Une connaissance précise de la structure de bandes du matériau étudié est nécessaire pour l'évaluation de son domaine d'application. Les transitions directes et indirectes en fonction de la composition sont particulièrement d'une importance principale pour l'étude et la fabrication des guides d'ondes [3,4].

Les progrès réalisés dans les méthodes de calculs de la structure de bandes électronique, surtout avec l'avènement de l'outil informatique, ainsi que le développement des appareils de mesure ont permis la compréhension des différentes propriétés physiques des alliages semiconducteurs

Quoique plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel reste la méthode la plus simple et rapide, ainsi elle donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience. Cependant l'approximation du cristal virtuel VCA est connue pour rendre les paramètres du bowing (courbure) du gap fondamental aussi faible que les résultats trouvés expérimentalement [6]. Pour 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 fondamentaux, le gap antisymétrique, les masses effectives des électrons et des trous lourds la densité de charge électronique de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ en 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.

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique, l'étude des propriétés optiques des semiconducteurs (absorption, transmission, réflexion...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension des structures : électronique et atomique de ces matériaux [7].

La connaissance du gap énergétique nous a permis de calculer quelques paramètres optiques tels que l'indice de réfraction, le coefficient de réflexion et de voir leur dépendance en concentration en utilisant trois modèles.

La relation Moss basé sur le modèle atomique [8], le modèle linéaire de Ravindra et al. [9] et enfin la relation empirique de Hervé et Vandamme [10].

Une attention est donnée sur le comportement de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie photonique et de voir l'effet du désordre sur ce comportement en utilisant l'expression analytique basée sur le modèle de transition interbande d'Adachi [11].

Enfin en combinant cette méthode au modèle des orbites de liaison de Harrison (Bond Orbital Model), nous avons calculé la constante diélectrique statique pour chaque valeur de la fraction molaire x (x est compris entre 0 et 1) pour l'alliage ternaire semiconducteurs III-V $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ et on a vu sa variation en fonction de la fraction molaire x avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

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

Après une introduction générale, le premier chapitre est consacré à un rappel de principe de certaines méthodes théoriques utilisées dans le calcul de la structure de bandes électronique.

Le deuxième chapitre se concentre sur l'une des méthodes théoriques principales de notre travail appelée méthode empirique du pseudopotentiel (E.P.M).

Le troisième chapitre a 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.

Le quatrième chapitre englobe un rappel des principales propriétés optiques et diélectriques des matériaux semiconducteurs.

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

Finalement, notre travail est achevé par une conclusion générale.

Chapitre I

Méthodes de calcul de la structure de bandes électronique des semiconducteurs

I.1. Introduction :

Le principal problème qu'on retrouve dans le calcul de la structure de bandes d'un cristal est l'absence d'une expression analytique du potentiel cristallin, ce qui rend difficile la recherche d'une solution générale à l'équation de Schrödinger qui décrit l'état stationnaire de toutes les particules en interaction, constituant un cristal: les électrons et les noyaux atomiques, la résolution d'une telle équation dans sa forme générale ne peut être menée à terme sans l'introduction d'un certain nombre d'approximations [12].

I.2. L'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 :

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

Où

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

Les énergies propres et les fonctions d'ondes propres sont données par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi(R, r) = E\psi(R, r) \quad (I-2)$$

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 [13].

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

I.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 ou 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 qui sont un produit d'une fonction d'onde électronique et une fonction d'onde nucléaire

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

L'équation de Schrödinger s'écrit

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

et se ramène aux deux équations interdépendantes

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

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

Pour les états d'énergie électroniques du cristal, on n'utilise que l'équation (I-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 [12].

I.3. 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 peut être écrit comme une somme des Hamiltoniens décrivant un seul électron.

$$H = \sum_i H_i \quad (\text{I-7})$$

Avec

$$H_i = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad (\text{I-8})$$

Où $V(r)$ possède la périodicité du réseau.

L'équation générale du solide s'écrit alors

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

$\psi(r)$: représente la fonction d'onde propre du système.

$E(k)$: Energie propre du système.

Un des problèmes majeurs dans le calcul de la structure de bandes électronique, est la détermination du potentiel du cristal $V(r)$. Pour résoudre le problème de mouvement de l'électron dans un champ périodique, on peut faire appel à la théorie des électrons presque libres (N.F.E.M) et celle des électrons fortement liés [12].

1.4.1. 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.

$$H = T + V(r) \quad (\text{I-10})$$

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.

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

l'équation de Schrödinger pour une particule libre est :

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

En approximation d'ordre zéro, les électrons ont une énergie :

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

et une fonction d'onde :

$$\psi^0(r) = V^{-\frac{1}{2}} \exp(ikr) \quad (\text{I-14})$$

Avec

V est le volume total du cristal, les fonctions d'ondes $\psi^0(r)$ sont orthonormées.

Pour trouver les $E(k)$ et $\psi(r)$ de la première approximation, le calcul nécessite la connaissance des éléments de la matrice de la perturbation $V(r)$, celle-ci est périodique, on peut alors la mettre en termes de série de Fourier.

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

En première approximation, la correction est donnée par les éléments de matrice de la perturbation :

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

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

Ainsi :

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

En seconde approximation, la théorie des perturbations donne :

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

Ainsi l'énergie total du système s'écrit :

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

Le troisième terme est très négligeable par rapport aux deux autres termes.

Donc :

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

Physiquement, ce terme signifie que les états en $k = \pm \frac{n\pi}{a}$ sont des états dégénérés [14].

I.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, on 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 [12].

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

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

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 :

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

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 :

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

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

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

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

Pour le calcul de la structure de bandes, beaucoup de méthodes se sont développées dans ce domaine et qui s'améliorent de plus en plus avec le développement de l'outil informatique.

I.5. Méthodes de calcul des structures de bandes électronique :

I.5.1. La méthode cellulaire :

C'est la première tentative de calcul de la structure de bande. Cette méthode introduite par Wigner et Seitz, déduit que la relation de Bloch.

$$\psi(r+R) = \exp(ik \cdot R) \psi(r) \quad (\text{I-26})$$

est une bonne solution de l'équation de Schrödinger à l'intérieur d'une cellule unitaire et qu'elle peut être déterminée dans n'importe quelle autre cellule primitive en respectant les conditions de Bloch suivantes :

$$\psi(r) = \exp(-ik \cdot R) \psi(r+R) \quad (\text{I-27})$$

$$\nabla \psi(r) = -\exp(-ik \cdot R) \nabla \psi(r+R) \quad (\text{I-28})$$

Avec r et $r+R$ appartiennent à la surface de la même cellule.

La première approximation dans cette méthode est de remplacer le potentiel $V(r)$ de la cellule unitaire par un potentiel sphérique $U(r)$ et de le choisir comme potentiel d'un seul ion, à l'origine, en ignorant la contribution des ions voisins.

La solution complète de l'équation de Schrödinger est de la forme suivante :

$$\psi_{lm}(r) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (\text{I-29})$$

Où :

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques et $\chi_l(r)$ les fonctions radiales qui satisfaisant l'équation de Schrödinger :

$$\chi_l''(r) + \frac{2}{r} \chi_l'(r) + \frac{2m}{h} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l(r) = 0 \quad (\text{I-30})$$

Donc, n'importe quelle combinaison linéaire de $\psi_{lm}(r)$ est aussi solution de l'équation de Schrödinger.

$$\Psi(r) = \sum_{lm} A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (\text{I-31})$$

Les conditions aux limites donnent un système d'équations en A_{lm} qui sert à calculer l'énergie E en annulant le déterminant du système. De cette façon, on détermine le spectre E(k) pour k fixe.

I.5.2. La méthode des ondes planes :

Dans cette méthode, on considère que le potentiel $V(r)$ du cristal est un potentiel périodique qu'on peut écrire sous la forme d'une série de Fourier.

$$V(r) = \sum_b C_b \exp [i2\pi (b \cdot r)] \quad (\text{I-32})$$

Dans ce cas la fonction d'onde est une fonction périodique qui doit satisfaire la condition de Bloch.

$$\psi(r) = \sum_g a_g \phi(r) = \sum_k \exp(ik \cdot r) \phi(r) \quad (\text{I-33})$$

Avec $\phi(r)$ est une fonction d'onde périodique qui s'écrit :

$$\phi(r) = \sum_{k'} \exp(ik' \cdot r) \exp[i2\pi(k' \cdot r)] = \sum_{g'} a_{g'} \exp[i2\pi(g' \cdot r)] \quad (\text{I-34})$$

$$\rightarrow \psi(r) = \sum_g a_g \cdot \exp [i(k + 2\pi g') \cdot r] \quad (\text{I-35})$$

En remplaçant $\psi(r)$ et $V(r)$ par leurs expressions dans l'équation de Schrödinger on trouve :

$$a_g \frac{\hbar^2 (k + 2\pi g')^2}{2m} + \sum_b C_b a_{g-b} = E_{a_g} \quad (\text{I-36})$$

Ce système d'équation en a_g permet en faisant appel à l'équation de Schrödinger de calculer $E(k)$ en supposant que les coefficient C_b sont connu ($V(r)$ connu) [14].

I.5.3. La méthode des ondes planes Augmentées (A.P.W)

Cette méthode a été imaginée pour pallier au problème des conditions aux limites inhérentes à la méthode cellulaire. Le potentiel cristallin est supposé sphérique à

l'intérieur d'une sphère de rayon r_s entourant les atomes et constant à l'extérieur de cette sphère. Ce type de potentiel est appelé le potentiel de muffin-tin (nid d'abeille).

Les fonctions d'ondes sont développées en ondes sphériques dans les régions où le potentiel est de type atomique et en ondes planes dans les régions où le potentiel est constant. Ces fonctions d'ondes sont appelées ondes planes augmentées, elles sont continues en $r = r_s$ et ne présentent de ce fait aucun problème de conditions aux limites [12].

I.5.5. La méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W) :

Une méthode alternative pour combiner les oscillations rapides de la région du cœur ionique avec les ondes planes de la région de valence : la méthode des ondes planes orthogonalisées de Hering.

Hering note que le fait d'approximer les fonctions d'ondes de valence échoue de produire les oscillations rapides de la région du cœur. Pour corriger, il considère plutôt des ondes planes orthogonales aux niveaux du cœur, ainsi il définit l'O.P.W (l'onde plane orthogonalisée) par :

$$\Psi_k(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \sum_c b_c \Phi_k^c(\mathbf{r}) \quad (\text{I-37})$$

c définit le cœur, donc la sommation est sur tous les niveaux du cœur.

La constante b_c est calculée par l'orthogonalité de Ψ_k avec chaque niveau du cœur.

$$\int d\mathbf{r} \Phi_k^c(\mathbf{r}) \Psi_k(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{I-38})$$

$$b_c = -\int dr \Phi_k^c(r) \exp(ik.r) \quad (\text{I-39})$$

ψ_k satisfait la condition de Bloch, les états propres de l'équation de Schrödinger sont donc des ondes planes orthogonalisées de la forme :

$$\Psi(r) = \sum C_k \Psi_k(r) \quad (\text{I-40})$$

Les coefficients C_k et l'énergie E_k sont calculés en insérant l'expression de $\psi(r)$ dans l'expression variationnelle.

Cette méthode a été utilisée avec succès dans l'étude des semiconducteurs, les isolants et les métaux [6,12].

1.5.5 La méthode du pseudopotentiel :

La méthode du pseudopotentiel comme la méthode OPW, utilise les propriétés d'orthogonalités des états de valence et de conduction avec les états du cœur. Mais dans le formalisme du pseudopotentiel l'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel. L'effet d'orthogonalisation aux états du cœur revient à extraire du potentiel cristallin la contribution rapidement variable de la région du cœur. Le pseudopotentiel V_p est alors lentement variable et se prête bien à une approche du problème en terme de perturbation [13].

Chapitre II

La méthode du pseudopotentiel

II.1. Introduction :

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 qu'elle ne considère que les électrons de valence. Les électrons du cœur sont supposés figés 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 [15].

II.2. Le formalisme mathématique :

Comme dans la méthode O.P.W la fonction d'onde Ψ est donnée par la somme d'onde planes ϕ et des états atomiques occupés du cœur Φ_c

$$\Psi = \Phi + \sum b_c \Phi_c \quad (\text{II-1})$$

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

ainsi $\langle \Phi_c | \Psi \rangle = 0$ ce qui implique que :

$$\Psi = \Phi - \sum_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle \Phi_c \quad (\text{II-2})$$

On trouve l'énergie correcte E en substituant l'expression de Ψ dans l'équation de Schrödinger $H\Psi = E\Psi$:

$$H\Phi + \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle = E\Phi \quad (\text{II-3})$$

Qu'on peut écrire d'une façon condensée :

$$(H + V_R) \Phi = E\Phi \quad (\text{II-4})$$

Où

$$V_R \Phi = \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle \quad (\text{II-5})$$

V_R représente le potentiel répulsif.

Dans l'équation (II-4), il est important de noter que la valeur propre de l'énergie E n'est pas une pseudo énergie, mais la vraie énergie correspondante à la vraie fonction d'onde Ψ

Si l'énergie est séparée en énergie cinétique et en potentiel attractif V_c , l'expression (II-4) devient :

$$\left(\frac{-\eta^2}{2m} \Delta + V_c + V_R \right) \Phi = \left(\frac{-\eta^2}{2m} \Delta + V_P \right) \Phi = E\Phi \quad (\text{II-6})$$

Où :

V_P est le pseudopotentiel, car c'est la somme d'un potentiel attractif V_c et un potentiel répulsif V_R .

V_R devient faiblement attractif dans la région du cœur et faiblement répulsif dans la région des électrons de valence.

II.3. Caractéristiques du pseudopotentiel :

Le pseudopotentiel est considéré comme une perturbation, V_c est négatif (potentiel attractif près du cœur), les éléments de matrice du pseudopotentiel V_R sont donnés par :

$$\Psi V_R \Psi = \sum_c (E^v - E^c) \left| \int dr \Psi^{c*} \Psi \right|^2 \quad (\text{II-7})$$

Etant donné que E_v est légèrement supérieure à E_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 valences.

Si on néglige l'effet du cœur, le pseudopotentiel devient local est dépend explicitement de la position r , il peut être comme suit :

$$V_R = V(r, r') = \sum_c (E - E_c) |\Phi(r)\rangle \langle \Phi_c(r) | \Phi \rangle \quad (\text{II-8})$$

Où la fonction Φ dépend de r .

Si on tient compte de l'effet du cœur, le potentiel devient non local.

II.4. Les modèles du pseudopotentiel :

Le pseudopotentiel a une large application comme outil de calcul pour obtenir la structure de bandes électronique des matériaux, dans ce cas le modèle du pseudopotentiel empirique (E.P.M) est utilisé pour ajuster quelques propriétés des semiconducteurs et de leurs alliages.

II.4.1. Le modèle local :

Le modèle le plus simple consiste en un potentiel local dépendant de la variable r , et pour ce fait plusieurs formes de potentiels ont été proposées :

Le premier consiste en un potentiel de coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région du cœur, la forme de ce potentiel est la suivante :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ -\frac{Ze}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-9})$$

Où

Z est la valence atomique.

r_c est le paramètre utilisé pour ajuster les données atomiques.

Heirne et Aberenkov ont introduit un potentiel A considéré comme constant dans la région du cœur dans ce cas le potentiel est :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-10})$$

Enfin Aschkroft proposa une autre forme de potentiel similaire est qui est beaucoup utilisée, c'est le potentiel des cœurs inoccupés donné par :

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-11})$$

Les énergies des semiconducteurs sont généralement, des données expérimentales prises des spectres optiques, diffraction des rayons X, réflexion ...

Et pour ce fait le potentiel V_p utilisé pour le calcul des énergies s'écrit sous la forme d'un développement en série de Fourier où les constantes $v(G)$ sont des paramètres expérimentaux.

II.4.2. Modèle non local :

De la même façon, le potentiel peut être non local en choisissant des constantes différentes dans la région du cœur pour chaque l (nombre quantique). La dépendance en énergie peut être ainsi incluse en remplaçant la constante A par $A_l(E)$.

On peut donc écrire le pseudopotentiel non local sous la forme suivante :

$$V^P = V_{NL}(r, E) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{II-12})$$

Où

$A_l(E)$ est appelée énergie des états profonds, c'est la constante de la dépendance du potentiel en énergie des états du cœur.

P_l est l'opérateur de projection de la $l^{\text{ième}}$ composante des moments angulaires.

$f_r(r)$ est la fonction qui représente l'effet de l'état du cœur, elle a plusieurs formes telle que la forme Gaussienne, carré et la forme de Aschkroft.

II.5. La méthode empirique de pseudopotentiel :

C'est une autre image de la méthode du pseudopotentiel, elle a été appliquée avec succès aux semiconducteurs de structure diamant et de structure zinc blende. Dans cette méthode empirique du pseudopotentiel, la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelque termes de $V(G)$ que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux. L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de formes $V(G)$ du pseudopotentiel $V_p(r)$ présenté par la superposition linéaire des pseudopotentiels atomiques

$$V_p(r) = \sum_{R, \tau} V_a(r - R - \tau) \quad (\text{II-13})$$

R est un vecteur du réseau direct.

τ est le vecteur de translation du réseau direct.

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

$$V_p(r) = \sum_G S(G) V_a(G) \exp(iG \cdot r) \quad (\text{II-14})$$

$V_a(G)$ est le facteur de forme, $S(G)$ est le facteur de structure donné par [16] :

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iGr) \quad (\text{II-15})$$

N_a étant le nombre d'atomes de base.

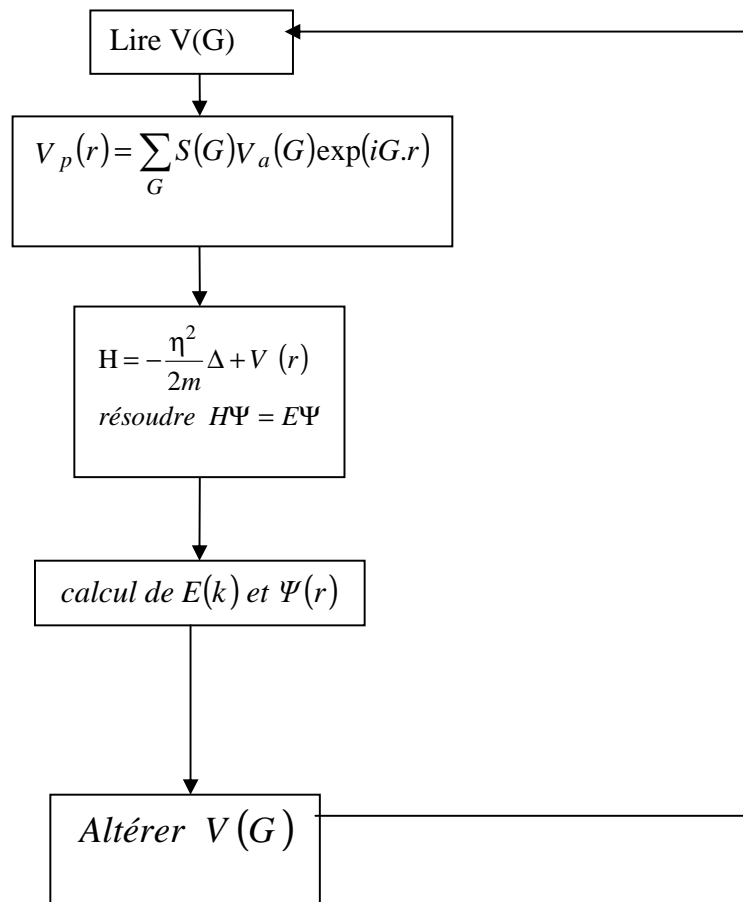
La fonction d'onde $\Psi_n(r)$ et les valeurs des bandes d'énergie $E_n(k)$ sont les solutions de l'équation :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_P(r) \right] \Psi(r) = E_n(k) \Psi_{n,k}(r) \quad (\text{II-16})$$

où n représente l'indice de la bande.

les fonctions $\Psi_{n,k}(r)$ ont la forme d'une fonction de Bloch et peuvent être développées en une série d'ondes planes.

Le procédé de calcul d'E.P.M est comme le montre le diagramme suivant [15] :



Organigramme de la méthode E.P.M

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 [17].

Les alliages ternaires semiconducteurs des composés III-V de la forme AB_xC_{1-x} où (x) représente la concentration du composé AB et (1-x) celle du composé AC, ont attiré une attention considérable pour différentes applications optoélectroniques grâce à l'ajustement de plusieurs de leurs paramètres physiques en fonction de la fraction molaire x [18].

III.2. La dépendance en composition des propriétés physiques des alliages semiconducteurs AB_xC_{1-x} :

Un alliage ternaire semiconducteur est supposé uniforme, cependant l'effet des fluctuations dû à la composition x est inévitable, plusieurs de ses paramètres physiques tels que la constante du réseau, la structure de bande électronique, la

masse effective, le potentiel de déformation les propriétés dynamique du réseau, les constantes diélectriques et optiques varient selon la composition x et peuvent être représentés par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants, plutôt que de traiter cet alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [12].

Le cristal ternaire AB_xC_{1-x} est composé de molécules AB avec une fraction molaire x et des molécules AC avec une fraction $(1-x)$, la valeur moyenne de sa propriété physique $F(x)$ étant :

$$\overline{F(x)}_{AB_xC_{1-x}} = x F_{AB} + (1-x) F_{AC} \quad (\text{III-1})$$

certaines propriétés suivent la loi de Vegard comme le paramètre du réseau donné par [19]:

$$a_{AB_xC_{1-x}}(x) = \overline{a(x)} = x a_{AB} + (1-x) a_{AC} \quad (\text{III-2})$$

a_{AB} est la constante du réseau du composé AB, et a_{AC} est la constante du réseau du composé AC et x est la concentration molaire.

D'autres par contre suivent une interpolation quadratique, comme l'énergie électronique.

Plusieurs approches théoriques ont été envisagées pour l'étude des propriétés physiques de ces alliages.

III.2.1. L'approximation du cristal virtuel (VCA) :

L'approximation du cristal virtuel VCA est l'approche la plus préférée grâce à sa simplicité, elle postule que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen.

L'Hamiltonien H considéré pour la VCA est donné par :

$$H = -\left[\frac{\eta^2}{2m}\nabla^2 + V_{AC}(r)\right] + x[V_{AB}(r) - V_{AC}(r)] \quad (\text{III-3})$$

$$H = -\frac{\eta^2}{2m}\nabla^2 + [xV_{AB}(r) + (1-x)V_{AC}(r)] \quad (\text{III-4})$$

Où :

V_{AB} et V_{AC} sont respectivement les potentiels périodiques des éléments AB et AC [12].

La méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA) reste la plus simple et offre des résultats compatibles et raisonnables pour la structure de bandes [20].

Le gap énergétique pour la plupart des alliages ternaires est approximativement donné sous la forme d'une fonction quadratique [11] :

$$T_{ABC}(x) = xT_{AB} + (1-x)T_{AC} + Cx(1-x) \quad (\text{III-5})$$

avec T_{AB} est le gap énergétique du composé AB

T_{AC} est le gap énergétique du composé AC.

C est souvent nommé « paramètre de courbure » ou « Bowing » ou « paramètre non linéaire » et prouvé par l'expérience.

Cependant la VCA donne des paramètres de courbure (Bowing) du gap énergétique déviant d'une valeur importante de celle fournie par l'expérience. Pour remédier à cela, il est nécessaire d'introduire l'effet du désordre compositionnel dans le formalisme de la VCA, en ajoutant un terme correctif à l'Hamiltonien appelé potentiel du désordre effectif [20].

III.2.2. Le potentiel du désordre effectif :

Pour un alliage ternaire semiconducteur AB_xC_{1-x} avec x la concentration stœchiométrique du composé AB et $(1-x)$ celle du composé AC, pour une distribution des composés AB et AC dans les sites des deux sous réseaux le potentiel du désordre $V_{dés}$ s'écrit d'après Baldereschi et Maschke [12] :

$$V_{dés} = (1 - x) \sum_{j_{AB}} \Delta(r - R_j) - x \sum_{j_{AC}} \Delta(r - R_j) \quad (III-6)$$

Où :

$$\Delta(r) = V_{AB}(r) - V_{AC}(r) \quad (III-7)$$

j_{AB} et j_{AC} indiquent que la sommation est sur les sites des molécules AB et AC respectivement.

La VCA considère les approximations suivantes :

$$\sum_{j_{AB}} \Delta(r - R_j) = x \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (III-8)$$

$$\sum_{j_{AC}} \Delta(r - R_j) = (1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{III-9})$$

Ces approximations donnent $V_{dés}=0$, on aboutit donc à un désaccord entre les valeurs calculées et celles fournies par l'expérience, conséquence d'avoir négliger l'effet du désordre compositionnel. Pour remédier à ce problème l'effet du désordre est introduit par le potentiel $V_{dés}$ c'est ce qu'on appelle la VCA améliorée qui considère les approximations suivantes :

$$\sum_{j_{AB}} \Delta(r - R_j) = \alpha \times \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{III-10})$$

$$\sum_{j_{AC}} \Delta(r - R_j) = \beta (1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{III-11})$$

Où α et β sont des fonctions du désordre qui dépendent de la concentration x et de l'énergie potentielle. Dans ce cas, le potentiel du désordre devient :

$$V_{dés} = (\alpha - \beta) x (1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{III-12})$$

On considère que le terme $(\alpha - \beta)$ est un terme ajustable et par un calcul de probabilité, on aura :

$$\alpha - \beta = -\frac{1}{N(x(1-x))^{\frac{1}{2}}} \left[N^2 \frac{(1-x)}{x} + \sum_{n=0}^N C_n^N x^{N-n-1} (1-x)^{n-1} (n^2 - 2nN(1-x)) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-13})$$

Où :

C_n^N représente la combinaison d'occupation des N sites par les composés AB ou AC.

Après simplification des calculs, on aura :

$$\alpha - \beta = -[x(1-x)N]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{III-14})$$

En substituant cette expression dans l'équation (III-12) on trouve :

$$V_{dés}(r) = -\left(\frac{x(1-x)}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (\text{III-15})$$

Si on considère tous les sites du cristal étudié l'expression de $V_{dés}$ aura cette forme [4] :

$$V_{dés}(r) = -P(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (\text{III-16})$$

Où

$$P = \frac{\left(\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)^2\right)^{\frac{1}{2}}}{\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)} \quad (\text{III-17})$$

P : un facteur d'ajustement donnant le meilleur bowing.

i : indique le $i^{\text{ème}}$ plus proche voisin.

n : peut être étendu pour inclure tous les sites du cristal.

d_i : la distance entre $i^{\text{ème}}$ plus proche voisin [21].

III.2.3. 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 pseudopotentiel du système devient [22,23] :

$$V(r) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (\text{III-18})$$

$$V(r) = V_{VCA} - P(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{III-19})$$

V_{VCA} : le potentiel périodique du cristal virtuel.

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

L'équation (III-19) peut être écrite sous une forme plus étendue [24]:

$$V(r) = x V_{AB}(r) + (1-x) V_{AC}(r) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} (V_{AB} - V_{AC}) \quad (\text{III-20})$$

Sous une forme plus condensée, en terme de séries de Fourier, $V(r)$ devient :

$$V(r) = \sum_G V(G) \exp(iG \cdot r) \quad (\text{III-21})$$

Avec $V(G)$ est le facteur de forme donné par :

$$V(G) = xV_{AB}(G) + (1-x)V_{AC}(G) - P[x(1-x)]^{1/2}[V_{AB}(G) - V_{AC}(G)] \quad (\text{III-22})$$

$V_{AB}(G)$ et $V_{AC}(G)$ sont les facteurs de formes des composés AB et AC respectivement.

Ces facteurs de formes ont été utilisés pour le calcul des gaps d'énergie de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ en faisant varier la valeur du paramètre P jusqu'à l'obtention du bowing optique expérimental qui est égal dans notre cas (P=0.71) correspondant à un bowing optique expérimental (c=1.2). les facteurs de formes de cet alliage sont calculés selon l'expression (III-22) d'où

$$V_{\text{GaAsSb}}(G) = xV_{\text{GaAs}}(G) + (1-x)V_{\text{GaSb}}(G) - P[x(1-x)]^{1/2}[V_{\text{GaAs}}(G) - V_{\text{GaSb}}(G)] \quad (\text{III-23})$$

Chapitre IV

Etude des propriétés optiques et diélectriques des alliages ternaires semiconducteurs

IV.1. Introduction :

Comme nous l'avons vu, pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux, nous devons tenir compte des différents rôles joués par l'électron dans la structure des solides.

Dans ce chapitre, nous verrons que notre connaissance du comportement des électrons va jusqu'à nous expliquer la réflexion de la lumière par certains solides, alors que quelques-uns l'absorbent et que d'autres sont transparents. Elle nous apporte aussi l'explication pour certains solides de pouvoir sous certaines conditions, émettre de la lumière [25].

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux. [7]

Les alliages ternaires semiconducteurs III-V sont considérés comme une classe des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leurs paramètres physiques ; l'étude de leur propriétés optiques, diélectriques et leur variation en fonction de la concentration en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel développé dans le chapitre précédent est d'une importance principale.

IV.2. Interaction rayonnement matière :

IV.21. Photons et électrons :

La nature ondulatoire du rayonnement électromagnétique est représentée par la combinaison d'un champ électrique \vec{E} et un champ magnétique \vec{H} satisfaisant aux équations de Maxwell qui s'écrivent dans un milieu non magnétique, isotrope et non chargé:

$$\overrightarrow{\text{rot}} \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (\text{IV-1-a})$$

$$\overrightarrow{\text{rot}} \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (\text{IV-1-b})$$

$$\text{div} \vec{E} = 0 \quad (\text{IV-1-c})$$

$$\text{div} \vec{H} = 0 \quad (\text{IV-1-d})$$

Où $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ est la constante diélectrique du milieu. Les champs : électrique et magnétique vibrent perpendiculairement l'un par rapport à l'autre et à la direction de propagation. La similarité de leurs comportement permet de ramener la représentation de rayonnement à la seule expression du champ électrique qui s'écrit :

$$\vec{E}^{\rho} = \vec{E}_0^{\rho} e^{(j\omega - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (\text{IV-2})$$

avec $\omega = 2\pi\nu$ la pulsation et \vec{k} le vecteur d'onde.

L'expression (IV-2) est solution de l'équation (IV-1).

L'onde réelle est constituée de paquets d'ondes qui se propagent avec une vitesse $V_g = \frac{d\omega}{dk}$ que l'on appelle vitesse de groupe.

La représentation ondulatoire du rayonnement que nous venons de rappeler est bien adaptée à l'étude des interactions rayonnement –rayonnement.

Dans le cas des interactions rayonnement –matière, et plus particulièrement lorsqu'il y a échange d'énergie, comme c'est le cas dans les composants optoélectroniques, la représentation corpusculaire du rayonnement est mieux adaptée.

Einstein a suggéré que l'énergie du rayonnement n'était pas étalée dans tout l'espace mais concentrée dans certaines régions se propageant comme des particules qu'il a appelées des photons. l'énergie du photon est donnée par [13] :

$$E = h\nu = \eta\omega \quad (\text{IV-3})$$

IV.2.2. La réflexion des ondes planes :

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constantes diélectriques différentes, elle sera divisée en deux, une onde réfléchie et une onde réfractée, leurs amplitudes seront déterminées par les conditions aux limites qu'exigent que la composante tangentielle du champ \vec{E} doit être la même dans les deux milieux ainsi que la composante tangentielle du champ \vec{H} .

Pour une onde électromagnétique d'angle incidente Φ se propage du vide sur les limites du milieu d'indice de réfraction complexe N donné par :

$$N = n + ik \quad (\text{IV-4})$$

n : étant l'indice de réfraction réelle.

k : est l'indice d'atténuation appelé aussi coefficient d'extinction.

les conditions aux limites mènent à la formule de Fresnel :

$$r_n = \frac{\cos \Phi - (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}}{\cos \Phi + (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}} \quad (\text{IV-5})$$

$$r_p = \frac{N^2 \cos \Phi - (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}}{N^2 \cos \Phi + (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}} \quad (\text{IV-6})$$

Les quantités r_n et r_p sont les amplitudes des coefficients de réflexion pour les composantes normale et parallèle de l'onde incidente, respectivement, définies par :

$$E_{rn} = r_n E_n$$

$$E_{rp} = r_p E_p$$

Les intensités des coefficients de réflexion R_n et R_p sont souvent appelés coefficients de réflexion déterminés par le rapport entre l'onde incidente et celle réfléchie alors :

$$R_n = |r_n|^2 \quad \text{et} \quad R_p = |r_p|^2$$

Pour une incidence normale ($\Phi = 0$), les équations (IV-5) et (IV-6) mènent au résultat suivant [7]:

$$R_n = R_p = R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{IV-7})$$

Pour $k = 0$ n est réel le coefficient de réflexion devient :

$$R = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (\text{IV-8})$$

La mesure de la réflexion de la lumière fournit l'information la plus complète sur les systèmes électroniques [17].

Pour tous les semiconducteurs, R varie entre 0.25 et 0.35, ainsi dans les meilleurs conditions c'est à dire en incidence normale, 30% du rayonnement est réfléchi par le semiconducteur [13].

Ce résultat a été mis en évidence par nos calculs dans le cas de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$.

IV.3. Interaction électron- photon (Transition radiative) :

L'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur se manifeste selon trois processus distincts :

- 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 semiconducteur 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 semiconducteurs.

Ces différents processus sont conditionnés par les règles de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement $\vec{P} = \eta \vec{k}$.

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 :

$$E_f - E_i = \pm E_p \quad (\text{IV-9-a})$$

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \pm \vec{k}_p \quad (\text{IV-9-b})$$

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

Notant en outre que si le rayonnement est communément caractérisé par sa longueur d'onde dans le vide mesurée en μm , le semiconducteur est quant à lui communément caractérisé par son gap d'énergie mesuré en électron-Volt.

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 μ [13].

$$E = h \nu = \frac{h}{T} = \frac{hc}{\lambda}$$

Soit

$$E (eV) = \frac{1.24}{\lambda (\mu)} \quad (IV-10)$$

IV.4. Transitions directes et indirectes :

Les processus d'absorption ou d'émission des photons, au voisinage du gap fondamental sont considérablement plus importants dans les matériaux à gap direct que dans les matériaux à gap indirect. La figure (IV-1) représente les différents types de transitions.

Dans le semiconducteur à gap direct (Fig IV-1-a), les transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction sont verticales, elles obéissent à la règle de conservation des vecteurs k , et par suite sont radiatives. Dans le semiconducteur à gap indirect (Fig IV-1-b), les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques et de ce fait non radiatives au premier ordre.

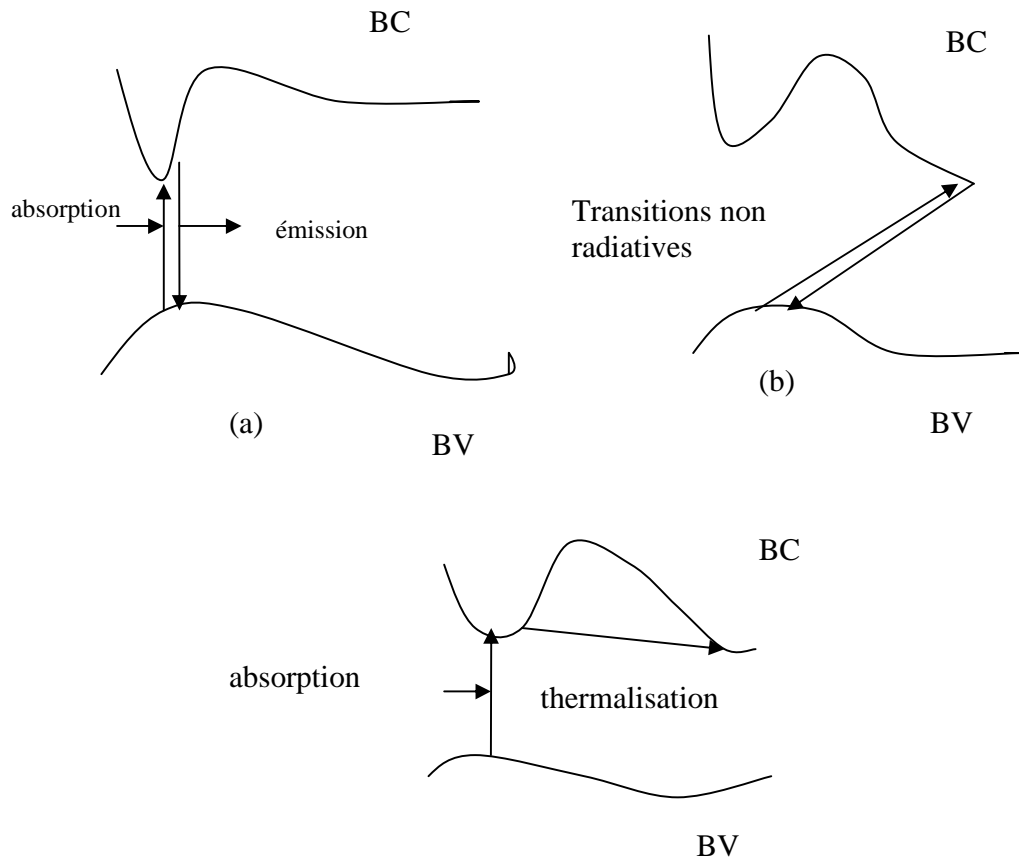


Figure (IV-1) : Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction. a) semiconducteur à gap direct, b) semiconducteur à gap indirect, c) absorption direct de photons dans un semiconducteur à gap indirect.

Notons toutefois que dans ce type de semiconducteur (gap indirect), on peut exciter obliquement des électrons du sommet de la bande de valence vers le minimum central de la bande de conduction. Les électrons ainsi excités, se thermalisent dans le minimum absolu de la bande de conduction et peuvent participer aux phénomènes de

conduction (Fig IV-1-c). Dans ce cas un phonon est absorbé par le réseau, création d'une paire électron- trou, et à cause de l'interaction photon – réseau, un phonon est souvent généré ; la longueur d'onde λ est donnée par :

$$h\nu = E_g + h\nu_{ph} \quad (\text{IV-11})$$

$$\lambda = \frac{c}{\frac{E_g}{h} + \nu_{ph}}$$

$$= 1.237 / \left(E_g + 4.14 \cdot 10^{-15} \nu_{ph} \right)$$

Si E_g est exprimé en eV, ν_{ph} en HZ, et λ en μm .

Dans les équation (IV-11),

$h\nu_{ph}$: énergie du phonon.

ν_{ph} : fréquence du phonon.

L'énergie du phonon est typiquement estimée :

$$h\nu_{ph} \approx 0.01 \text{ à } 0.03 \text{ eV} \ll E_g.$$

Cependant dans la plupart des cas l'absorption dans les processus direct et indirect est identique [13].

IV.5. Propriétés diélectriques :

IV.5.1. Relation de dispersion :

La réponse d'un cristal à un champ électrique appliqué \vec{E} est complètement décrite par la fonction diélectrique complexe $\varepsilon(\omega, \vec{k})$ [26].

Cette fonction a des conséquences importantes sur les propriétés physiques des solides [17].

Les relations de dispersions relient la partie réelle et imaginaire d'une quantité complexe qui décrit une relation linéaire entre deux grandeurs ; les conditions à l'infini et la relation de causalité sont accomplies, ils sont appelés relations de Kramers-Kronig pour le travail original de Kramers DE Kronig (1926) sur la dispersion des rayons X.

La constante diélectrique complexe est donnée par :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{IV-12})$$

Elle relie linéairement le champ électrique $\vec{E}(\omega)$ au déplacement $\vec{D}(\omega)$ par le biais de l'équation suivante :

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon(\omega)\vec{E}(\omega) \quad (\text{IV-13})$$

Cependant on peut ainsi formuler la relation de dispersion pour $\varepsilon_1(\omega)$ et $\varepsilon_2(\omega)$ [7] :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{IV-14})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{IV-15})$$

Dans ces équations, la dispersion dans l'espace (variation avec \vec{k}) est négligée, car pour la plupart des phénomènes optiques, la longueur d'onde de la lumière est grande comparée aux dimensions du système. Ces résultats ne sont valables également qu'en l'absence de champ magnétique.

Dans le cas d'un milieu isotrope ou d'un cristal cubique \mathcal{E} se réduit à un scalaire, la réponse du système à une onde plane électromagnétique peut alors être décrite à l'aide d'un indice de réfraction scalaire complexe :

$$N = n + ik = \mathcal{E}^{1/2} \quad (\text{IV-16})$$

avec :

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2$$

$$\varepsilon_2 = 2nk$$

Si une onde électromagnétique se propage dans le vide dans la direction x , le champ électrique \vec{E} est donné par :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp\left(-i\omega t - \frac{i\omega x}{c}\right) \quad (\text{IV-17})$$

Dans un cristal d'indice N, ce champ devient :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp\left(-i\omega t - i\frac{n\omega x}{c}\right) \exp(-\alpha x)$$

où $\alpha = \frac{\omega k}{c}$ est le coefficient d'absorption.

Ce résultat est bien connu, la partie réelle de n correspond à l'indice de réfraction normal du cristal dans une région de transparence, tandis que la partie imaginaire conduit à une absorption optique du cristal [26].

IV.6. Calcul de l'indice de réfraction :

Plusieurs approches ont été envisagées pour corréler le gap énergétique des semiconducteurs 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 ... [27].

Moss était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction n et le gap d'énergie E_g basée sur le modèle atomique [8].

$$E_g n^4 = k \tag{IV-18}$$

Où

E_g est le gap d'énergie et k une constante trouvée égale à 108eV.

Ravindra et al proposeront une relation linéaire entre n et E_g donnée par [9] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{IV-19})$$

Où

$$\alpha = 4.084 \quad \text{et} \quad \beta = -0.62 \text{ eV}^{-1}$$

Hervé et Vandamme proposeront un modèle basé sur la théorie des oscillations classiques pour $\omega \ll \omega_0$ [10],

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{IV-20})$$

Où

$A = 13.6 \text{ eV}$, $B = 3.4 \text{ eV}$ et ω_0 la fréquence de résonance ultraviolet.

Et pour voir la variation de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie photonique pour une valeur donnée de la concentration x nous avons adopté le même modèle utilisé par Adachi donné par l'expression analytique basé sur le modèle simple de transitions interbande [11],

$$n(\omega) = \mathcal{E}_1(\omega)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-21})$$

Où

$\mathcal{E}_1(\omega)$ est la partie réelle de la fonction diélectrique donnée par :

$$\varepsilon_1(\omega) = A \left[f(\chi_0) + \frac{1}{2} \left[\frac{E_0}{E_0 + \Delta_0} \right]^{1.5} f(\chi_{0s}) \right] + B \quad (\text{IV-22})$$

avec

$$f(\chi_0) = \chi_0^{-2} \left[2 - (1 + \chi_0)^{0.5} - (1 - \chi_0)^{0.5} H(1 - \chi_0) \right] \quad (\text{IV-23-a})$$

$$f(\chi_{0s}) = \chi_{0s}^{-2} \left[2 - (1 + \chi_{0s})^{0.5} - (1 - \chi_{0s})^{0.5} H(1 - \chi_{0s}) \right] \quad (\text{IV-23-b})$$

$$\chi_0 = \frac{\eta\omega}{E_0} \quad (\text{IV-24-a})$$

$$\chi_{0s} = \frac{\eta\omega}{E_0 + \Delta_0} \quad (\text{IV-24-a})$$

où $\eta\omega$ est l'énergie photonique,

$$H(y) = \begin{cases} 1 & \text{pour } y \geq 0 \\ 0 & \text{pour } y < 0 \end{cases} \quad (\text{IV-25})$$

$\mathcal{E}_2(\omega)$ étant prise égale à 0.

Les valeurs numériques de A, B et Δ_0 utilisées dans nos résultats de calcul de l'indice de réfraction pour les composés binaires GaAs et GaSb formant ainsi l'alliage ternaire semiconducteur $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ sont pris de la référence [11] .

Une relation d'interpolation est connue, pour être un moyen utile pour l'estimation de certains paramètres des matériaux alliages à partir des paramètres de leurs composés binaires, Δ_0 est approximativement exprimé sous la forme d'une interpolation quadratique :

$$\Delta_0(\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}) = x\Delta_{0\text{GaAs}} + (1-x)\Delta_{0\text{GaSb}} + C_\Delta x(x-1) \quad (\text{IV-26})$$

pour le $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ $C_\Delta = 0.61$ pris de [11], ce paramètre est utilisé quant l'effet du désordre compositionnel est pris en considération. Le calcul de ces paramètres permet donc d'optimiser $\epsilon_1(\omega)$ et par suite l'optimisation de l'indice de réfraction n selon la relation (IV-21) et cela pour les différents modèles proposés.

III.7. Calcul de la constante diélectrique statique $\epsilon_0(\omega)$:

Pour les trois premiers modèles, relations (III-18, III-19, III-20) on considère que la constante diélectrique en haute fréquence est :

$$\epsilon_\infty = n^2. \quad (\text{IV-27})$$

Le modèle de Harrison « bond orbital model » [28] est utilisé pour investir la dépendance en composition de la constante diélectrique statique (ϵ_0) en utilisant la relation qui lie $\epsilon_0(\omega)$ à la constante diélectrique en haute fréquence (ϵ_∞) donnée par :

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + \vartheta \quad (\text{IV-28})$$

où ϑ est donné par [28]

$$\vartheta = \alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2) / 2\alpha_c^4 \quad (\text{IV-29})$$

α_p est la polarité, déterminée en utilisant la définition de Vogl [29],

$$\alpha_p = - \frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{IV-29})$$

où

$V_S(3)$ et $V_A(3)$ sont les facteurs de formes symétriques et antisymétriques de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ pour une composition x donnée, à G(111) respectivement.

α_c est la covalence du matériau définie comme,

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (\text{IV-30})$$

Notant que, la constante diélectrique en haute fréquence (ϵ_∞) est estimée en utilisant la relation [30],

L'étude de la dépendance en composition de la constante diélectrique statique avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel est montrée dans notre travail.

Chapitre V

Résultats et discussions

V.1. Etude des propriétés électroniques :

La méthode du pseudopotentiel 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, le gap antisymétrique, la densité de charge électronique ainsi que leur variations en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Le pseudopotentiel est défini comme étant une superposition des pseudopotentiels atomiques de la forme :

$$V_p(r) = V_L(r) + V_{NL}(r) \quad (\text{V-1})$$

où

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

Dans notre cas nous avons considéré que la partie locale.

$$V_p(r) = V_L(r) = \sum_G V(G) S(G) \exp(iGr) \quad (\text{V-2})$$

où

$S(G)$ 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 [31] 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 défini par :

$$\delta = \left[\sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m - N} \right]^2 \quad (\text{V-3})$$

Où :

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

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 $k = k_j$, du $m^{\text{ième}}$ 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 binaire semiconducteurs GaAs et le GaSb dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau.1.

Composés	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau (Å)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
GaSb	-0.191206	0.005	0.043533	0.045340	0.03	0.00	6.118
GaAs	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01	5.653

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

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 2. Nos résultats sont en très bon accord avec l'expérience.

Composants	Gaps d'énergie (ev)					
	E_g^I		E_g^X		E_g^L	
	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal
GaSb	0.725 ^{a,b}	0.72 ^c	1.03 ^b	1.02 ^c	0.761 ^b	0.78 ^c
GaAs	1.42 ^d	1.42 ^c	1.81 ^d	1.81 ^c	1.72 ^d	1.72 ^c

Tableau 2. Gaps énergétiques des composés zinc-blende GaSb et GaAs.

^a Réf. [32]

^b Réf. [33]

^c Nos calculs

^d Réf. [34].

V.1.1. Structure de bandes d'énergie :

Le GaAs et le GaSb sont des semiconducteurs à gaps d'énergie direct E_g^Γ . L'étude de la structure de bandes électronique de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ est calculée pour des points de haute symétrie de la zone de Brillouin, pour quelques valeurs de x , avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Les figures (1-2) représentent les structures de bandes électroniques pour $x=0.02$ et $x=0.7$, la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence. Ces deux figures nous indiquent que le maximum de la bande de valence est au point Γ et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ , les alliages ternaires $\text{GaAs}_{0.02}\text{Sb}_{0.98}$ et $\text{GaAs}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}$ sont au gap direct E (Γ - Γ).

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 (délocalisés).

La figure3 présente la structure de bande de notre alliage pour $x=0.3$ où le maximum de la bande de valence est au point Γ et le minimum de la bande de conduction est au point L, l'alliage ternaire semiconducteur $\text{GaAs}_{0.3}\text{Sb}_{0.7}$ est au gap indirect E (Γ -L) Il est noté que pour la figure 1. l'effet du désordre n'est pas important, pour la simple raison que pour $x= 0.02$, on s'approche du composé binaire GaSb alors que pour les figures (2, 3), l'effet du désordre dû à la composition est important et ne peut pas être négliger.

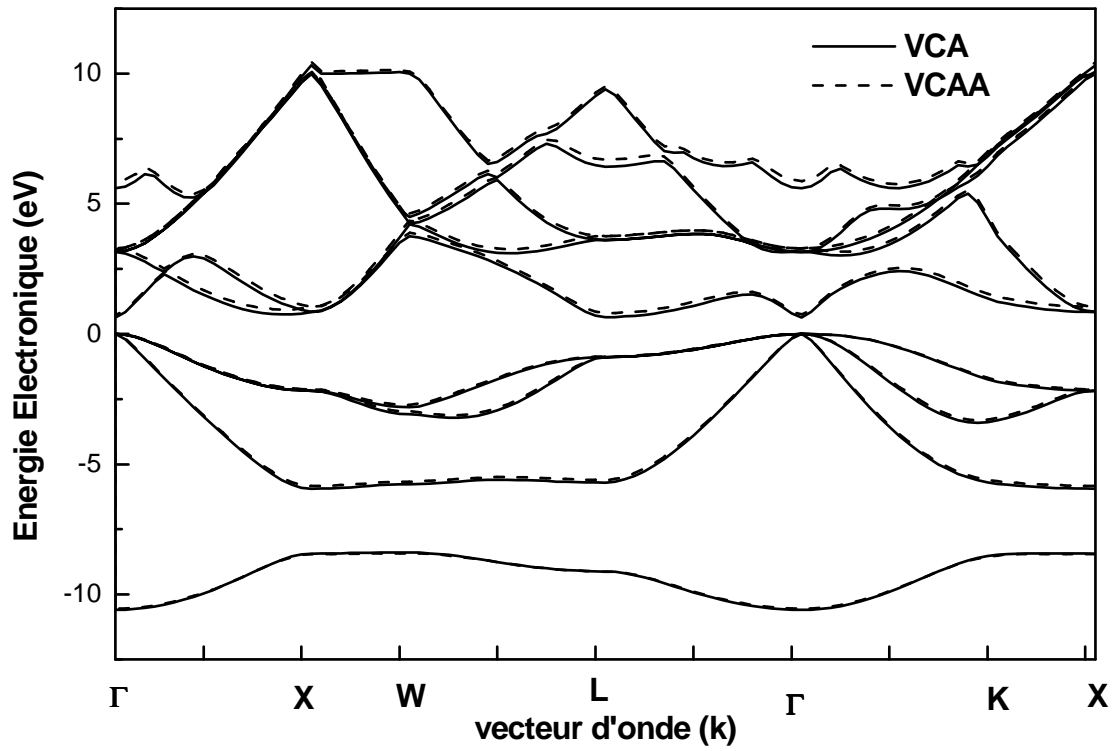


Figure 1. La structure de bande électronique de l'alliage semiconducteur GaAs_{0.02}Sb_{0.98}

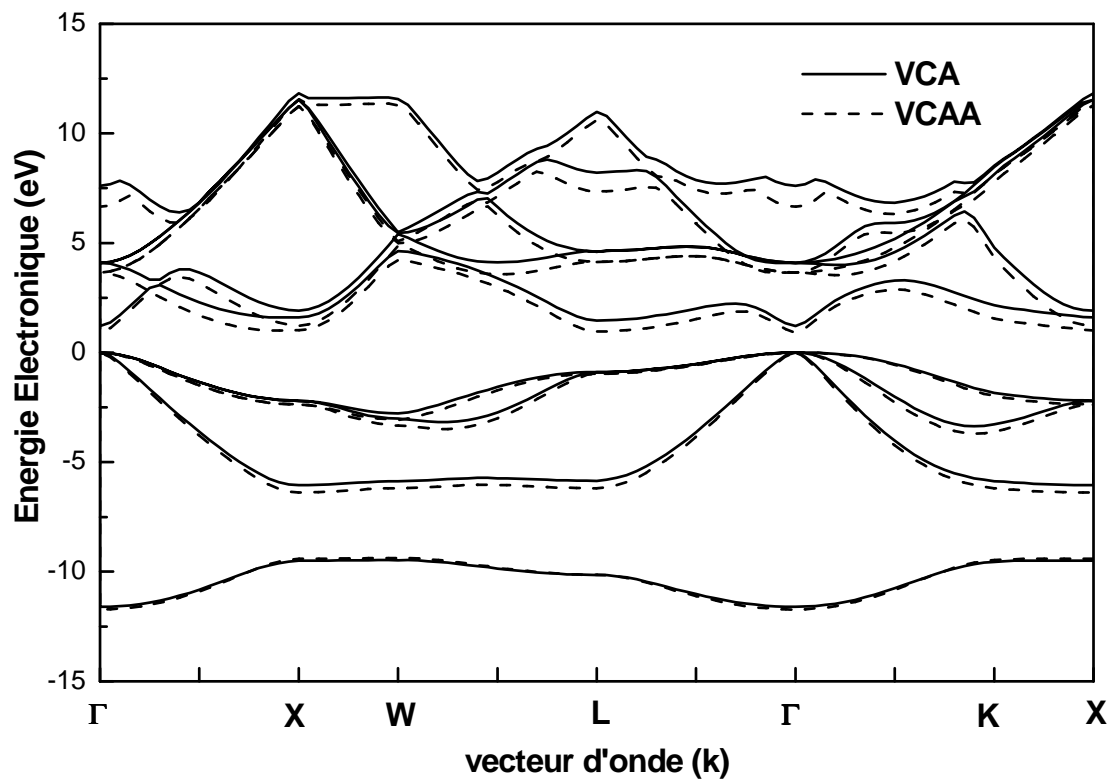


Figure2. La structure de bande électronique de l'alliage semiconducteur GaAs_{0.7}Sb_{0.3}

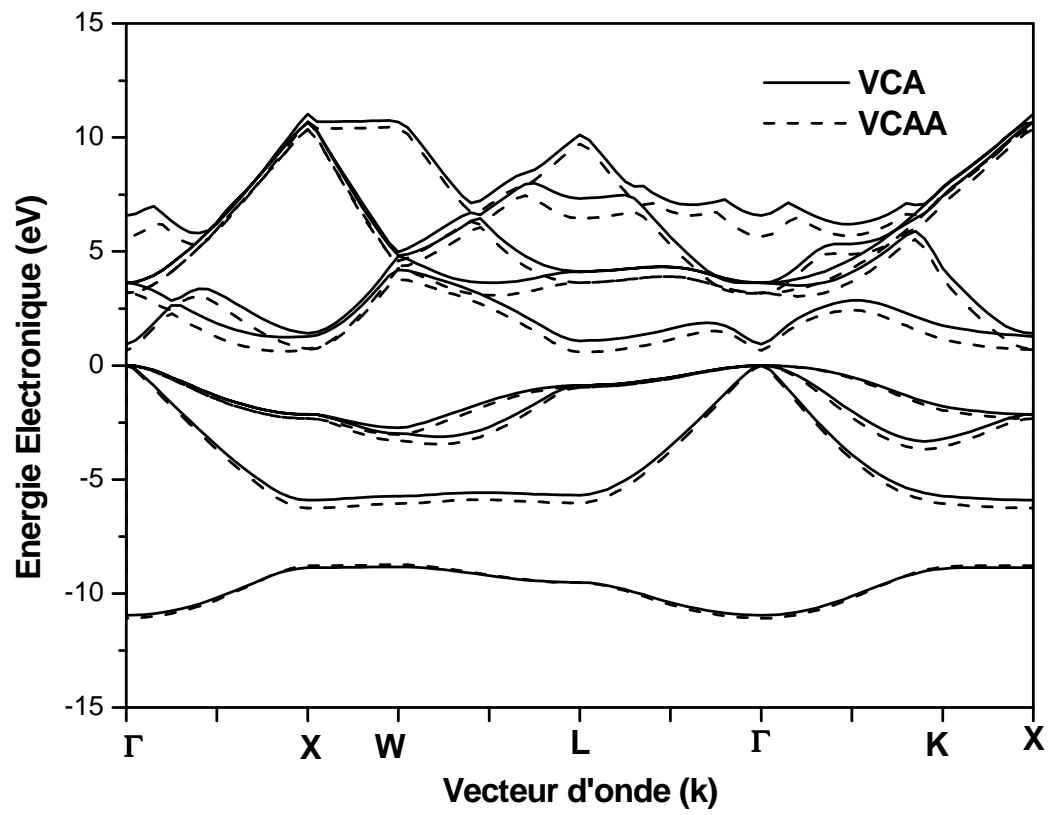


Figure 3. La structure de bande électronique de l'alliage semiconducteur $\text{GaAs}_{0.3}\text{Sb}_{0.7}$

Il est important alors de voir la dépendance en composition des gaps d'énergies de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$, nommés gap direct E_g^Γ (pris comme étant la transition $\Gamma_v - \Gamma_c$) et gaps indirects E_g^X (pris comme étant la transition $\Gamma_v - X_c$) et E_g^L (pris comme étant la transition $\Gamma_v - L_c$).

Les figures (4, 5,6) montrent la variation de ces gaps en fonction de la concentration en allant de GaSb ($x=0$) vers le GaAs ($x=1$) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Les trois gaps d'énergie augmentent non linéairement en fonction de la fraction molaire du As, les courbes correspondent à des interpolations quadratiques (fit) de la forme :

$$E = a + bx + cx(x - 1) \quad (\text{V-5})$$

où

C est le paramètre de courbure du gap d'énergie.

Leurs expressions analytiques sont comme suit :

$$E_g^\Gamma = 0.71 + 0.75x - 0.04x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-6})$$

$$E_g^\Gamma = 0.68 + 0.51x - 1.21x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-7})$$

$$E_g^X = 1.02 + 0.91x - 0.11x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-8})$$

$$E_g^X = 0.94 - 1.51x + 2.31x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-9})$$

$$E_g^L = 0.78 + 1.03x - 0.08x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-10})$$

$$E_g^L = 0.72 - 1.07x + 2.02x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-11})$$

l'unité des gaps d'énergies est en eV

d'après l'équation (V-6), on remarque que pour la VCA ($p=0$) le bowing est égal à (-0.04), qui est en désaccord avec l'expérimental donnant un bowing optique égal à 1.2 [35], mais lorsque on ajoute le terme correctif, c'est à dire en utilisant la VCA améliorée ($p \neq 0$) qui fait intervenir le potentiel effectif dû à l'effet du désordre compositionnel dans le potentiel total du cristal (voir chapitre III), un très bon accord est trouvé avec le bowing expérimental $c=1.21$ pour $p=0.71$.

la valeur de c pour E_g^X est la plus grande comparée aux valeurs de c pour les gaps E_g^Γ et E_g^L , cela signifie que le gap énergétique E_g^X est fortement affecté par le désordre compositionnel.

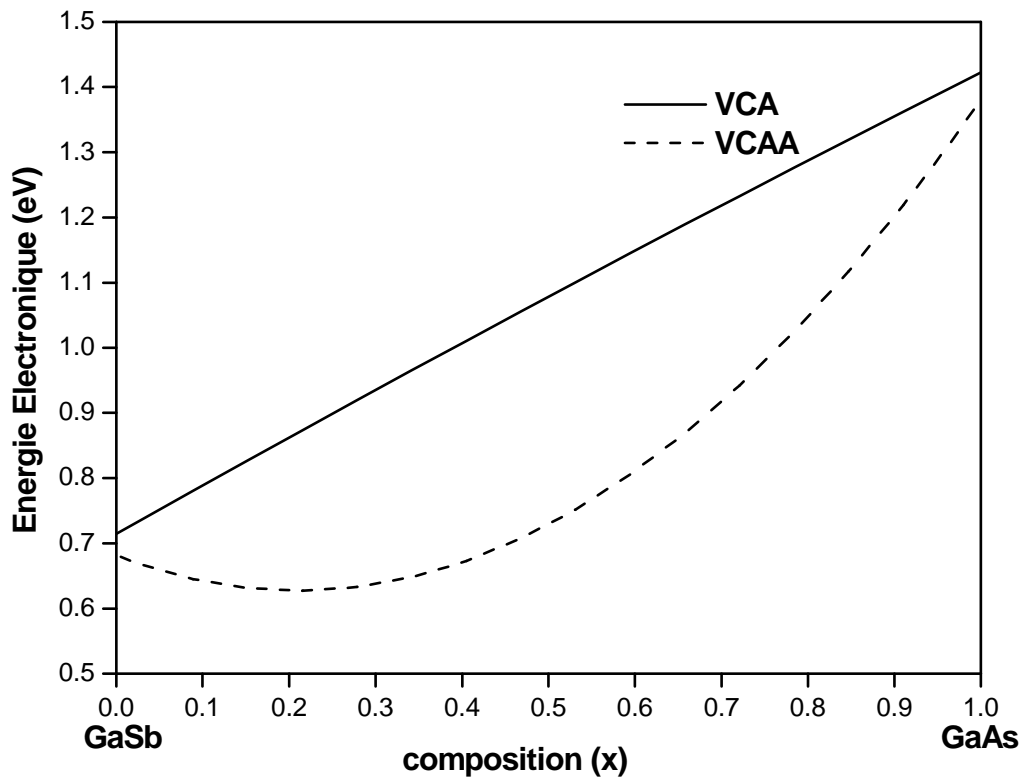


Figure 4. La variation du gap d'énergie E_g^Γ en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel

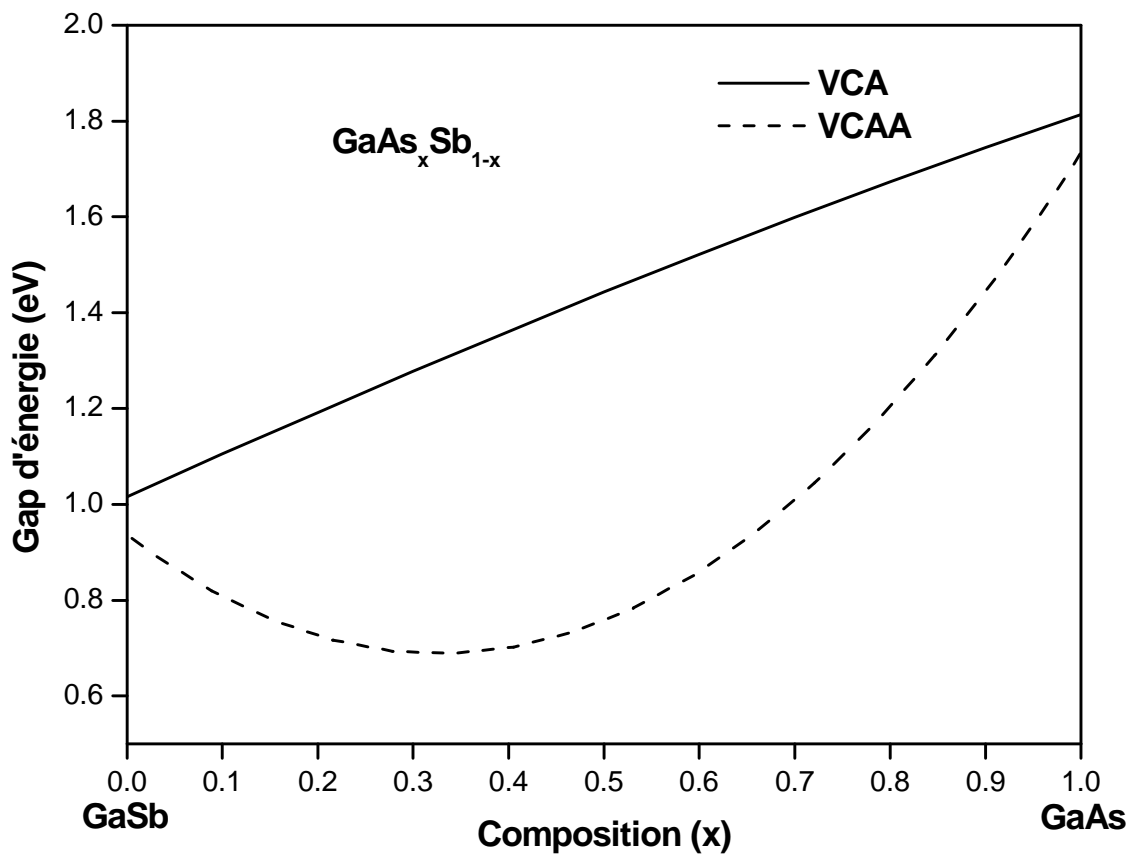


Figure 5. La variation du gap d'énergie E_g^x en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel

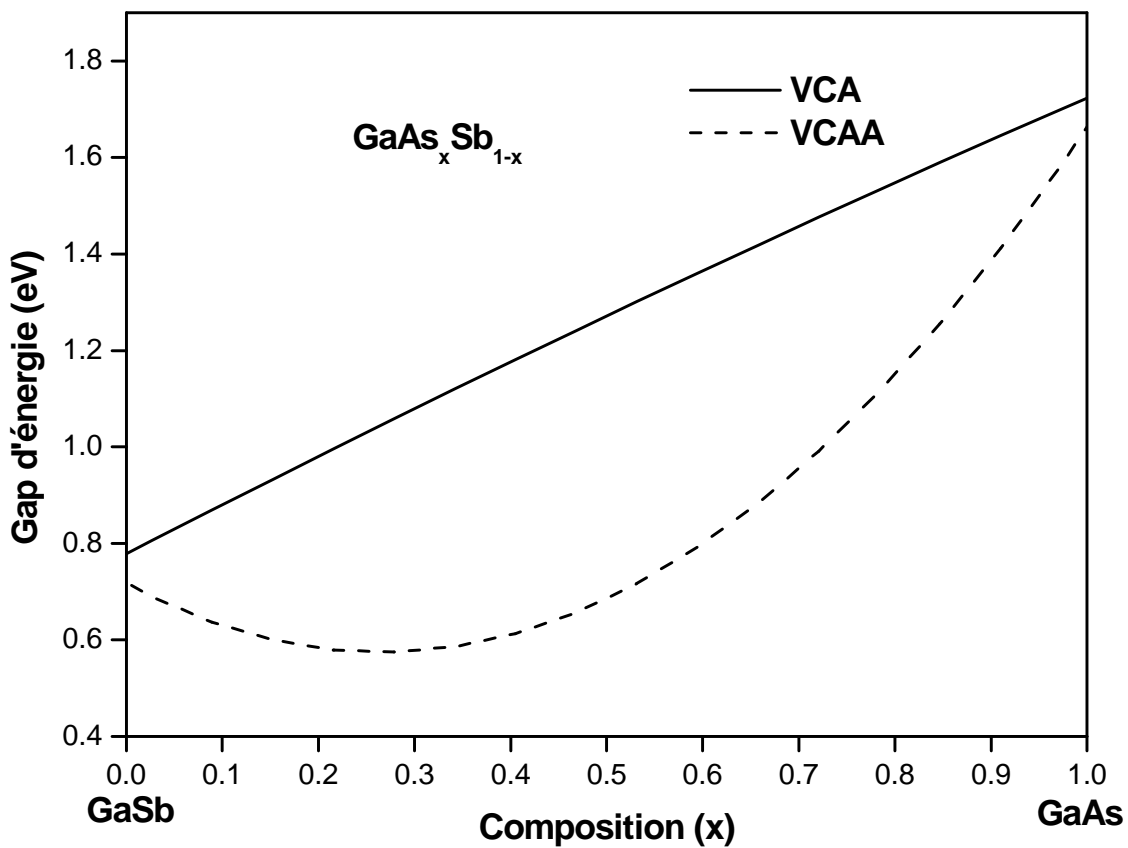


Figure 6. La variation du gap d'énergie E_g^L en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel

L'examen de la structure de bandes électronique nous informe sur la nature du gap d'énergie ; pour les concentrations $x=0.02$ et $x=0.7$, l'alliage $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ est au gap direct alors que pour $x=0.3$ notre alliage est au gap indirect.

L'étude de la variation des gaps d'énergies E_g^Γ , E_g^X , E_g^L , en fonction de la concentration x en utilisant la VCA et la VCAA confirme cette information donnée par la structure de bandes.

Les figures 7a et 7b représentent la variation des gaps énergétiques en fonction de la composition x pour la VCA et la VCAA respectivement. Dans la figure 7a, aucune transition de gap n'est observée, ce qui est en contradiction avec l'étude de structure de bandes électronique, par contre dans la figure 7b où on tient compte de l'effet du désordre compositionnel, deux transitions ont lieu, la première est en $x = 0.048$, le gap de notre alliage passe de E_g^Γ (direct) au E_g^L (indirect) avec une valeur de 0.62eV et la deuxième est en $x=0.59$, le gap passe de E_g^L (indirect) au gap E_g^Γ (direct) avec une valeur de 0.82 eV , donc pour $0 \leq x < 0.048$ et $0.59 < x \leq 1$ nos résultats montrent que notre matériau est au gap direct E_g^Γ et pour $0.048 < x < 0.59$ il devient un semiconducteur à gap indirect.

Quelques résultats des gaps d'énergie de l'alliage étudié pour quelques concentrations sont donnés dans le tableau 3.

Pour $x = 0.5$ notre alliage est au gap indirect $E_g^L = 0.73\text{ eV}$, le $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ est souvent rencontré avec cette composition sur le substrat InP [3]. Une autre composition intéressante est $x = 0.91$ avec laquelle notre matériau est investi sur un substrat à base de InAs [3], nos résultats montrent qu'avec cette concentration le $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ est un semiconducteur à gap direct $E_g^\Gamma = 1.17\text{eV}$

Alliage ternaire	Gap d'énergie (eV)					
	E_g^Γ		E_g^X		E_g^L	
GaAs _{0.10} Sb _{0.90}	0.60 ^a	0.79 ^b	0.70 ^a	1.11 ^b	0.55 ^a	0.88 ^b
GaAs _{0.30} Sb _{0.70}	0.64 ^a	0.93 ^b	0.70 ^a	1.28 ^b	0.58 ^a	1.10 ^b
GaAs _{0.50} Sb _{0.50}	0.75 ^a	1.10 ^b	0.81 ^a	1.44 ^b	0.73 ^a	1.27 ^b
GaAs _{0.70} Sb _{0.30}	0.92 ^a	1.22 ^b	1.02 ^a	1.60 ^b	0.96 ^a	1.46 ^b
GaAs _{0.91} Sb _{0.09}	1.17 ^a	1.36 ^b	1.39 ^a	1.75 ^b	1.33 ^a	1.64 ^b

Tableau 3. : Calcul des gaps d'énergies de l'alliage GaAs_xSb_{1-x} pour différentes Compositions x.

^a Avec désordre.

^b Sans désordre.

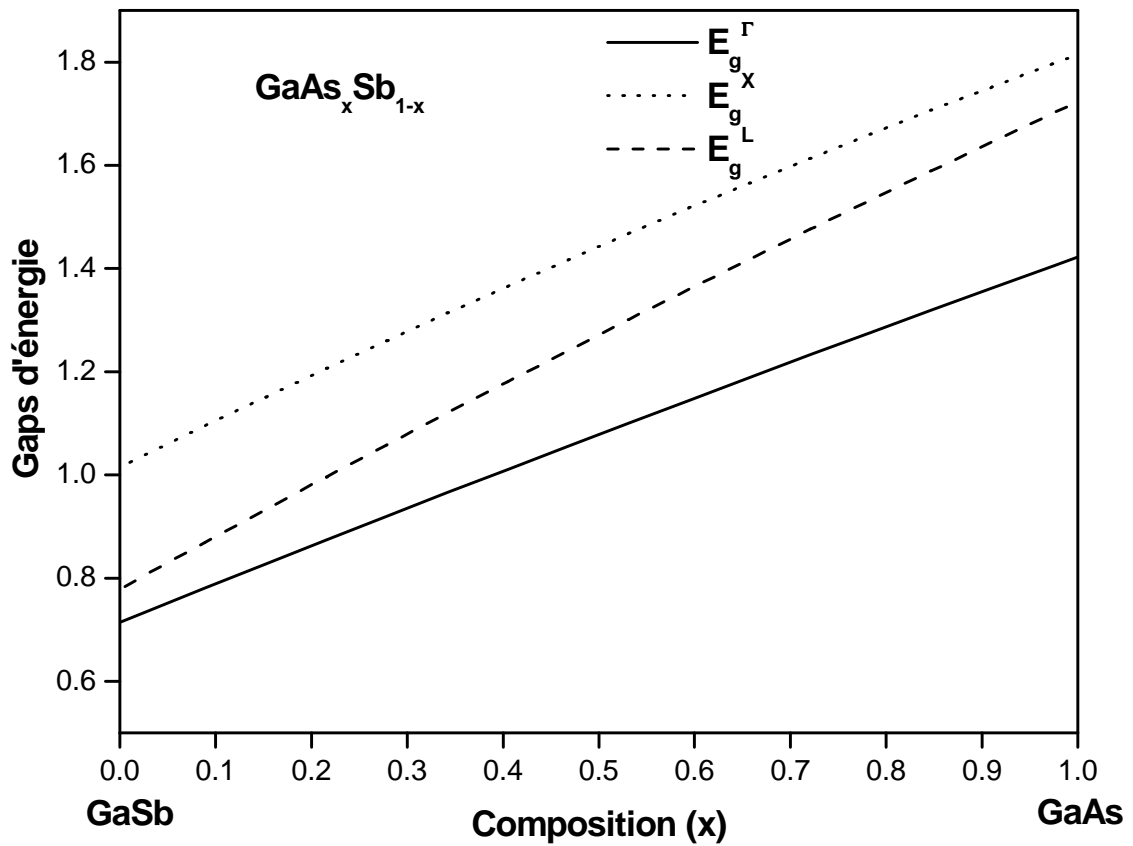


Figure 7a. Gaps d'énergie directs et indirects fonction de la concentration molaire x du As dans l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculés sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

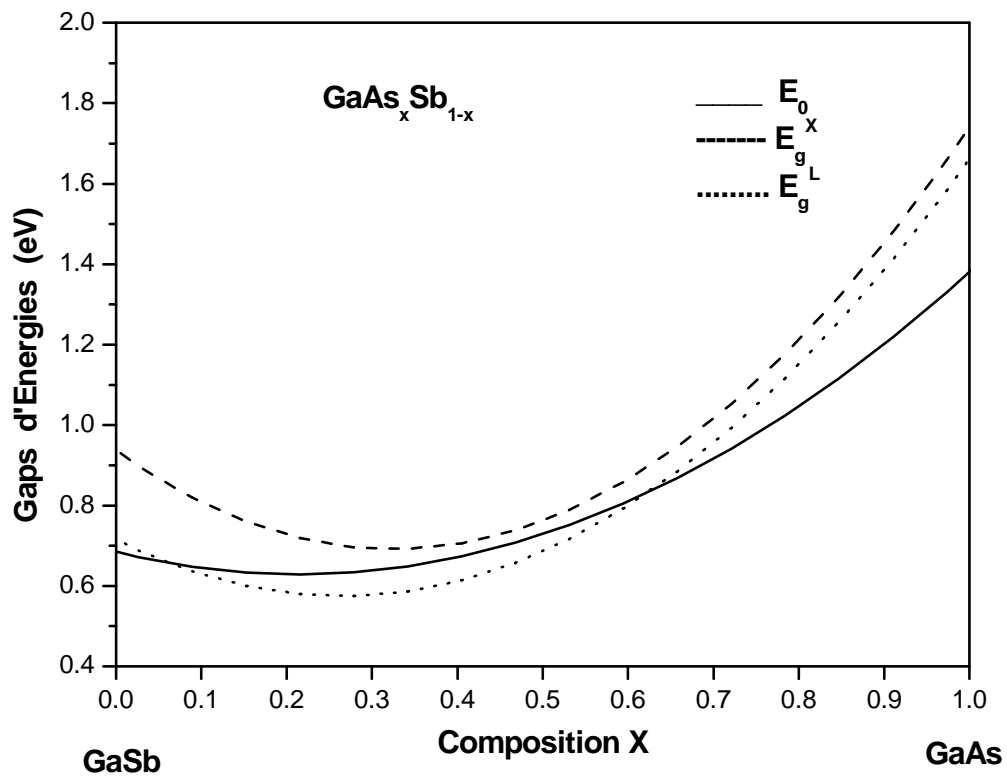


Figure 7b. Gaps d'énergie directs et indirects fonction de la concentration molaire x du As dans l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel

Il a été rapporté dans la littérature que le gap antisymétrique (le gap entre la 1^{ère} et la 2^{ème} bande de valence au point X) est considéré comme une mesure qualitative de l'ionicté du cristal, cette hypothèse a été confirmée par les calculs de N.Bouarissa et ses collaborateurs [12] dans leurs études sur les semiconducteurs de type (IV-IV, II-VI, III-V), il est donc nécessaire de vérifier cette hypothèse sur l'alliage $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$

La figure 8 illustre la variation du gap antisymétrique en fonction de la concentration x en utilisant la VCA et la VCA améliorée où l'effet du désordre est important et par conséquent, il ne peut pas être négligé. La variation de ce gap augmente non linéairement en allant de GaSb vers le GaAs suivant les relations suivantes :

$$E_{ansy} = 2.6 + 1.25 x - 0.04 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-12})$$

$$E_{ansy} = 2.54 - 0.53 x + 1.75 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-13})$$

Les valeurs du gap antisymétrique des composés binaires GaAs et GaSb sont respectivement 3.81eV et 2.60 eV, l'ionicté de l'alliage $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ augmente avec la concentration x.

Une autre caractéristique importante qu'on peut déduire de l'étude de la structure de bande des semiconducteurs III-V est la mesure de la masse effective des électrons et des trous lourds, qui est donnée par l'expression suivante :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi^2}{\eta^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (\text{V-14})$$

Le calcul de cette masse effective est fortement lié à la mobilité des porteurs de charges, qui nous informe sur les propriétés de transport du semiconducteur en question [35].

Elle apparaît comme inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion $E(k)$, autrement dit à la courbure des bandes d'énergie dans l'espace des k .

Connaissant le maximum de la bande de valence, le minimum de la bande de conduction et les énergies $E(k)$ au voisinage de ce minimum (maximum), en ajustant la relation de dispersion $E(k)$ par une loi parabolique, nos résultats de calcul pour la masse effective des électrons et des trous lourds au point Γ en fonction de la concentration x , avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel sont schématisés dans les figures 9 et 10 respectivement.

On remarque que pour les deux courbes la masse effective des électrons et des trous augmente non linéairement en fonction de la concentration x suivant les expressions quadratiques suivantes :

$$\frac{m_e^*(\Gamma)}{m_0} = 0.05 + 0.03x - 0.005x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-15})$$

$$\frac{m_e^*(\Gamma)}{m_0} = 0.05 - 0.03x - 0.05x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-16})$$

$$\frac{m_t^*(\Gamma)}{m_0} = 0.31 + 0.11x - 0.02x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-17})$$

$$\frac{m_t^*(\Gamma)}{m_0} = 0.31 - 0.18x + 0.26x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-18})$$

d'après ces relations, on constate que les trous sont plus affectés par l'effet du désordre compositionnel, résultat clair sur la courbe de variation de la masse des trous en fonction de la composition x , est confirmé par le bowing optique qui est égal à 0.26 dans le cas de la VCAA. Quelques valeurs de la masse effective des

électrons et des trous pour quelques concentrations x de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ sont présentées dans le tableau 4.

Matériau	$\frac{m_t^*}{m_0}(\Gamma)$		$\frac{m_e^*}{m_0}(\Gamma)$	
GaSb	0.32 ^a	0.49 ^c	0.054 ^a 0.039 ^e	0.043 ^c
$\text{GaAs}_{0.10}\text{Sb}_{0.90}$	0.33 ^a	0.28 ^b	0.049 ^a	0.058 ^b
$\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$	0.36 ^a	0.29 ^b	0.070 ^a	0.052 ^b
$\text{GaAs}_{0.90}\text{Sb}_{0.10}$	0.40 ^a	0.35 ^b	0.079 ^a	0.070 ^b
GaAs	0.40 ^a 0.64 ^d	0.62 ^c	0.081 ^a 0.066 ^d	0.067 ^c 0.067 ^e

Tableau 4. calculs de la masse effective des trous et des électrons pour quelques concentrations de l'alliage $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$.

^a nos calculs sans désordre.

^b nos calculs avec désordre.

^c Réf [13].

^d Réf [37].

^e Réf [3].

Une des caractéristiques intéressante que découle de la structure de bande est l'étude de la topologie de la densité de charge électronique et cela par l'utilisation des fonctions d'ondes calculées dans notre cas par la méthode E.P.M. Cette densité de charge électronique peut être obtenue fonction de la position dans le cristal, en élevant au carré la fonction d'onde pour chaque état et en sommant la contribution de tous les états,

$$\rho_n(r) = e \sum_{n,k} |\Psi_{n,k}(r)|^2 \quad (\text{V-19})$$

où e est la charge électronique et $\Psi_{n,k}$ est la fonction d'onde à l'état k dans la $n^{\text{ième}}$ bande. Et comme on ne s'intéresse pas à la densité de charge totale dans la zone de Brillouin, mais seulement à certains points de haute symétrie de cette zone et à des bandes bien spécifiques, donc

$$\rho_n(r) = e |\Psi_{n,k}(r)|^2 \quad (\text{V-20})$$

Les profils, suivant la direction [111] de l'évolution de la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence au point Γ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel pour trois concentrations, $x = 0.02$, $x = 0.3$ et $x = 0.7$ sont représentés dans les figures 11,12 et 13.

Nous constatons que le maximum de la densité de charge est localisé du côté des anions (As, Sb), une très faible densité se trouve du côté du cation (Ga) et il n'y a presque pas de charge dans les régions interstitielles; cette distribution asymétrique autour des centres des liaisons, ainsi que le transfert important de charge du cation vers l'anion indique que l'anion possède un potentiel plus fort que le cation. Il est à noter que le résultat le plus intéressant est que la densité de charge dans le cas de la VCA ou la VCAA donneront des courbes superposées. On conclut donc que l'effet du désordre compositionnel n'influe pas sur la distribution de la densité de charge pour les trois concentrations étudiées.

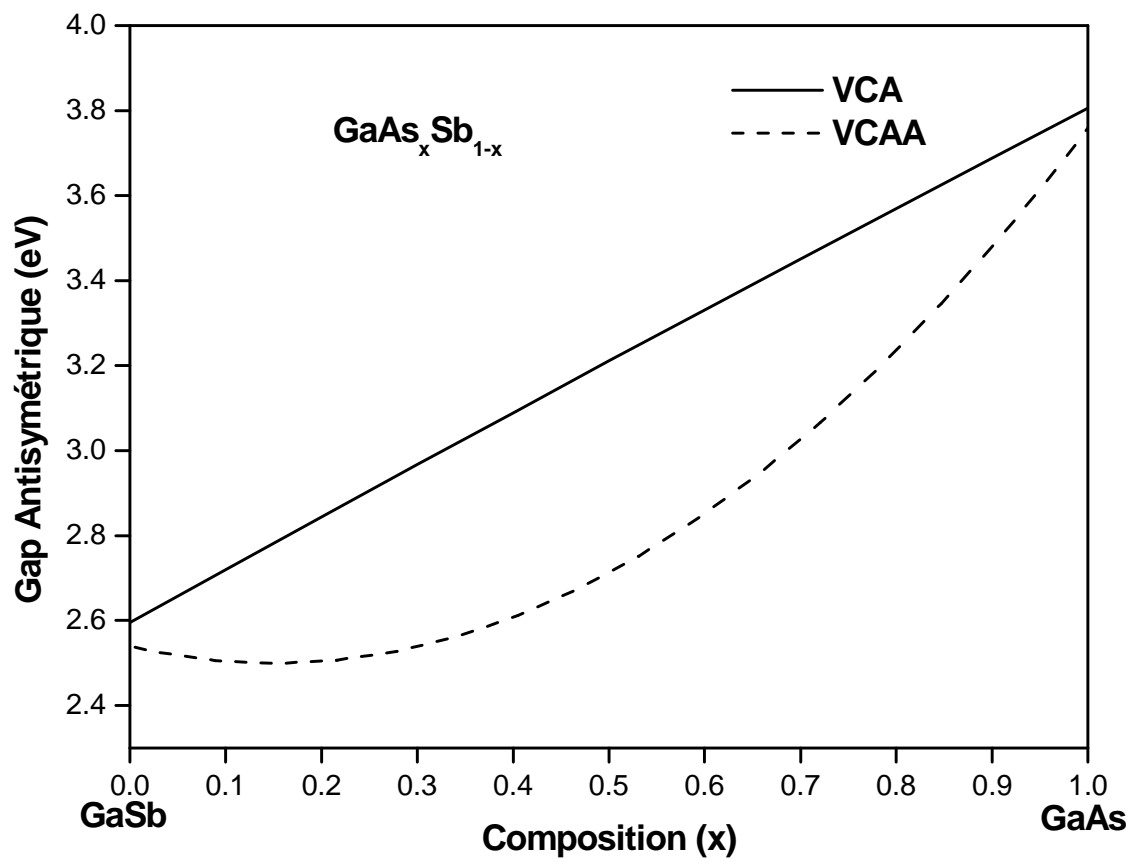


Figure 8. La variation du gap antisymétrique de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ en fonction de la concentration (x) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

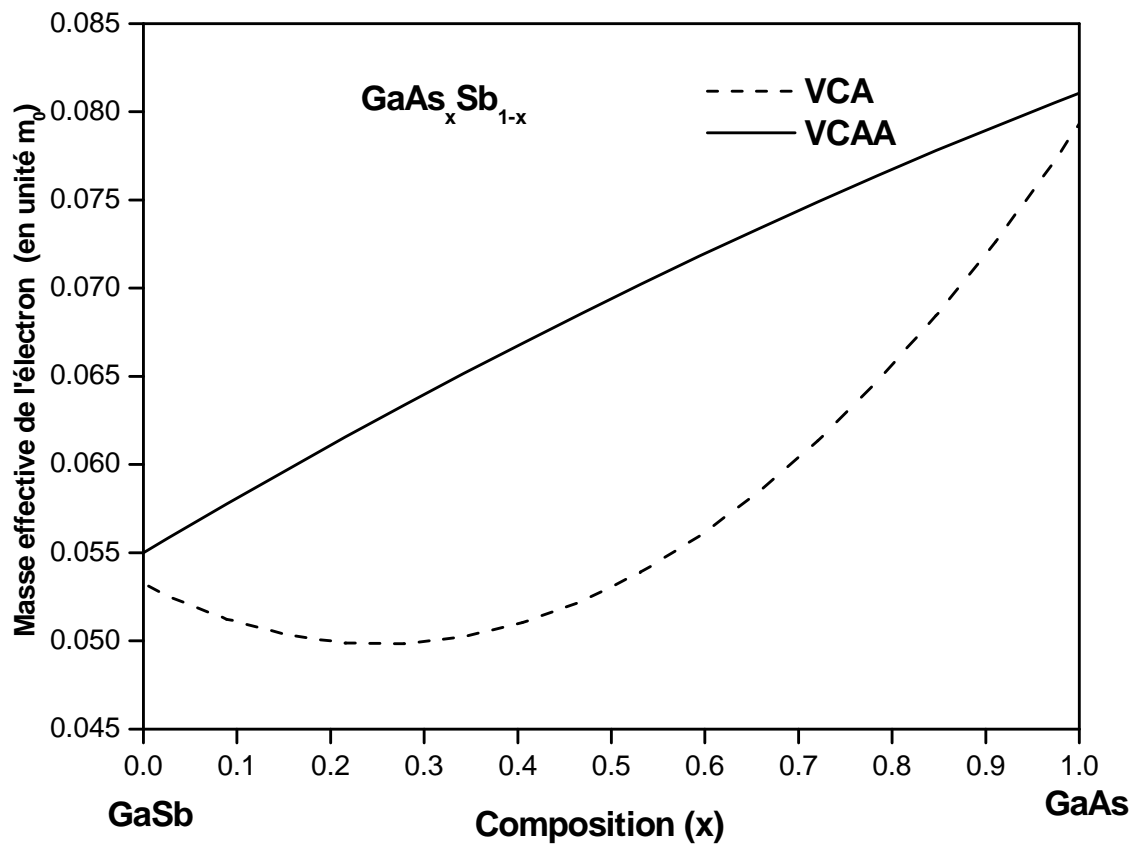


Figure 9. variation de la masse effective de l'électron pour l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ fonction de la composition x avec et sans désordre.

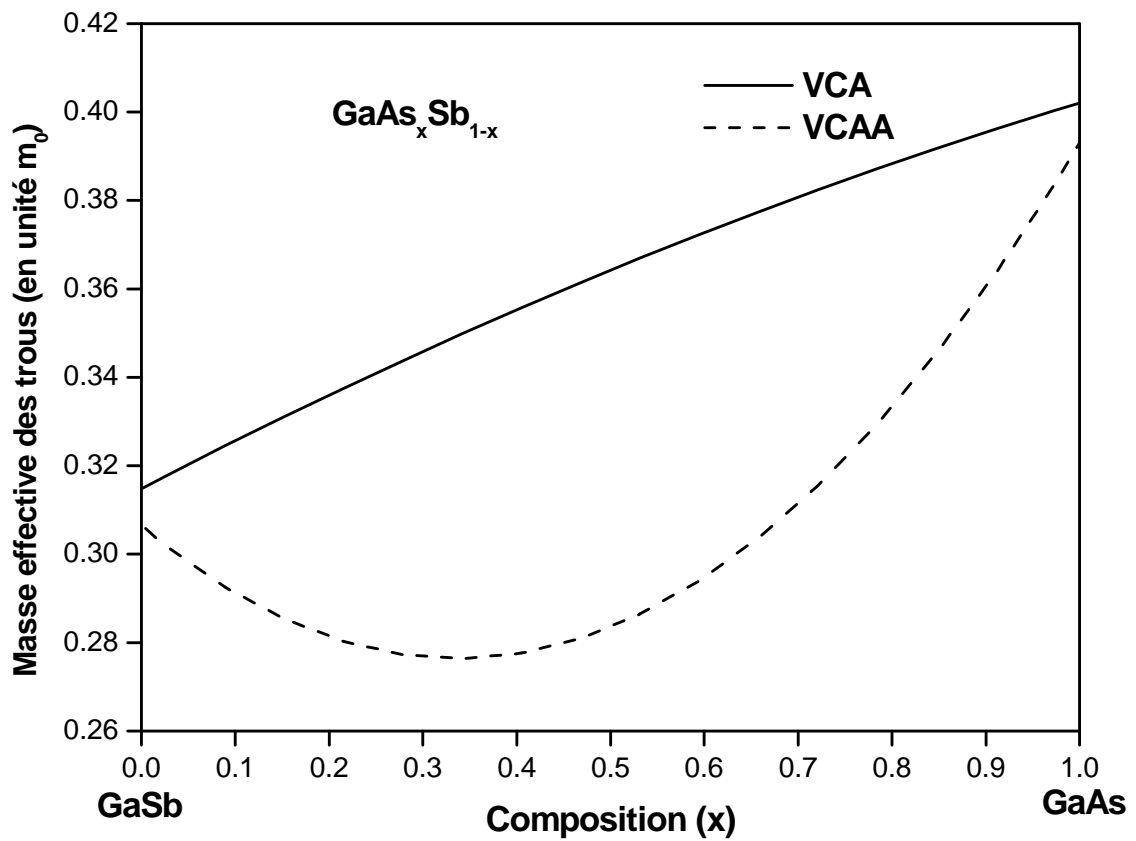


Figure 10. La variation de la masse effective des trous de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.

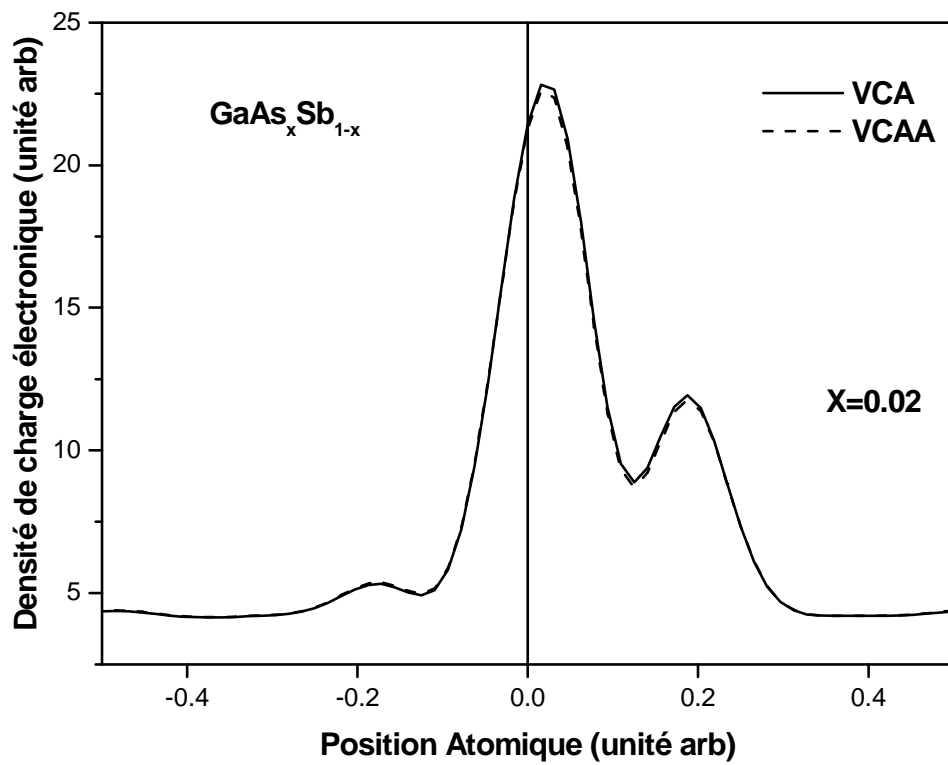


Figure 11. Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence selon la direction $[111]$ de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ pour $x = 0.02$.

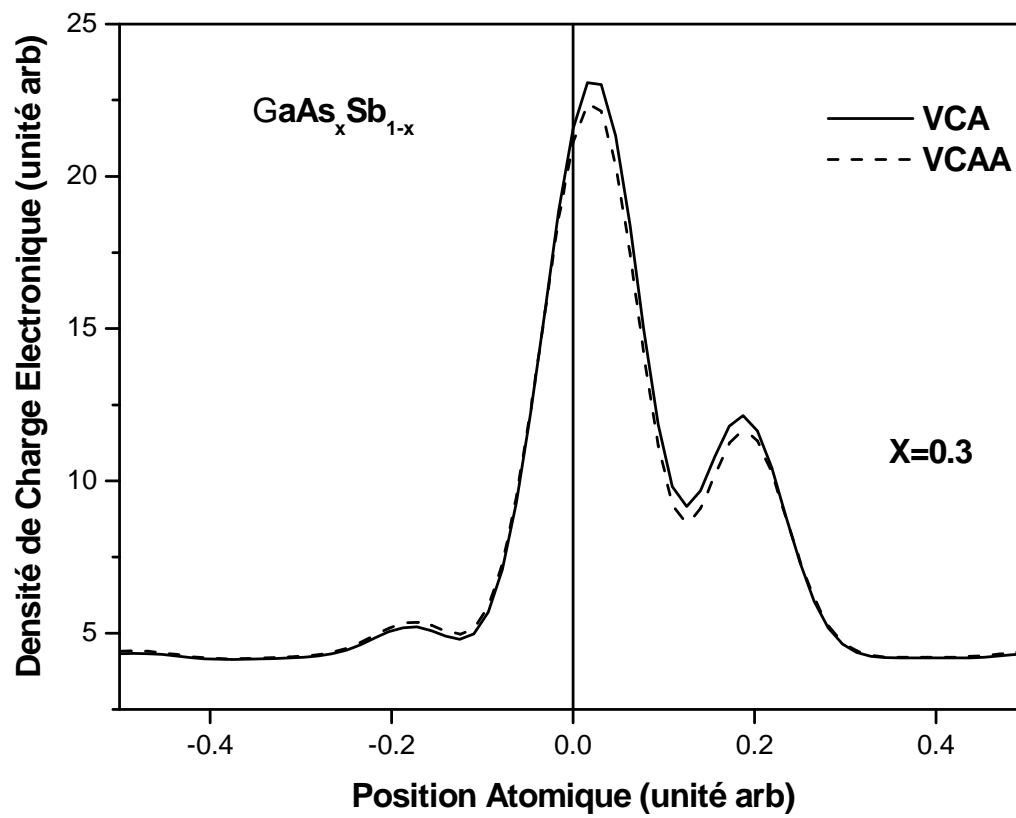


Figure 12. Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence selon la direction $[111]$ de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ pour $x = 0.3$.

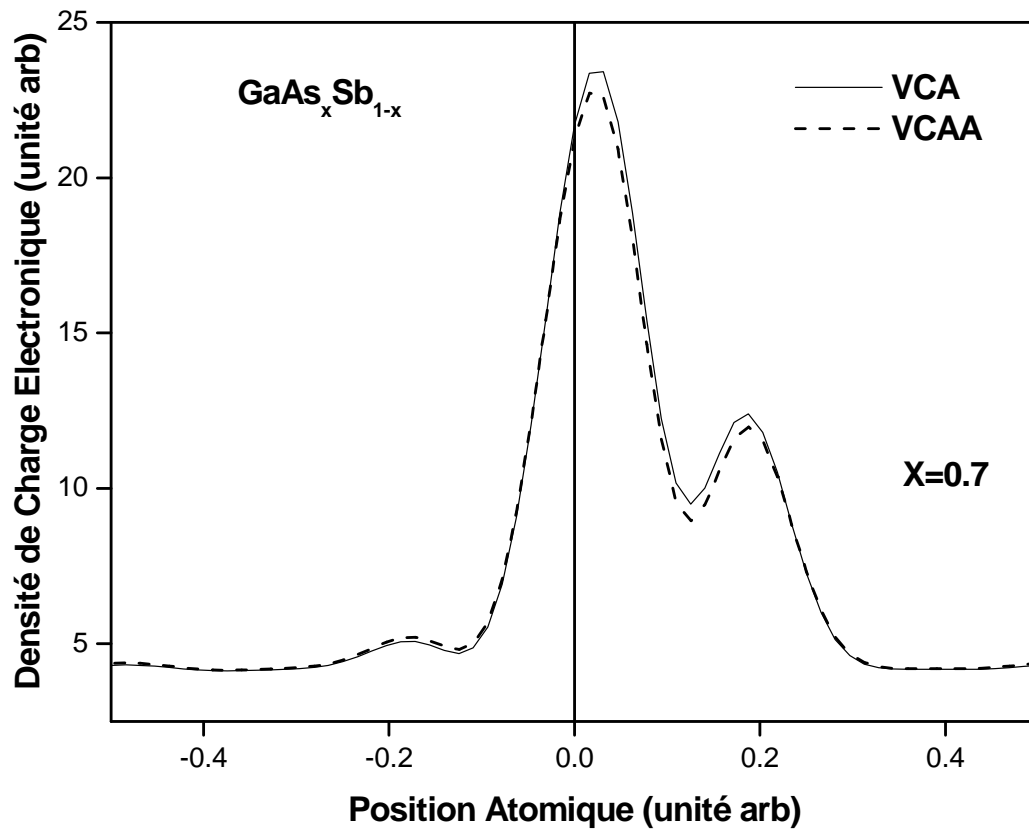


Figure 13. Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence selon la direction $[111]$ de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ pour $x = 0.7$.

V.2. Etude des propriétés optiques et diélectriques :

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 (18,19 et 20) données au chapitre IV. Nos résultats comparés aux données de la littérature [38] sont présentés dans les figures 14a. et 14b. avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel respectivement.

Dans la figure 14b, le comportement de l'indice de réfraction en fonction de la concentration est linéaire, cela est dû au fait d'avoir négliger l'effet du désordre compositionnel, alors que dans le cas de la figure 14a, un comportement non linéaire de l'indice de réfraction peut être observé en allant de GaSb ($x=0$) vers le GaAs ($x=1$) pour les trois modèles est c'est le même comportement observé pour l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [18] .

L'indice de réfraction diminue rapidement au delà de $x=0.6$, cela est dû à l'augmentation du gap énergétique à partir de cette concentration. Comparé aux données de la littérature [38], l'indice de réfraction varie linéairement en fonction de la composition x , cette description est principalement attribuée au fait que nos résultats de calcul de l'indice de réfraction sont obtenus pour chaque valeur de x et en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel, alors que pour les données de la littérature, il s'agit d'une interpolation entre les indices de réfraction des deux composés binaires formant notre alliage ternaire. Remarque que le modèle de Ravindra et al.[9] donnera les bons valeurs d'indice de réfraction par rapport aux autres modèles utilisés, ceci est justifié par les valeurs calculées de l'indice de réfraction des composés binaires GaAs et GaSb qui sont comparables avec l'expérience lorsqu'on utilise l'expression (IV-19), et cela apparaît clairement dans le tableau 5. les lignes (b), (c) et (d) des figures 14a et 14b correspondent au bon fit de nos résultats suivant l'expression.

$$n(x) = a + bx + cx^2 \quad (\text{V-21})$$

Les valeurs résultantes de a, b et c en utilisant les différents modèles avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel, sont portées dans le tableau 5.

Le deuxième paramètre optique que nous avons calculé est le coefficient de réflexion optique en utilisant les trois modèles précédents. Le résultat de calcul de ce coefficient de réflexion est illustré sur les figures 15a. et 15b. avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel respectivement.

Dans la figure 15a, on remarque que le coefficient de réflexion augmente non linéairement en fonction de la concentration et que l'effet du désordre compositionnel est très important ; nos résultats présentent un bon accord avec l'expérience [13], cependant ce même coefficient adopte une variation linéaire (figure 15b.) par suite d'avoir omis l'effet du désordre compositionnel.

Matériau	n		n		n		n (données de la littérature)
	(calculé en utilisant la relation (18))	(calculé en utilisant la relation (19))	(calculé en utilisant la relation (19))	(calculé en utilisant la relation (20))	(calculé en utilisant la relation (20))		
GaSb	3.5 ^b	3.5 ^c	3.64 ^b	3.64 ^c	3.45 ^b	3.45 ^c	3.8 ^a
GaAs _{0.10} Sb _{0.90}	3.74 ^b	3.42 ^c	3.74 ^b	3.59 ^c	3.58 ^b	3.4 ^c	3.75 ^a
GaAs _{0.50} Sb _{0.50}	3.49 ^b	3.16 ^c	3.63 ^b	3.41 ^c	3.44 ^b	3.2 ^c	3.55 ^a
GaAs _{0.90} Sb _{0.10}	3.11 ^b	2.99 ^c	3.37 ^b	3.24 ^c	3.15 ^b	3.03 ^c	3.35 ^a
GaAs	2.95 ^b	2.95 ^c	3.2 ^b	3.2 ^c	2.99 ^b	2.99 ^c	3.3 ^a

Tableau 5. Valeurs de l'indice de réfraction de l'alliage GaAs_xSb_{1-x} pour différentes concentrations avec et sans désordre.

^a Réf [39].

^b Avec désordre.

^c Sans désordre.

Modèle	a	b	c
Moss [8]	3.65 ^a 3.50 ^b	0.27 ^a -0.79 ^b	-1 ^a 0.25 ^b
Ravindra et al. [9]	3.68 ^a 3.64 ^b	0.36 ^a -0.45 ^b	-0.83 ^a 0.02 ^b
Hervé et Vandamme [10]	3.52 ^a 3.45 ^b	0.33 ^a -0.55 ^b	-0.86 ^a 0.09 ^b

Tableau 6. Valeurs des paramètres a, b et c obtenus avec un fit quadratique de l'indice de réfraction du $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ selon l'expression $n(x) = a + bx + cx^2$.

^a Avec désordre.

^b Sans désordre.

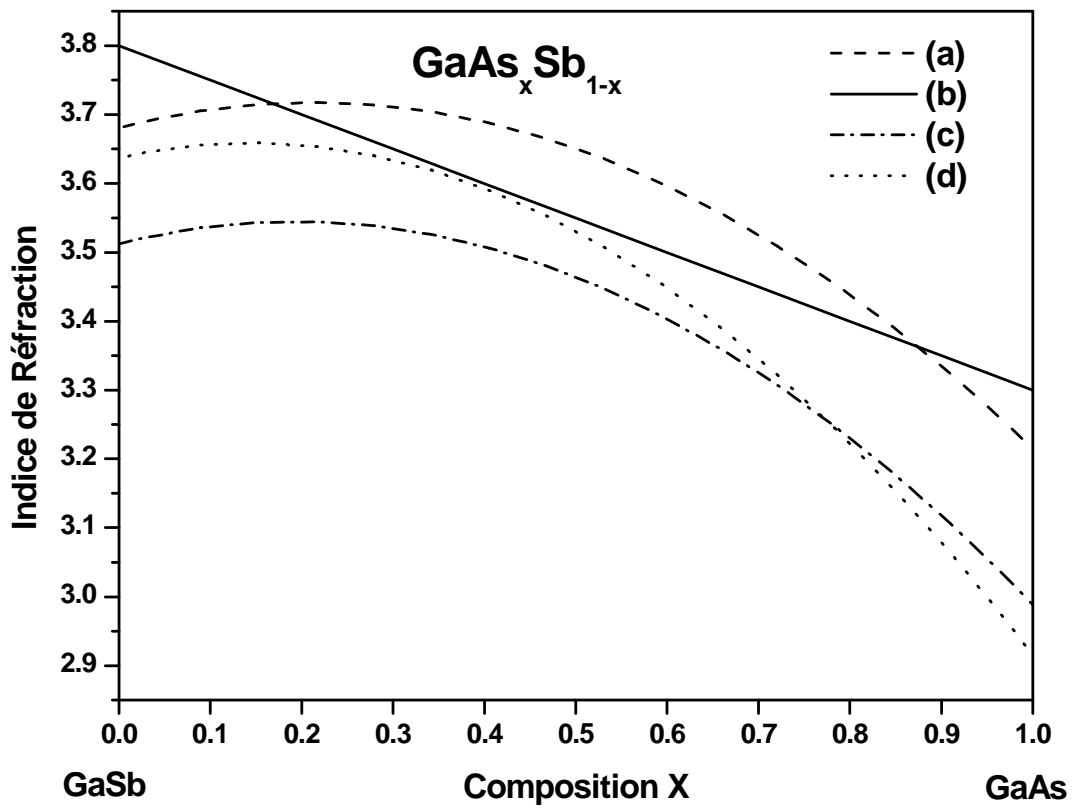


Figure 14a. Variation de l'indice de réfraction fonction de la composition x , de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculée à partir de : a) Ravindra et al ; b) la littérature ; c) Hervé et Vandamme ; d) La relation Moss. En tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.

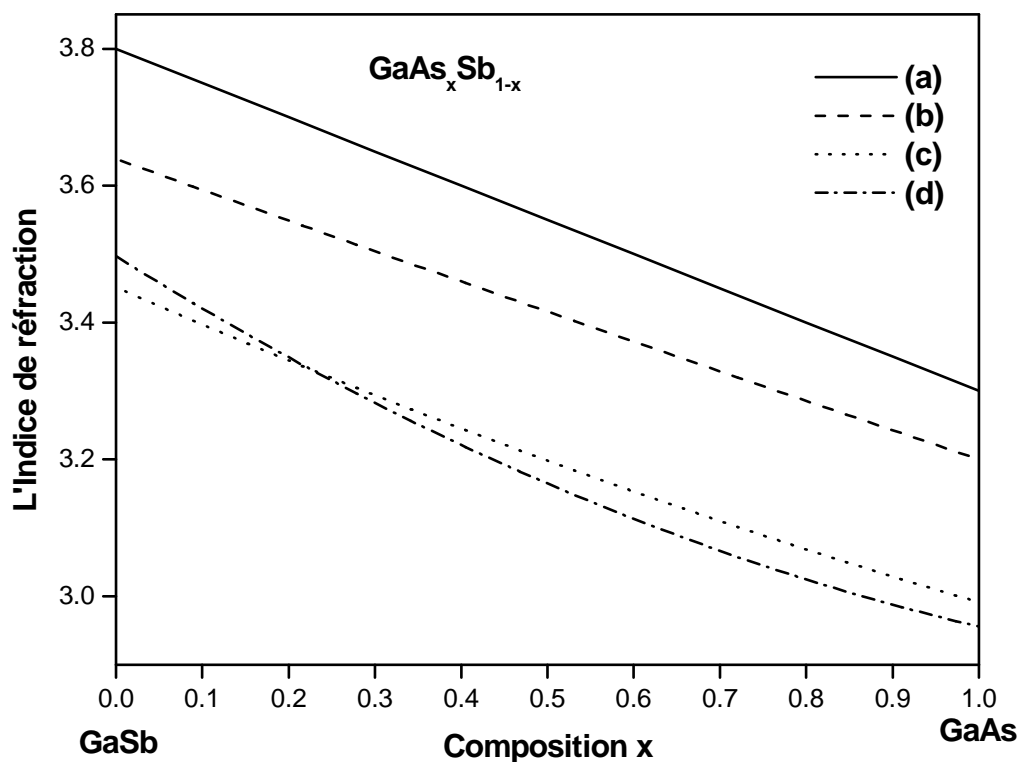


Figure14b. Variation de l'indice de réfraction fonction de la composition x, de l'alliage ternaire GaAs_xSb_{1-x} calculée à partir de :a) Ravindra et al ; b) la littérature Réf [38] ; c) Hervé et Vandamme ; d) La relation Moss. Sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

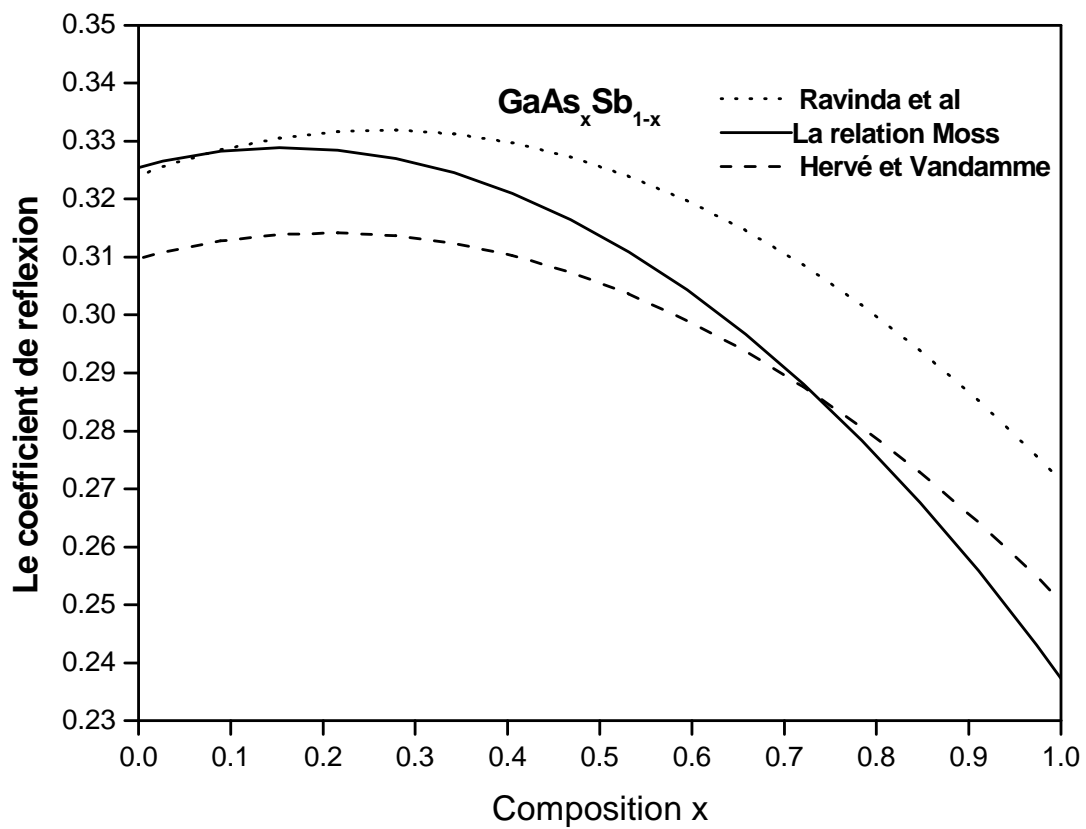


Figure 15a. Variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ en tenant compte de l'effet du désordre.

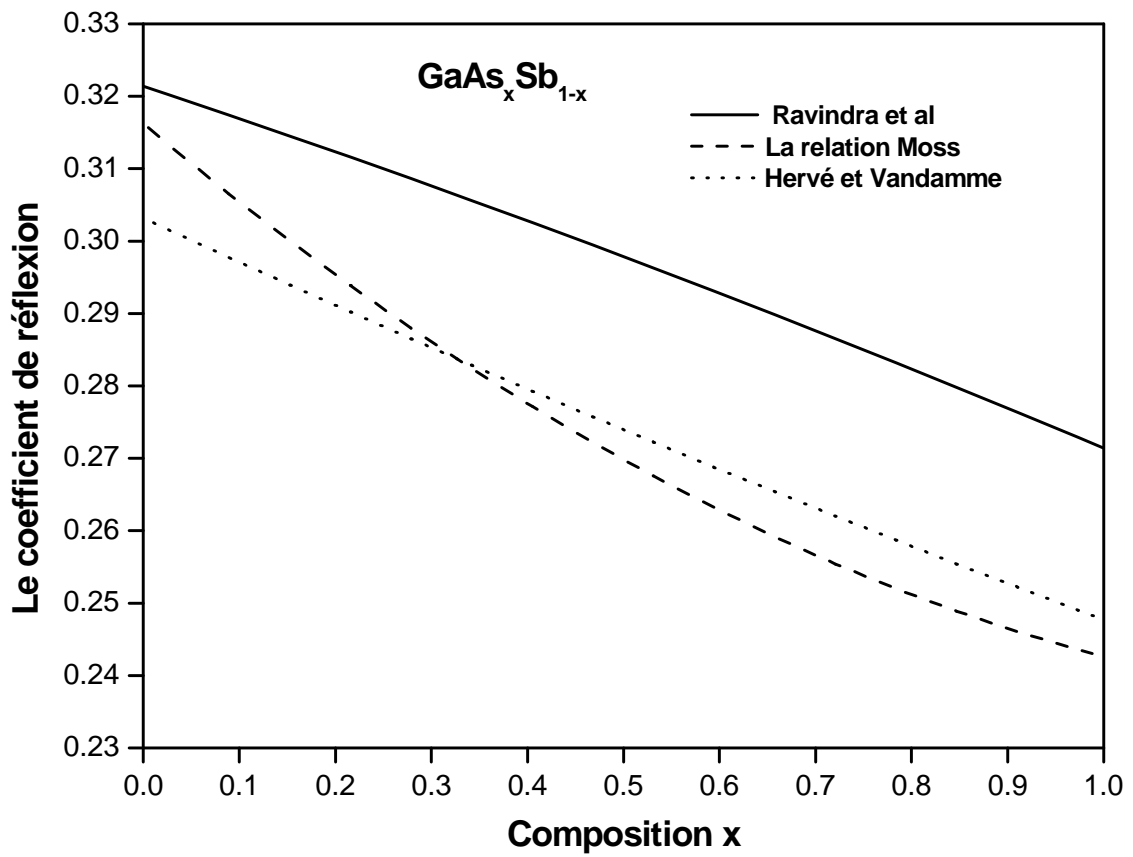


Figure 15b. Variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration de l'alliage $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ sans tenir compte de l'effet du désordre.

En utilisant l'expression analytique [11] basée sur le modèle de transition interbande, l'indice de réfraction de notre alliage a été calculé pour différentes valeurs de la concentration x en fonction de l'énergie photonique, $x=0.02$, $x=0.3$ et $x=0.7$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel ; nos résultats obtenus sont présentés dans les figures (16, 17, 18) respectivement. Les courbes sont tracées avec le meilleur fit quadratique ; la variation de l'indice de réfraction est non linéaire donnant ainsi différentes valeurs des paramètres de courbures de l'indice de réfraction pour différentes valeurs de la concentration x , c'est la raison pour laquelle l'effet du désordre compositionnel est considérable, cependant il faut noter que cet indice de réfraction diminue avec l'augmentation de l'énergie photonique en allant de 1.2eV vers 3.2eV pour les trois modèles utilisés dans nos calculs.

Notant que la variation de la fraction molaire de l'arsenic n'a pas d'influence sur le comportement de l'indice de réfraction. Comparé à l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [18] où la variation de la concentration de Al affecte fortement le comportement de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie photonique.

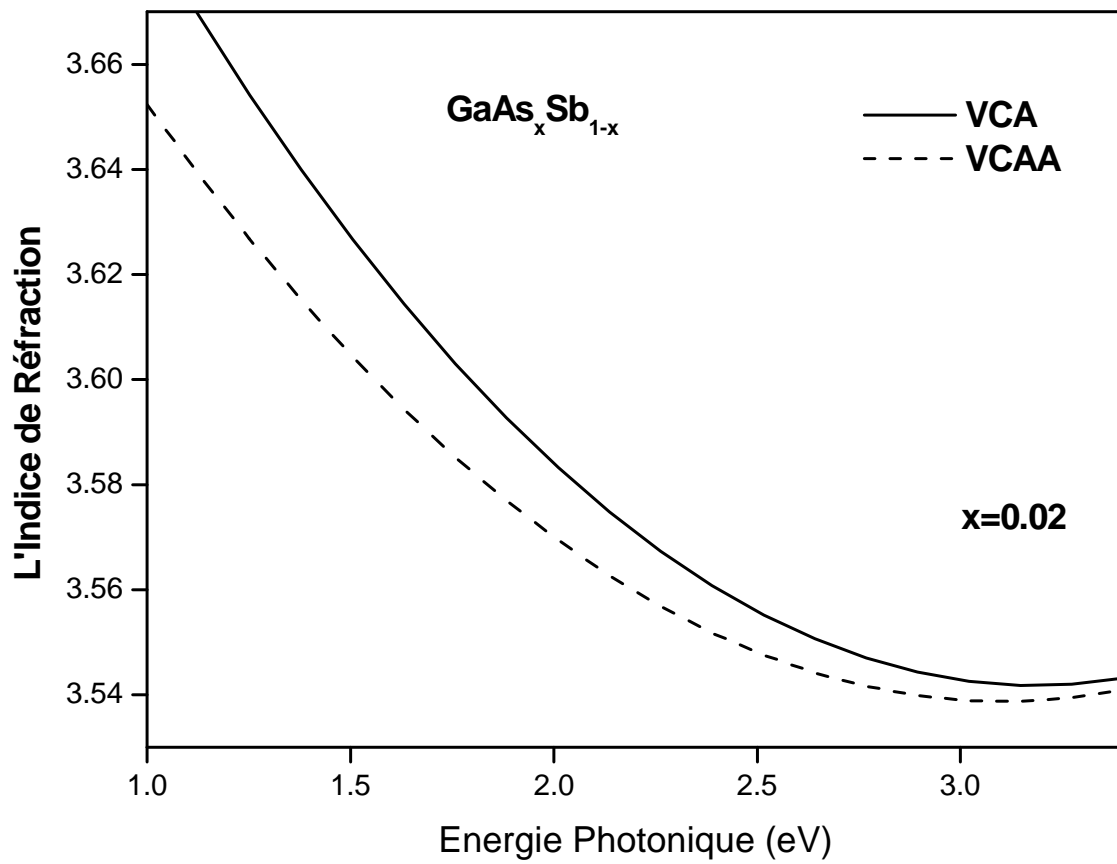


Figure 16. Variation de l'indice de réfraction fonction de l'énergie photonique de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre. Pour $x=0.02$.

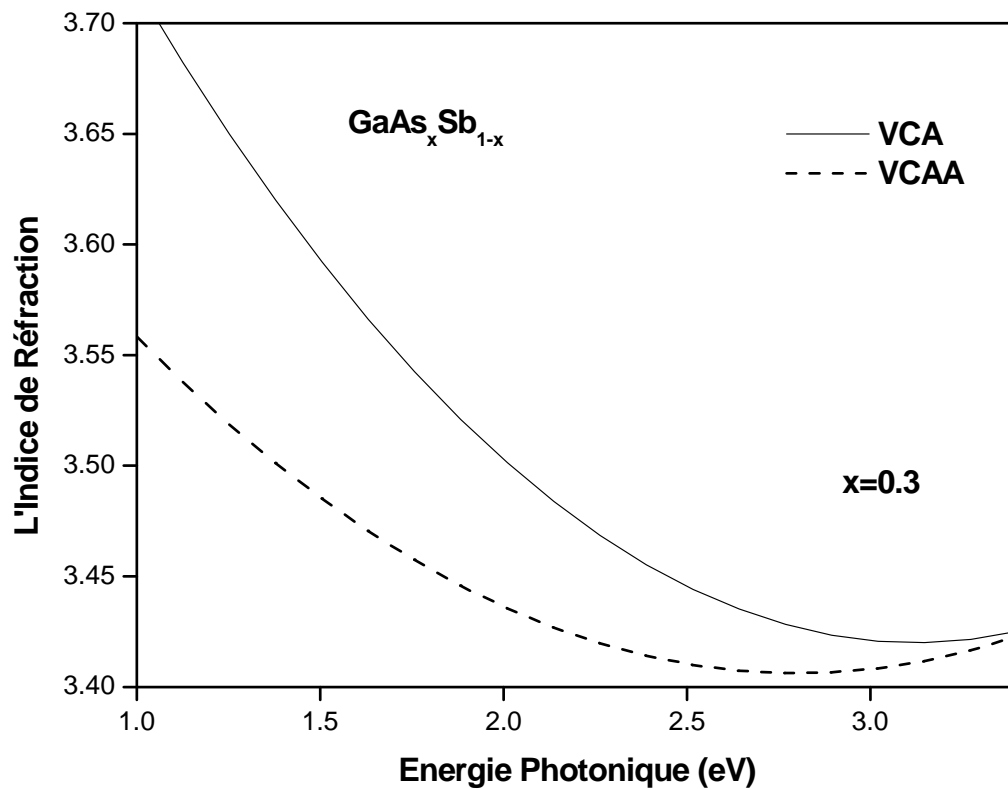


Figure 17. Variation de l'indice de réfraction fonction de l'énergie photonique de l'alliage ternaire GaAs_xSb_{1-x} avec et sans tenir compte de l'effet du désordre pour x=0.3.

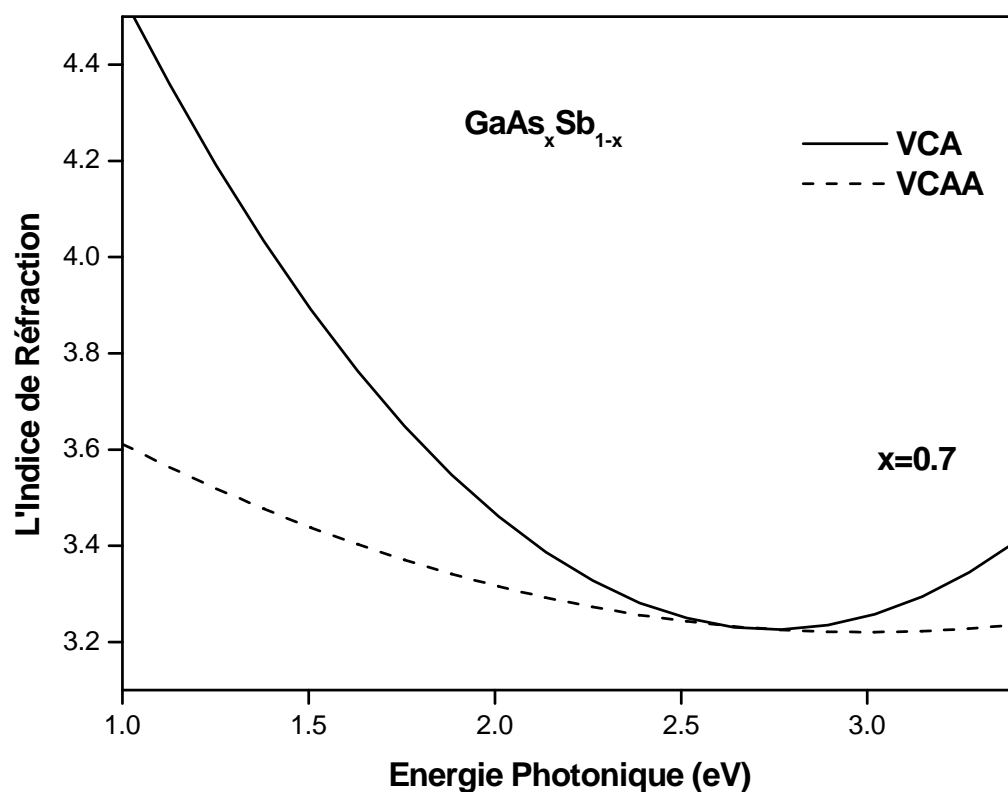


Figure 18. Variation de l'indice de réfraction fonction de l'énergie photonique de l'alliage ternaire GaAs_xSb_{1-x} avec et sans tenir compte de l'effet du désordre pour x=0.7.

La dépendance en concentration de la constante diélectrique statique (ϵ_0) est obtenue suivant l'expression (28) du chapitre IV, en utilisant différents modèles de calcul de la constante diélectrique en haute fréquence (ϵ_∞) qui est directement déduite de la relation $\epsilon_\infty = n^2$ [30]. Nos résultats sont illustrés dans les figures 19a. et 19b. avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel et pour faire une comparaison, des valeurs de la littérature [38] sont aussi tracées sur la même courbe. Dans la figure 19a, on peut noter que (ϵ_0) décroît avec l'augmentation de la concentration x , en allant du GaSb vers le GaAs montrant un comportement fortement non linéaire pour les trois modèles utilisés, contrairement au comportement linéaire que présentent les données de la littérature [38] où il s'agit d'une interpolation entre les valeurs de la constante diélectrique statique des deux composés binaires GaSb et GaAs, nos résultats sont par contre présentés par une variation non linéaire du fait qu'on tient compte de l'effet du désordre compositionnel. Le modèle de Ravindra et al.[9] mène aux valeurs de (ϵ_0) qui sont proches de l'expérience par rapport aux autres modèles utilisés. Ceci est clairement constaté dans le tableau 7. Pour les composés binaires GaSb et le GaAs les lignes (b), (c) et (d) dans la figure 19a sont les meilleurs fits quadratiques utilisés, leurs expressions analytiques sont comme suit [40] :

$$\epsilon_0(x) = 14.7 + 2.52x - 5.92x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-19})$$

$$\epsilon_0(x) = 13.41 + 2.17x - 5.84x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-20})$$

$$\epsilon_0(x) = 14.4 + 1.77x - 6.97x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-21})$$

Les expressions (19, 20, 21) correspondent au modèles de Ravindra et al. Hervé et Vandamme et Moss respectivement, dans le cas où en tient compte du l'effet du désordre. Dans le cas de la VCA ces expressions deviennent :

$$\epsilon_0(x) = 14.35 - 3.3x + 0.22x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-22})$$

$$\epsilon_0(x) = 12.90 - 3.95x + 0.83x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-23})$$

$$\epsilon_0(x) = 13.24 - 5.66x + 1.97x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-24})$$

Matériau	ϵ_0 calculée suivant la relation (18) pour n	ϵ_0 calculée suivant la relation (19) pour n	ϵ_0 calculée suivant la relation (20) pour n	ϵ_0 (données de la littérature)
GaSb	13.28 ^b 13.28 ^c	14.34 ^b 14.34 ^c	12.89 ^b 12.89 ^c	15.7 ^a
GaAs _{0.10} Sb _{0.90}	15.17 ^b 12.7 ^c	15.17 ^b 13.98 ^c	13.91 ^b 12.54 ^c	15.42 ^d
GaAs _{0.50} Sb _{0.50}	13.20 ^b 10.88 ^c	14.33 ^b 12.68 ^c	12.85 ^b 11.15 ^c	14.3 ^d
GaAs _{0.90} Sb _{0.10}	10.57 ^b 9.76 ^c	12.40 ^b 11.48 ^c	10.83 ^b 10.02 ^c	13.18 ^d
GaAs	9.53 ^b 9.53 ^c	11.23 ^b 11.23 ^c	9.79 ^b 9.79 ^c	12.9 ^a

Tableau 7. Constante diélectrique statique pour différentes concentrations de l'alliage ternaire semiconducteur GaAs_xSb_{1-x}

^a Réf [38].

^b avec désordre.

^c sans désordre.

^d données de la littérature pour $0 < x < 1$ estimées à partir de l'expression linéaire proposé en Réf [38]

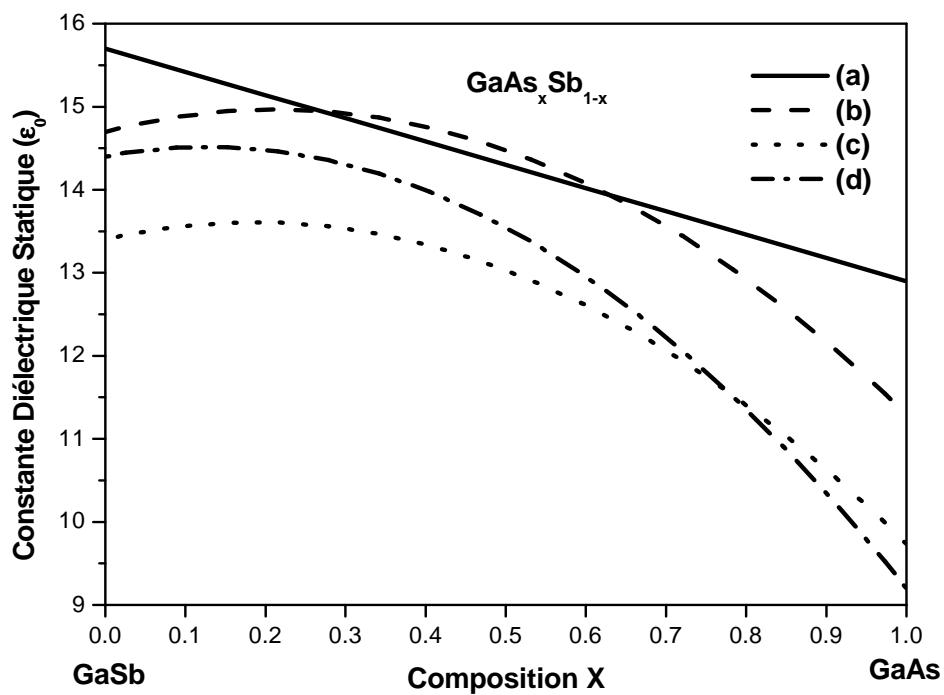


Figure 19a. variation de la constante diélectrique statique fonction de la composition en tenant compte de l'effet du désordre pour l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$. a) données de la littérature Réf [38] ; b) la relation de Ravindra ; c) Hervé et Vandamme ; d) la relation Moss

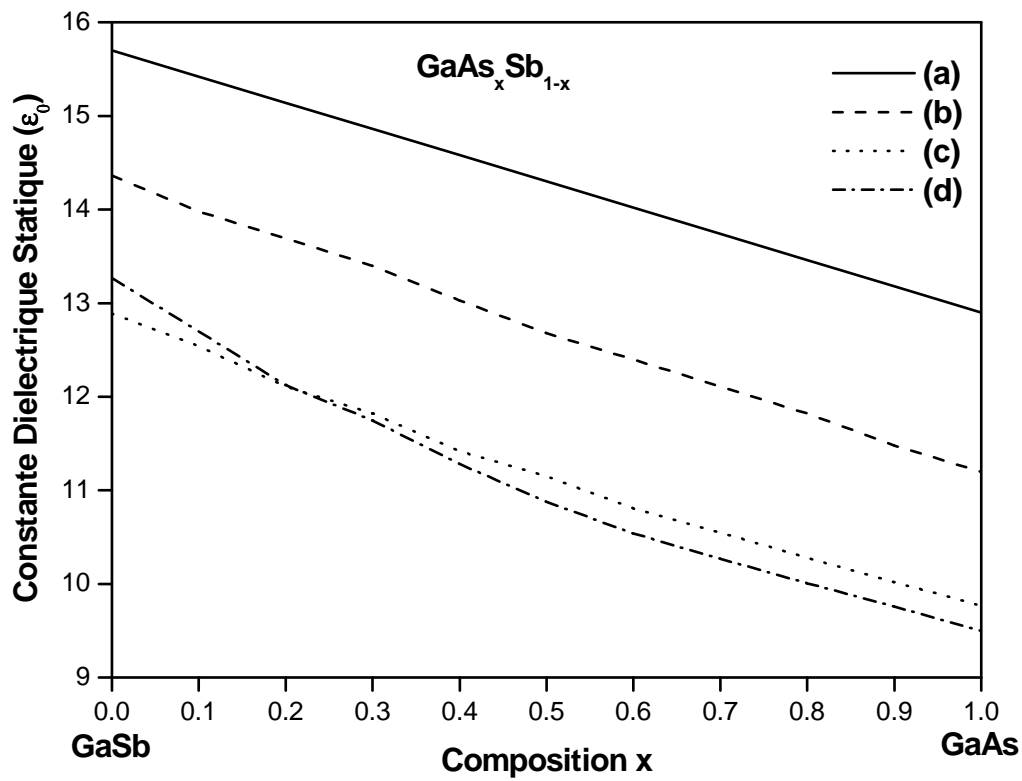


Figure 19b. variation de la constante diélectrique statique fonction de la composition sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel pour l'alliage ternaire $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$. a) données de la littérature Réf [38] ; b) la relation de Ravindra ; c) Hervé et Vandamme ; d) la relation Moss

Conclusion

En conclusion la dépendance en composition des propriétés électroniques à savoir, le gap d'énergie, la masse effective des trous et des électrons, le gap antisymétrique, la densité de charge électronique et les propriétés optiques et diélectriques tels que l'indice de réfraction, le coefficient de réflexion, les constantes diélectriques statiques et dynamiques de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ ont été étudiés. Nos calculs sont basés sur l'utilisation de la méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M) combiné avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Cette méthode utilisée est couplée avec le modèle de Harrison des orbites de liaison (Bond orbital Model) pour le calcul de la constante diélectrique statique. L'accord entre nos résultats et les valeurs expérimentales est trouvé généralement satisfaisant. Le matériau étudié est trouvé être un semiconducteur à gap direct pour l'intervalle de x compris entre $0 \leq x < 0.048$ et $0.59 < x \leq 1$ et à gap indirect pour $0.048 < x < 0.59$. Différent du comportement linéaire de l'indice de réfraction fonction de la concentration x suggéré par la littérature, nos résultats montrent que pour tous les modèles utilisés, l'indice de réfraction varie non linéairement en fonction de la composition x , avec une grande valeur du paramètre de courbure, cela est dû à l'effet du désordre compositionnel dans l'alliage. Cependant il faut noter que les résultats prouvés par le modèle de Ravindra et al. donnent les meilleures valeurs qui sont en bon accord avec l'expérience et cela en comparaison avec les autres modèles. Le comportement de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie photonique apparaît indépendant de la variation de la fraction molaire de l'Arsenic. La variation de la constante diélectrique en fonction de la concentration x est montrée comme non linéaire et cela est dû à l'influence du désordre compositionnel de l'alliage, le modèle de Ravindra et al.

utilisé pour le calcul de l'indice de réfraction a donné des valeurs de la constante diélectrique statique qui sont en bon accord avec l'expérience.

Références

- [1]. N. Bouarissa, R. Bachiri, Phys B. 322 (2002) 193.
- [2]. J. Boucher, J. Simonne, Principe et Fonction de l'électronique Intégrée, Ed Cepadues, (1977), 129.
- [3]. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohon, J. Appl. Phys. 89 (2001)
- [4]. N. Bouarissa, Mater. Sci. Eng. B 86 (2001) 53.
- [5]. R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.V.R. Rao, Infrared Phys, Vol.34, No.1, (1993) 103.
- [6]. K. Kassali, Thèse de magister, Univ. de Sétif, Algeria (1996), and references cited therein.
- [7]. F. Abelés, Optical Properties of Solids, North-Holland, Publishing Company (1972) 3, 24, 25, 26.
- [8]. V. P. Gupta, N. M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [9]. N. M. Ravindra, S. Auluck, V. K. Srivastava, Phys. Stat. Sol. (b) 93 (1979) K 155.
- [10]. P. J. L Hervé, L. K. J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [11]. S. Adachi, J, Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [12]. S. Bounab, Thèse de magister, Univ. de Constantine, Algeria, (2002).
- [13]. H. Mathieu, Physique des Semiconducteurs et des Composants électronique, 4 Ed. Masson (1998) 21, 23, 24, 25, 33, 419, 420.
- [14]. L. Bouchlaleg, Thèse de magister, Univ. de Batna, Algeria (2000).
- [15]. M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences (1989)

16, 17, 19, 20, 23.

[16]. James. R, Chrlukowsky, Marvin, L. Cohen, Phys B, Vol. 14, No. 2, 557.

[17]. C. Kittel, Physique de l'état solide, Ed. Dunod Université (1983) 287, 325.

[18]. N. Bouarissa, Matter. Chem. Phys. 72 (2001) 387.

[19]. L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.

[20]. K. Kassali, N. Bouarissa, Solid State Electronics 44 (2000) 501.

[21]. N. Bouarissa, Superlattices and Microstructure, Vol. 26, No. 4, (1999). 280.

[22]. S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter 2 (1990) 3253.

[23]. N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.

[24]. N. Bouarissa, K. Kassali, Phys State. Sol. (b) 228, No. 3, (2001) 665.

[25]. B. Chalmers, Structure et Propriétés des Solides, Ed Masson, Paris, New York, (1987) 65.

[26]. Y. Farge, M. Fontana, Perturbations électroniques et vibrationnelles localisées dans les solides ioniques. Ed Masson & C^{le} Editeurs, paris, (1974) 24, 25.

[27]. R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.V.R. Rao, Infrared Phys, Vol.34, No.1, (1993) 95 .

[28]. S. Yu. Davydov, S. K. Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947 and references cited therein.

[29]. P. Vogl, J. Phys. C 11 (1978) 251.

[30]. G. A. Samara, Phys. Rev. B 27 (1983) 3494.

- [31]. T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci., Tohoku. Univ. 2 (1993) 7.
- [32]. S. Zolner, M. Garriga, J. Hmlíček, S. Gopalan, M. Cardona, phys. Rev. B 43 (1991) 4349.
- [33]. C. Alibert, A. Jaullie, A.M. Joullie, C. Ance, Phys. Rev. B 27 (1983) 4946.
- [34]. D. E. Aspnes, C. G. Olson, D.W. Lynch, Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 766.
- [35]. O. Madelung (ed), Semiconductors-Basic Data, Springer, Berlin, 1996.
- [36]. A. Bhourri, F. Benzid, H. Merdji, A. Ben Fredj, N. Bouarissa and M. Said, J. Phys. Condens. Matter, 14 (2002) 7020.
- [37]. J.-L. Teyssier, H. Brunet, Introduction à la Physique des Matériaux Conducteurs et Semiconducteurs Avec Exercices Résolus, Ed Dunod Université, Paris, (1992) 174.
- [38]. M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), Hand book Series on Semiconductor Parameters, Vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.
- [39]. M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shue (Eds.) Handbook Series on Semiconductor Parameters, Vol.1, World Scientific, Singapore, 1996.
- [40]. F. Mezrag, N. Y. Aouina and N. Bouarissa ,Optical Materials Journal (2003) Submitted.

X	n(vca)	n(vcaa)	R (vca)	R(vcaa)	ϵ_{∞} (vca)	ϵ_{∞} (vcaa)	ϵ_0 (vca)	ϵ_0 (vcaa)
0	3.64	3.64	0.32	0.32	13.25	13.25	14.36	14.36
0.1	3.59	3.74	0.32	0.33	12.88	13.99	13.98	15.16
0.2	3.55	3.75	0.31	0.34	12.60	14.06	13.69	15.22
0.3	3.51	3.73	0.31	0.33	12.32	13.91	13.40	15.08
0.4	3.46	3.69	0.30	0.33	11.97	13.62	13.03	14.78
0.5	3.41	3.63	0.30	0.32	11.63	13.18	12.68	14.31
0.6	3.37	3.57	0.29	0.32	11.36	12.74	12.40	13.86
0.7	3.33	3.52	0.29	0.31	11.09	12.39	12.11	13.49
0.8	3.29	3.45	0.28	0.30	10.82	11.90	11.82	12.98
0.9	3.24	3.37	0.28	0.29	10.50	11.36	11.48	12.39
1	3.2	3.2	0.27	0.27	10.24	10.24	11.20	11.20

Tableau 1. Données optiques calculées par Ravindra et al.

X	n(vca)	n(vcaa)	R (vca)	R(vcaa)	ϵ_{∞} (vca)	ϵ_{∞} (vcaa)	ϵ_0 (vca)	ϵ_0 (vcaa)
0	3.5	3.5	0.31	0.31	12.25	12.25	13.27	13.27
0.1	3.42	3.77	0.32	0.34	11.70	14.21	12.70	15.39
0.2	3.34	3.75	0.29	0.34	11.16	14.06	12.12	15.22
0.3	3.29	3.7	0.28	0.33	10.82	13.69	11.75	14.84
0.4	3.22	3.6	0.28	0.32	10.37	12.96	11.28	14.06
0.5	3.16	3.49	0.27	0.31	9.99	12.18	10.88	13.22
0.6	3.11	3.38	0.26	0.30	3.67	11.42	10.54	12.41
0.7	3.07	3.29	0.26	0.28	9.42	10.82	10.27	11.77
0.8	3.03	3.21	0.25	0.28	9.18	10.30	10.01	11.22
0.9	2.99	3.11	0.25	0.26	8.94	9.67	9.76	10.53
1	2.95	2.95	0.24	0.24	8.7	8.70	9.5	9.5

Tableau 2. Données optiques calculées par la relation moss

X	n(vca)	n(vcaa)	R (vca)	R(vcaa)	ε_{∞} (vca)	ε_{∞} (vcaa)	ε_0 (vca)	ε_0 (vcaa)
0	3.45	3.45	0.30	0.30	11.90	11.90	12.89	12.89
0.1	3.4	3.6	0.30	0.32	11.56	12.96	12.54	14.02
0.2	3.34	3.59	0.29	0.32	11.16	12.89	12.11	13.95
0.3	3.3	3.56	0.29	0.32	10.89	12.67	11.82	13.73
0.4	3.24	3.51	0.28	0.31	10.50	12.32	11.42	13.36
0.5	3.2	3.45	0.27	0.30	10.24	11.90	11.15	12.91
0.6	3.15	3.37	0.27	0.29	9.92	11.36	10.81	12.34
0.7	3.11	3.31	0.26	0.29	9.67	10.96	10.55	11.93
0.8	3.07	3.23	0.26	0.28	9.42	10.43	10.28	11.36
0.9	3.03	3.15	0.25	0.27	9.18	9.92	10.02	10.81
1	2.99	2.99	0.25	0.25	8.94	8.94	9.77	9.77

Tableau 3. Données optiques calculées par Hervé et Vandamme.

X	n(vca)	n(vcaa)	R (vca)	R(vcaa)	ϵ_{∞} (vca)	ϵ_{∞} (vcaa)	ϵ_0 (vca)	ϵ_0 (vcaa)
0	3.59	3.59	0.32	0.32	12.89	12.89	13.97	13.97
0.1	3.55	3.52	0.31	0.31	12.60	12.39	13.68	13.40
0.2	3.53	3.48	0.31	0.31	12.46	12.11	13.54	13.10
0.3	3.5	3.43	0.31	0.30	12.25	11.76	13.32	12.74
0.4	3.48	3.39	0.31	0.30	12.11	11.49	13.19	12.46
0.5	3.46	3.35	0.30	0.29	11.97	11.22	13.06	12.17
0.6	3.45	3.32	0.30	0.29	11.83	11.02	12.91	11.97
0.7	3.44	3.3	0.30	0.29	11.83	10.89	12.92	11.85
0.8	3.43	3.29	0.30	0.28	11.76	10.82	12.86	11.79
0.9	3.43	3.31	0.30	0.29	11.76	10.96	12.87	11.96
1	3.43	3.43	0.30	0.30	11.76	11.76	12.88	12.88

Tableau 4. Données optiques du modèle d' Adachi.

X	$\frac{m_e^*(\Gamma)}{m_0}_{(VCA)}$	$\frac{m_e^*(\Gamma)}{m_0}_{(VCAA)}$
0	0.05498	0.05498
0.1	0.0581	0.0488
0.2	0.06112	0.04883
0.3	0.06403	0.05
0.4	0.06682	0.05185
0.5	0.06908	0.05421
0.6	0.07205	0.05705
0.7	0.07449	0.06043
0.8	0.07679	0.06448
0.9	0.07896	0.06977
1	0.08101	0.08101

Tableau 5. Masse effective de l' électron au point Γ en fonction de la concentration x dans le cas de la VCA et la VCAA.

X	$\frac{m_t^*(\Gamma)}{m_0}_{(VCA)}$	$\frac{m_t^*(\Gamma)}{m_0}_{(VCAA)}$
0	0.31526	0.31526
0.1	0.32556	0.28026
0.2	0.33543	0.27539
0.3	0.34574	0.27727
0.4	0.35507	0.28184
0.5	0.36474	0.2893
0.6	0.37327	0.29895
0.7	0.38008	0.31252
0.8	0.38879	0.32743
0.9	0.39567	0.34925
1	0.40176	0.40176

Tableau 6. Masse effective des trous lourds en fonction de la composition pour la VCA et la VCAA.

Optoelectronic and dielectric properties of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ ternary alloys

F. Mezrag, N.Y. Aouina, N. Bouarissa*

Physics Department, Faculty of Science and Engineering, University
of M'sila, 28000 M'sila Algeria

Abstract

Based on the pseudopotential scheme under the virtual crystal approximation in which the effect of compositional disorder is involved, the dependence of optoelectronic properties of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ on alloy composition x have been studied. Our results showed generally good agreement with the available experimental data. The material of interest is found to exhibit features of both direct and indirect band-gap semiconductor depending on the alloy composition x . The method used has been combined with the Harrison bond-orbital model and employed to calculate the dielectric constants and their composition dependence.

* Corresponding author. E-mail : N_Bouarissa@yahoo.fr

1- Introduction

III-V binary compound semiconductors are being investigated for possible applications in various electronic and photonic devices. Solid solutions between III-V compounds have become increasingly important for microelectronic applications, giving the possibility to choose the energy range e.g for optoelectronic or laser applications more appropriate than with the binary compounds [1, 2].

Using GaSb with GaAs (both components are direct gap semiconductors), the gallium arsenide antimonide ($\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$) ternary semiconductor alloys can be obtained. The latter is most often encountered with the $x=0.5$ composition that matches the lattice constant of InP, although it should also be noted that at $x=0.91$ is lattice matched to InAs [2].

The energy band-gaps and optical and dielectric constants are important parameters that are required to model quantum structures. A precise knowledge of the band structure of the material of interest is necessary to evaluate its expectable domain of application, and the direct-indirect transition crossover composition value is particularly of prime importance. Moreover, to design and fabricate wave-guide devices, the refractive index has to be precisely known as a function of wavelength and composition. Although several experimental and theoretical investigations of optoelectronic and dielectric properties of III-V ternary semiconductor alloys have been reported [2, 3], so far, to the best of our knowledge, there has been relatively little work on the properties of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$. For that, further studies of the properties of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ system are required.

In the present paper we have investigated the composition dependence of the energy band-gaps of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ ternary alloys using the empirical pseudopotential method (EPM) within the virtual crystal approximation (VCA) which takes into account the effect of compositionnal disorder. The knowledge of the energy gaps has allowed us to obtain the refractive index and its composition dependence using three different models, namely, the modified Moss relation [4] based on an atomic model, the relation of Ravindra et al. [5] which governs the linear variation of refractive index with energy gap in semiconductors and the empirical relation of Hervé and Vandamme [6]. Attention has also been given to the behavior of the refractive index with respect to the photon energy using the analytical expression based on the simplified model of interband transitions reported by Adachi [7].

Combining the used method with the Harrison bond-orbital model, we have calculated the dielectric constant and studied its variation versus arsenide concentration x .

2. Calculations

The local model empirical pseudopotential method (EPM) has been used so as to calculate the electronic structure of the material under investigation. The EPM is based on adjusting the pseudopotential form factors in order to reproduce measured band gap energies at selected points in the Brillouin zone. For that, we have used the non-linear least squares method [8] for the optimization of the empirical pseudopotential parameters. The experimental band gap energies for GaSb and GaAs binary compounds used in the fitting procedure are shown in table1. The dimension of our eigenvalue problem is a (136x136) matrix. However, 59 plane waves give generally a good convergence.

The alloy potential is calculated within the virtual crystal approximation (VCA), where a non-periodic potential due to the compositional disorder [12, 13] has been included. Thus, the potential of the alloy is taken as,

$$V_{alloy}(r) = V_{VCA}(r) + V_{dis}(r) \quad (1)$$

where $V_{VCA}(r)$ is the periodic virtual crystal potential and $V_{dis}(r)$ is the non-periodic potential due to the compositional disorder. Hence, the final expression for the pseudopotential form factors was,

$$V_{alloy}(G) = (1-x)V_{GaSb}(G) + xV_{GaAs}(G) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}[V_{GaAs}(G) - V_{GaSb}(G)] \quad (2)$$

where p is an adjustable parameter. When the VCA is used alone (without taking into account the disorder effect), p equals to zero. However, when the compositional disorder is included, the value of p is found to be 0.71, which gives a E_g^{Γ} band gap bowing parameter of 1.2 eV in agreement with the experimental one reported in ref. [1].

The lattice constant of the alloy of interest is obtained according to Vegard's rule [14],

$$a_{alloy}(x) = (1-x)a_{GaSb} + xa_{GaAs} \quad (3)$$

The refractive index (n) has been calculated using three different models that are related directly to the energy band-gap E_g as follows,

(i). The Moss formula [4] based on an atomic model,

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

where E_g is the energy band gap and k a constant with a value of 108 eV [4].

(ii). The Ravindra et al. [5] relation,

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (5)$$

with $\alpha = 4.084$ and $\beta = -0.62 \text{ eV}^{-1}$

(iii). The Hervé and Vandamme [6] empirical expression,

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (6)$$

for $\omega \ll \omega_0$, where ω_0 is the ultraviolet resonance frequency, $A = 13.6 \text{ eV}$ and $B = 3.4 \text{ eV}$

In order to show the variation of the refractive index as a function of the photon energy for a given values of the composition x , we have adopted the same model used by Adachi [7],

$$n(\omega) \approx \epsilon_1(\omega)^{0.5} \quad (7)$$

where $\epsilon_1(\omega)$ is the real part of the dielectric function given by

$$\varepsilon_1(\omega) = A \left[f(\chi_0) + \frac{1}{2} \left[\frac{E_0}{E_0 + \Delta_0} \right]^{1.5} f(\chi_{0s}) \right] + B \quad (8)$$

with

$$f(\chi_0) = \chi_0^{-2} \left[2 - (1 + \chi_0)^{0.5} - (1 - \chi_0)^{0.5} H(1 - \chi_0) \right] \quad (9a)$$

$$f(\chi_{0s}) = \chi_{0s}^{-2} \left[2 - (1 + \chi_{0s})^{0.5} - (1 - \chi_{0s})^{0.5} H(1 - \chi_{0s}) \right] \quad (9b)$$

$$\chi_0 = \frac{\eta\omega}{E_0} \quad (10a)$$

$$\chi_{0s} = \frac{\eta\omega}{E_0 + \Delta_0} \quad (10b)$$

where $\eta\omega$ is the photon energy and

$$H(y) = \begin{cases} 1 & \text{for } y \geq 0 \\ 0 & \text{for } y < 0 \end{cases} \quad (11)$$

where A and B are parameters obtained by fitting Eq. (8) to the experimental III-V binary data[7].

The static dielectric constant (ε_0) has been calculated for each composition x in the range 0 to 1 using the relation which holds between ε_0 and high-frequency dielectric constant (ε_∞) within the Harrison model [15],

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_\infty - 1} = 1 + \vartheta \quad (12)$$

where ϑ is given by [15],

$$\vartheta = \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (13)$$

α_p is the polarity which was determined using the Vogl [16] definition,

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (14)$$

$V_S(3)$ and $V_A(3)$ are the symmetric and antisymmetric form factors for a given composition x at G(111), respectively.

α_c is the covalency of the material of interest defined as,

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (15)$$

Note that the high-frequency dielectric constant (ϵ_∞) has been estimated using the relation [17],

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (16)$$

3. Results

The final local adjusted symmetric V_S and antisymmetric V_A pseudopotential form factors and used lattice constants for binary compounds GaSb and GaAs are listed in Table 2.

Fig.1 shows the composition dependence of band-gap energies, namely the direct band-gap

E_0 (taken as the transition $\Gamma_v \rightarrow \Gamma_c$) and the indirect ones E_g^X (taken as the transition $\Gamma_v \rightarrow X_c$) and E_g^L (taken as the transition $\Gamma_v \rightarrow L_c$) for the ternary alloy $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$. The solid and dashed lines are fitting curves to $E = a + bx + cx(x-1)$, where c is the band-gap bowing parameter. The analytical expressions are as follows:

$$E_0 = 0.68 + 0.51x - 1.21x^2 \quad (17)$$

$$E_g^X = 0.94 - 1.51x + 2.31x^2 \quad (18)$$

$$E_g^L = 0.72 - 1.07x + 2.02x^2 \quad (19)$$

The unit of the energy is eV. Accordingly, all band-gap energies increase non-linearly on going from GaSb to GaAs. The system transition between the direct and indirect structures occurred twice. Firstly, at the composition $x \cong 0.048$ which corresponds to an estimated crossover band-gap of 0.62 eV. This transition is originated by L -conduction band. The second transition occurred at $x \cong 0.59$ corresponding to a crossover band-gap of 0.82 eV and is originated by Γ -conduction band. Thus, our results suggest that the material of interest is a direct band-gap ($\Gamma_v \rightarrow \Gamma_c$) semiconductor for the composition $0 \leq x < 0.048$ and $0.59 < x \leq 1$ and is an indirect band-gap ($\Gamma_v \rightarrow L_c$) semiconductor for $0.048 < x < 0.59$.

Table 3 gives some resulting energy band-gaps in the alloy being studied here for different concentrations x ($0 < x < 1$). At $x = 0.5$, the material of interest is an indirect

($\Gamma_v \rightarrow L_c$) band-gap with $E_g^L = 0.73 \text{ eV}$. $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ is most often encountered with this composition that matches the lattice constant of InP [2]. Another interesting composition is $x=0.91$ at which the alloy under investigation is lattice matched to InAs [2]. Our results show that at this composition, $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ is a direct ($\Gamma_v \rightarrow \Gamma_c$) semiconductor band-gap with $E_g^\Gamma = E_0 = 1.17 \text{ eV}$.

The composition dependence of the refractive index has been calculated according to the relations (4-6) given in section 2. Our results together with known data [18] are plotted in Fig.2. Accordingly, a non-linear behavior of the refractive index can be clearly noticed for all three used models. A similar behavior has been reported for the refractive index in the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ternary alloy system [19]. Unlike this non-linear behavior, the known data of the refractive index exhibit linearity with respect to composition x . This discrepancy is mainly attributed to the fact that our results are obtained from the calculation of the refractive index for each composition x taking into account the effect of compositional disorder, while the known data for the alloy of interest are just an interpolation between binary parent compounds GaSb and GaAs. The nonlinearity with respect to x obtained in our results arises from the effects of alloy disorder. Thus, we are more confident to our results. We do believe however, that the Ravindra et al. model [5] gives better values of the refractive index than the other used models. This is because the values of the refractive index for GaSb and GaAs are closer to experiment when using the expression (5) as clearly seen in Table 4. The lines (b), (c) and (d) in Fig.2 correspond to the best fit of our results to the expression,

$$n(x) = a + bx + cx^2 \quad (20)$$

The resulting values of a , b and c using the different models are listed in Table 5.

Using the analytical relation [7] based on the simplified model of interband transitions, the refractive index of the alloy of interest has been calculated as a function of the photon energy for $x=0.02$, $x=0.3$ and $x=0.7$. Our results are shown in Fig.3. The solid lines give our best fit to the calculated data. Accordingly, for all values of x , the refractive index exhibit nonlinearity with respect to the photon energy showing however different refractive index bowing parameters for different values of alloy composition x . This arises from the effects of compositional alloy disorder on the refractive index which

depend on the alloy concentration x . However, it should be noted that the refractive index decreases with increasing the photon energy on going from $\eta\omega = 1.2 eV$ to $3.2 eV$, whatever the x value used in our calculations. Thus, the change of the arsenide concentration does not have an effect on the behavior of the refractive index with respect to the photon energy. This is not the case for $Al_xGa_{1-x}As$ where it has been reported that the change of the aluminum composition may strongly affect the behavior of the refractive index with respect to the photon energy [19].

The composition dependence of the static dielectric constant (ϵ_0) has been obtained according to the expression (12) using different models for the calculation of the high-frequency dielectric constant (ϵ_∞) that was directly deduced from the relation (16). Our results are displayed in Fig.4. For comparison, known data [18] are also plotted. In view of Fig.4, one can note that ϵ_0 decreases with increasing x on going from GaSb to GaAs showing a strong non-linear behavior for all used models in contrast to the linear behavior exhibited by the known data reported in ref.[18]. This is an expected result since our results are related to the refractive index discussed previously in the present work (Fig.2). Once again we are confident to our results since those reported in ref. [18] were just an interpolation between the ϵ_0 of GaSb and GaAs. It seems as well that the Ravindra et al. model [5] leads to the obtention of values for ϵ_0 that are closer to experiment than the other used models. This is clearly seen in Table 6 for GaSb and GaAs binary parent compounds. The lines (b), (c) and (d) in Fig.4 are the best fit of our calculated data by a least squares procedure. The analytical expressions are as follow:

$$\epsilon_0(x) = 14.4 + 1.77x - 6.97x^2 \quad (21)$$

$$\epsilon_0(x) = 14.7 + 2.52x - 5.92x^2 \quad (22)$$

$$\epsilon_0(x) = 13.41 + 2.17x - 5.84x^2 \quad (23)$$

The expressions (21-23), correspond to the Moss [4] Ravindra et al. [5] and Hervé and Vandamme [6] models, respectively.

4. Summary

In summary, the composition dependence of energy band-gaps and optical and dielectric constants of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ ternary semiconductor alloys has been investigated. Our calculations are based on the EPM within the VCA which takes into account the effect of compositional disorder. The scheme used was combined with the Harrison bond-orbital model and employed for the calculation of the static dielectric constants. The agreement between our results and the available experimental data is found to be generally satisfactory. The material under study is found to be a direct band-gap semiconductor in the composition range $0 \leq x < 0.048$ and $0.59 < x \leq 1$, and an indirect band-gap semiconductor in the composition range $0.048 < x < 0.59$. Unlike, the linear behavior suggested in the literature for the refractive index with respect to alloy composition x , our results for all used models showed that the refractive index varies non-linearly with respect to x exhibiting a strong bowing parameter that is believed to be due to the effect of alloy disorder. It should be noted, however, that the Ravindra et al. model gives better values of the refractive index with respect to experiment as compared to other used models. The behavior of the refractive index with respect to the photon energy is found to be independent of the arsenide concentration. The composition dependence of the static dielectric constant showed as well a non-linear behavior and suggested that the use of the values of the refractive index obtained according to Ravindra et al. model for calculating the static dielectric constant gives better results.

References

- [1]. O. Madelung (Ed.), Semiconductors-Basic Data, Springer, Berlin, 1996.
- [2]. I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2001) 5815.
- [3]. N. Bouarissa, Mater. Sci. Eng. B 86 (2001) 53.
- [4]. V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [5]. N.M. Ravindra, S. Auluck, V.K. Srivastava, Phys. Stat. Sol. (b) 93 (1979) K 155.
- [6]. P.J.L. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [7]. S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [8]. T.Kobayasi, H.Nara, Bull. Coll. Med.Sci., Tohoku Univ. 2 (1993) 7.
- [9]. S. Zollner, M. Garriga, J.Humlicek, S. Gopalan, M. Cardona, Phys. Rev.B 43 (1991) 4349.
- [10]. C. Alibert, A. Joullie, A.M. Joullie, C. Ance, Phys. Rev.B 27 (1983) 4946.
- [11]. D.E. Aspnes, C.G. Olson, D.W. Lynch, Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 766.
- [12]. S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter 2 (1990) 3253.
- [13]. N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.
- [14]. L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [15]. S. Yu. Davydov, S.K.Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947 and references cited therein.
- [16]. P.Vogl, J.Phys. C 11 (1978) 251.
- [17]. G.A. Samara, Phys. Rev. B 27 (1983) 3494.
- [18]. M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, Vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.
- [19]. N. Bouarissa, Matter. Chem. Phys. 72 (2001) 387.
- [20]. M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.) Handbook Series on Semiconductor Parameters, Vol.1, World Scientific, Singapore, 1996.

Figure Captions

Fig.1. Direct and indirect band-gap energies in $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ as a function of As content x .

Fig.2. Refractive index as a function of As content x , in $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculated from : (a) Known data from the literature [18]; The refractive index is obtained using: (b). Ravindra et al.'s relation; (c). Hervé and Vandamme relation; and (d). Moss relation.

Fig.3. (a). Refractive index as a function of the photon energy, in $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ for $x=0.02$.

Fig.3. (b). Refractive index as a function of the photon energy, in $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ for $x=0.3$.

Fig.3. (c). Refractive index as a function of the photon energy, in $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ for $x=0.7$.

Fig.4. Static dielectric constant as a function of As content x , in $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$. (a) Known data from the literature [18]; The refractive index is obtained using: (b). Ravindra et al.'s relation; (c). Hervé and Vandamme relation ; and (d). Moss relation.

Table 1. Band-gap energies of GaSb and GaAs

Compound	Band-gap energy (eV)					
	E_g^{Γ}		E_g^X		E_g^L	
	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal
GaSb	0.725 ^{a,b}	0.72 ^c	1.03 ^b	1.02 ^c	0.761 ^b	0.78 ^c
GaAs	1.42 ^d	1.42 ^c	1.81 ^d	1.81 ^c	1.72 ^d	1.72 ^c

^a Ref.[9]^b Ref.[10]^c Present calculations^d Ref.[11]**Table 2.** Pseudopotential form factors and lattice constants for GaSb and GaAs

Compound	Form factors (Ryd)						Lattice constant(Å)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
GaSb	-0.191206	0.005	0.043533	0.045340	0.03	0.00	6.118
GaAs	-0.239833	0.0126	0.059625	0.060536	0.05	0.01	5.653

Table 3. Calculated band-gap energies of GaAs_xSb_{1-x} for different concentrations x

Ternary alloy	Band-gap energy (eV)		
	E_g^Γ	E_g^X	E_g^L
GaAs _{0.10} Sb _{0.90}	0.60	0.70	0.55
GaAs _{0.30} Sb _{0.70}	0.64	0.70	0.58
GaAs _{0.50} Sb _{0.50}	0.75	0.81	0.73
GaAs _{0.70} Sb _{0.30}	0.92	1.02	0.96
GaAs _{0.91} Sb _{0.09}	1.17	1.39	1.33

Table 4. Refractive indices of GaAs_xSb_{1-x} for different compositions x.

Material	n (calculated using relation (4))	n (calculated using relation (5))	n (calculated using relation (6))	n (known)
GaSb	3.5	3.64	3.45	3.8 ^a
GaAs _{0.10} Sb _{0.90}	3.74	3.74	3.58	3.75 ^b
GaAs _{0.50} Sb _{0.50}	3.49	3.63	3.44	3.55 ^b
GaAs _{0.90} Sb _{0.10}	3.11	3.37	3.15	3.35 ^b
GaAs	2.95	3.2	2.99	3.3 ^a

^a Ref. [20].^b Known data for $0 < x < 1$ are estimated from the linear relation suggested in ref.[18]

Table 5. Values of the parameters a, b, and c obtained by fitting the dependence of the refractive index of GaAs_xSb_{1-x} on x to $n = a + bx + cx^2$.

Model	a	b	c
Moss [4]	3.65	0.27	-1
Ravindra et al. [5]	3.68	0.36	-0.83
Hervé and Vandamme [6]	3.52	0.33	-0.86

Table 6. Static dielectric constants of GaAs_xSb_{1-x} for different compositions x.

Material	ϵ_0 calculated using relation (4) for n	ϵ_0 calculated using relation (5) for n	ϵ_0 calculated using relation (6) for n	ϵ_0 known
GaSb	13.28	14.34	12.89	15.70 ^a
GaAs _{0.10} Sb _{0.90}	15.17	15.17	13.91	15.42 ^b
GaAs _{0.50} Sb _{0.50}	13.20	14.33	12.85	14.30 _b
GaAs _{0.90} Sb _{0.10}	10.57	12.40	10.83	13.18 _b
GaAs	9.53	11.23	9.79	12.90 ^a

^a Ref. [18].

^b Known data for $0 < x < 1$ are estimated from the linear relation suggested in ref.[18]

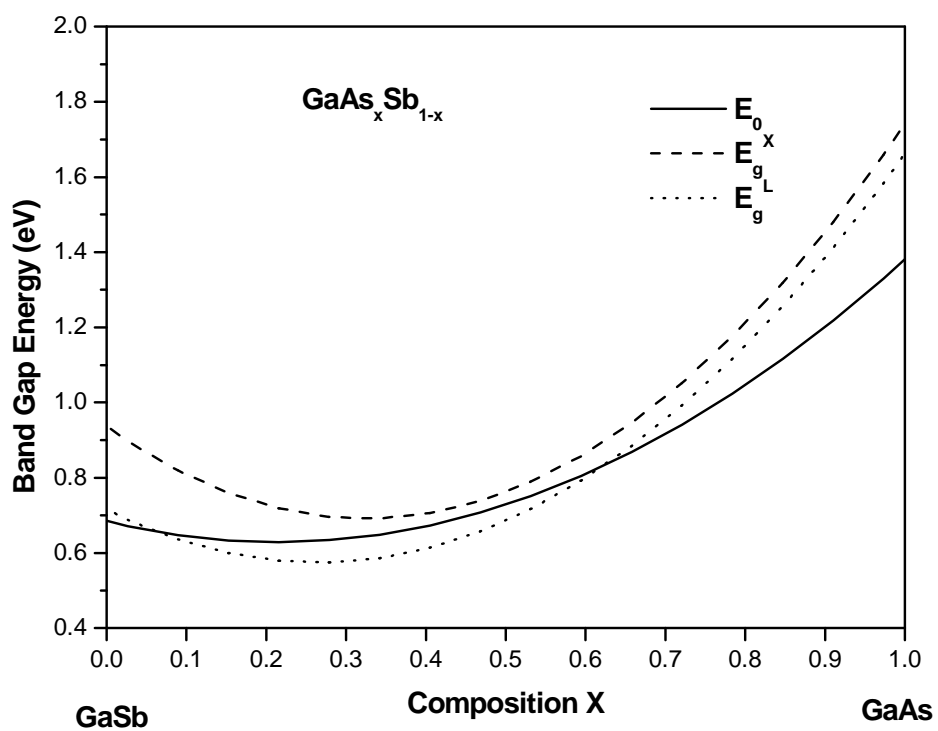


Figure 1.

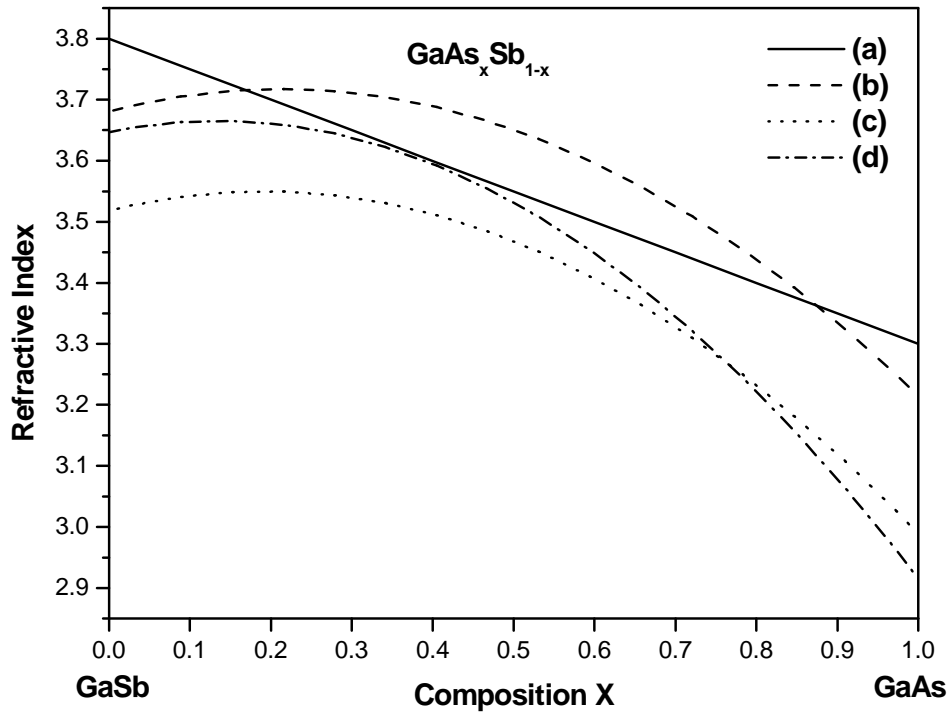


Figure 2.

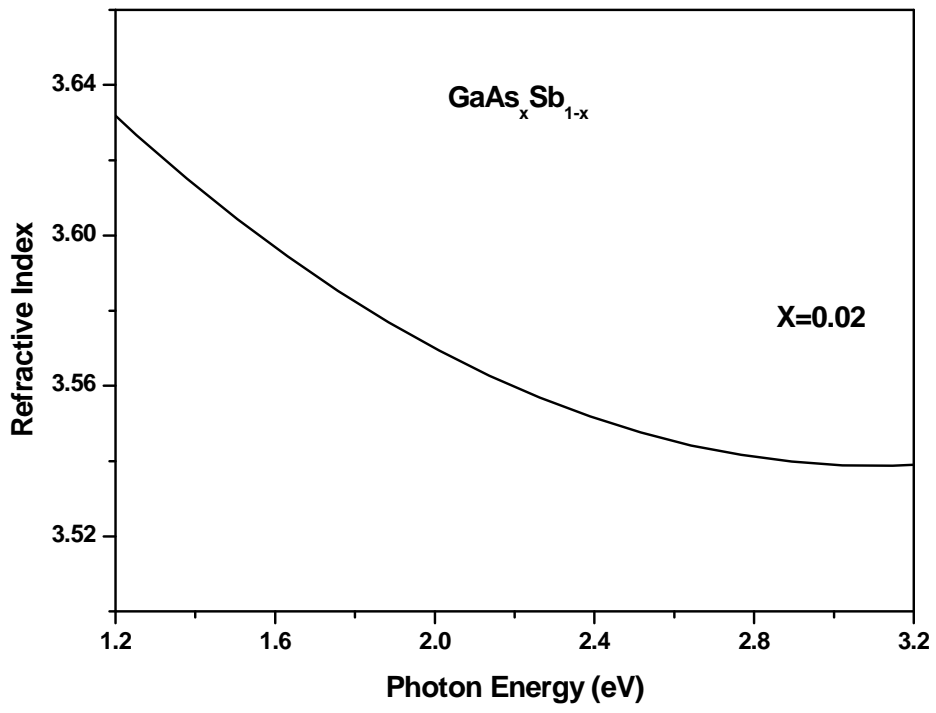


Figure 3a.

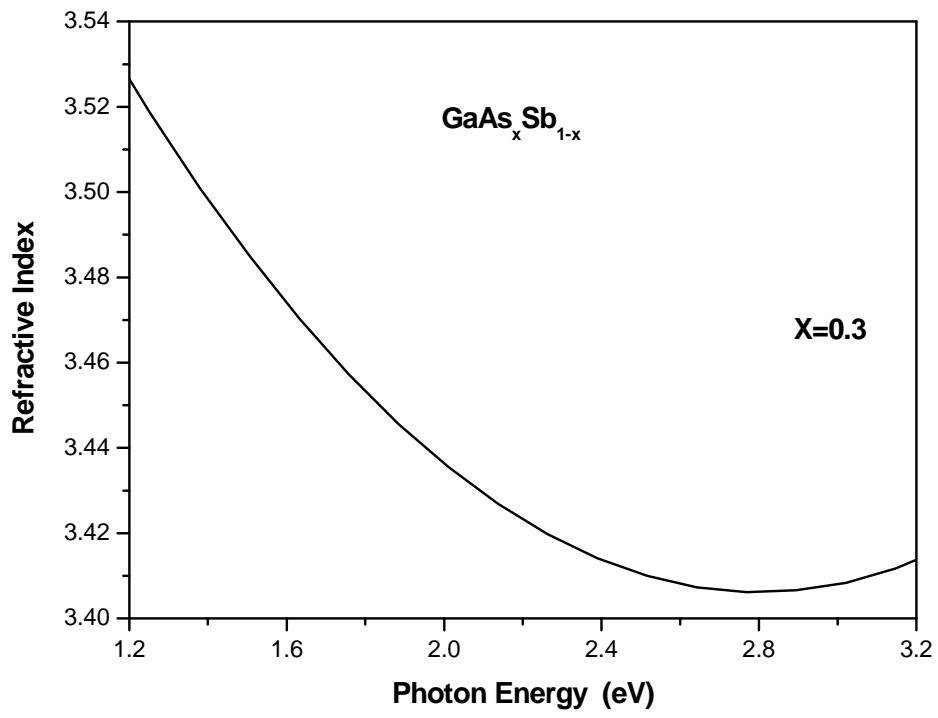


Figure 3b.

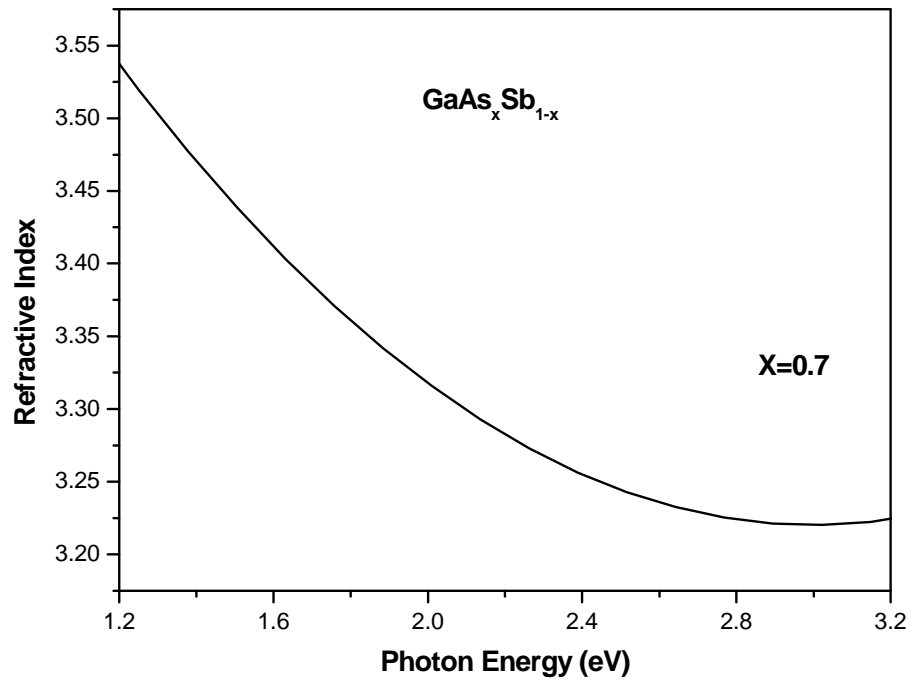


Figure 3c.

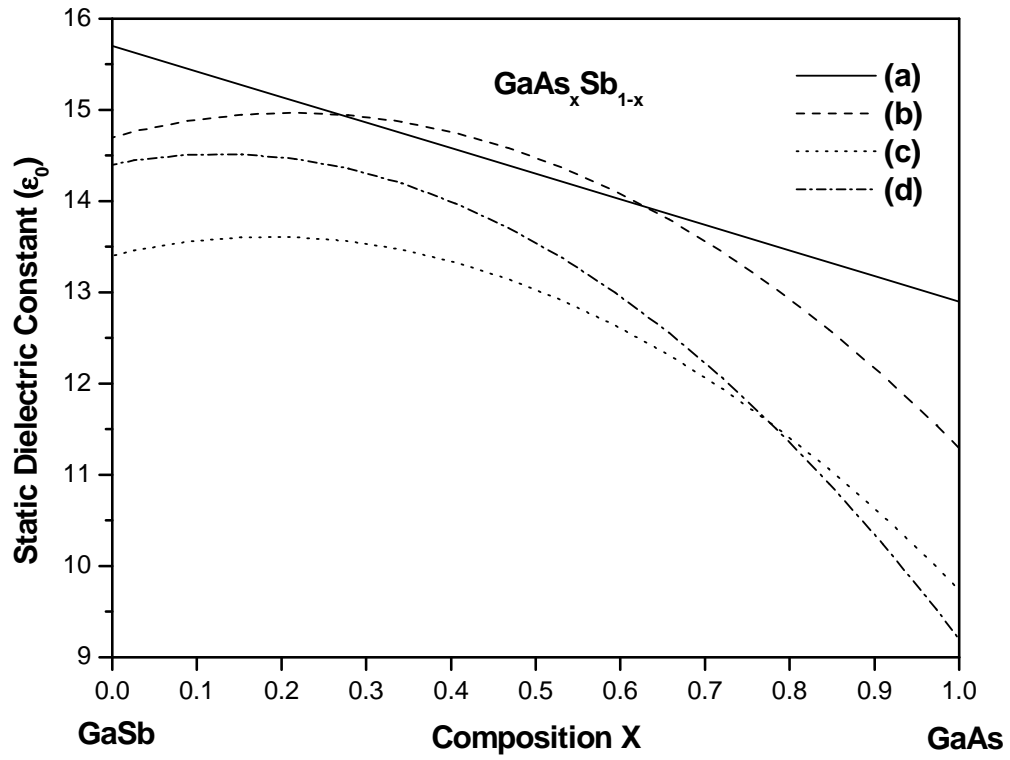


Figure 4.