

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° : Pb APP 23/2020



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique énergétique et
énergies renouvelables

*Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique*

Par: LAMRAOUI SAADIA IMANE ET LAMRAOUI HANANE

Intitulé

**Piézoélectricité et constantes de couplage
électromécaniques des semi-conducteurs de
type II-VI**

Soutenu le : 27/09/2020 devant le jury composé de :

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

Année universitaire : 2019/2020

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

REMARCIEMENTS

Tout d'abord, nous remercions Allah, le clément et le Miséricordieux de nous avoir donné la force et le courage de mener à bien ce modeste travail.

Nous tenons à remercier chaleureusement notre encadreur M.N. BOUARISSA pour sa compréhension, ses conseils, son aide précieuse et pour son encadrement durant toute la période de préparation de ce mémoire.

nous tenons à remercier aussi les membres du jury d'avoir bien voulu examiner ce travail ainsi que tous les enseignants du département de physique.

En fin nous tiens remerciments vont aussi à toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

➤ *Me. LAMRAOUI HANANE*

➤ *Me. LAMRAOUI SAADIA IMANE*

DEDICACE

*Je dédie cet humble travail avec un grand amour et
unesincérité et fierté :*

A mes très chers parents

*Mes frères .en témoignage de la fraternité. Avec mes
souhails de bonheur de santé et de succès.*

*A tous mes amis, tous mes professeurs et à tous qu'ils
ont participé à ce modeste travail.*

Mlle. LAMRAOUI HANANE

DEDICACE

Je dédie ce modeste travail

À toute la famille, ma mère et mon père, mes frères et

Mes sœurs,

*à tous les amis proches et à toute personne Ayant
contribué à ce travail de près et de loin.*

Mlle. LAMRAOUI SAADIA IMANE

Liste des figures

Chapitre I

- Figure I.1:** La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux.....4
- Figure I.2:** Génération d'électrons et des trous dans un semi-conducteur intrinsèque.....8
- Figure I.3:** Génération thermique de porteur de charge dans un semi-conducteur dopé par un donneur.....10
- Figure I.4:** Structures cristallographiques des composés semi-conducteurs II-VI: a: sphalérite , b: wurtzite.....13
- Figure I.5:** Schéma de bandes au centre de la zone de Brillouin.....14
- Figure I.6 :** Transitions inter bandes a) directe b) indirecte.....16
- Figure I.7 :** Illustration des effets Piézoélectriques d'un matériau en céramique: a) Effet direct b) effet inverse.....19
- Figure I.8 :** Piézoélectricité du Quartz naturel à l'équilibre (a) et avec une force appliquée (b).....20
- Figure I.9 :** Représentation schématique de l'apparition de la piézoélectricité.....21
- Figure I.10:** Microstructure typique d'une surface céramique.....23

Chapitre II

Figure II.1 : Fonction de Heine-Abarenkov.....**39**

Figure II.2 : Fonction de Gauss.....**40**

Figure II.3 : Fonction d'Ashcroft.....**41**

Figure II.4 : Diagramme de la procédure de calcul par EPM.....**44**.

Chapitre III

Figure III.1 : Variation du facteur de forme symétrique $V_S(3)$ en fonction de la constante de réseau.....**49**

Figure III.2 : Variation du facteur de forme symétrique $V_S(8)$ en fonction de la constante de réseau.....**50**

Figure III.3 : Variation du facteur de forme symétrique (11) en fonction de la constante de réseau.....**51**.

Figure III.4 : Variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(3)$ en fonction de la constante de réseau.....**52**.

Figure III.5 : Variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(4)$ en fonction de la constante de réseau.....**53**

Figure III.6 : Variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(11)$ en fonction de la constante de réseau.....**55**.

Figure III.7 : Variation de la constante piézoélectrique e_{14} en fonction de la constante de réseau.....**57**

Figure III.8 : Constante de déformation piézoélectrique en fonction de la constante de réseau.....**60**

Figure III.9 : Constante diélectrique statique en fonction de la constante de réseau.....**60**

Figure III.10 : Constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la constante de réseau.....**63**

Liste des tableaux

Chapitre I

Tableau I.1: Extrait du tableau périodique des éléments chimiques.....11

Tableau I.2: Paramètres de maille de composés semi-conducteurs II-VI.....12

Chapitre III

Tableau III.1 : Facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés, exprimés en Ryd des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.....48

Tableau III.2 : Constante de contrainte piézoélectrique e_{14} exprimée en C/m^2 et constante de déformation d_{14} exprimée en 10^{-12} m/V des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.....54

Tableau III.3 : Constantes diélectrique statique et de haute fréquence des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.....59

Tableau III.4 : Constante de couplage électromécanique des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.....62

SOMMAIRE

REMERCIEMENT.....	I
DEDICACES Mle. Hanane.....	II
DEDICACES Mle. SaadiaImane.....	III
LISTE DES FIGURES.....	IV
LISTE DES TABLEAUX.....	V
ITRODUCTION GENERALE.....	1

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

I.1. Introduction.....	3
I.2. Définition	3
I.3. Structures cristallines	4
I.4. Les propriétés électrique des semi-conducteurs	6
I.4.1. Conductivité électrique	6
I.5. Les différents types des semi-conducteurs	7
I.5.1. Les semi-conducteurs intrinsèques	8
I.5.2. Les semi-conducteurs extrinsèques.....	9
I.6. Les semi-conducteurs II-VI	11
I.6.1. Propriétés structurales des semi-conducteurs II-VI	12
I.6.1.1. Structure sphalérite	13
I.6.1.2. Structure wurtzite.....	13
I.6.1.3. Structure de bandes	14
I.6.2.1. Gap direct et gap indirect	15
I.6.2.2. Transitions inter bandes	16
I.7. La Piézoélectricité.....	18
I.7.1. Définition	18
I.7.2. La piézoélectricité naturelle	19
I.7.3. Origine de la piézo-électricité	20
I.7.4. Phénomène de la piézoélectricité.....	21
I.7.5. Propriétés générales des PZT	22

I.7.6. Matériaux piézoélectriques	23
I.7.7. Caractéristiques piézoélectrique	25
I.7.8. Couplage électromécanique	26
Reference.....	29
Chapitre II : La méthode du pseudo-potentiel	
II.1.Introduction	34
II. 2. Formulation mathématique	34
II.3.Lesmodelésdupseudo-potentiel.....	36
II.3.1.Lemodelélocal	37
II.3.2.Le modèle nonlocal	38
II.3.2.1.Le modèle deHeine-Abarenkov[13,14].....	39
II.3.2.1. Le modèle deGauss[15-17]	40
II.3.2.3.Le modèled'Ashcroft[11,19].....	40
II.4. La méthode empirique du pseudo potentiel (l'E.P.M)	41
II.4.1.Laméthodeempiriquedepseudo-potentiel local(EPM)	42
Reference.....	45
Chapitre III : Résultats et discussion	
Résultats et discussion.....	47
Chapitre IV : Conclusion générale	
Conclusion générale.....	66
Résumé.....	67
Abstract.....	68
الملخص.....	69

Introduction générale

La physique des matériaux joue un rôle de plus en plus important dans les applications technologiques, et ce rôle ne fera que progresser dans beaucoup de domaines. La conception et la fabrication de matériaux nouveaux, aux propriétés souvent étonnantes (alliages spéciaux, matériaux composites très légers et très résistants, cristaux liquides, semi-conducteursetc.) constitue un domaine très actif de la recherche et de la technologie moderne [1].

L'effet piézoélectrique est largement utilisé pour la possibilité d'exploiter l'effet direct ou inverse ou les deux alternativement (ou simultanément). On lui reconnaît son efficacité, sa fiabilité, sa commodité de mise en œuvre, et son coût relativement modeste. La première application utilisant ce phénomène fut la balance à quartz. La masse posée sur la surface du quartz modifie la fréquence de résonance de façon proportionnelle à son poids. Mais c'est lors de la première guerre mondiale que le premier composant électronique intégrant un cristal de quartz voit le jour [2].

Tous les matériaux ne possèdent pas les caractéristiques indispensables pour être piézoélectriques. La propriété diélectrique est la première des conditions nécessaires : le matériau ne possède pas de charges électriques pouvant se déplacer à l'échelle macroscopique. Dans le langage courant, il est qualifié d'isolant. Dans un premier temps, la classification des matériaux piézoélectriques sera donnée. Les lois physiques régissant leur comportement sont également rappelées [3].

L'intérêt majeur de ce phénomène réside dans le couplage entre les grandeurs électriques et les grandeurs mécaniques. Il permet une action sur l'état mécanique d'une structure par l'application d'un champ électrique. L'objectif de ce mémoire est d'étudier la piézoélectricité et les constantes de couplage électromécanique des semi-conducteurs de type II-VI. Les semi-conducteurs d'intérêts sont: ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe. Nous avons examiné et discuté les quantités physiques suivantes: facteurs de formes du pseudopotentiel, constante piézoélectrique, constante de déformation, constante diélectrique statique, constante

Introduction générale

diélectrique de haute fréquence et constante de couplage électromécanique. Les calculs ont été réalisés en utilisant la méthode empirique locale du pseudo potentiel (E.P.M) [4].

Le mémoire est organisé comme suit:

Dans le premier chapitre, nous rappelons la propriété piézoélectrique et constante de couplage électromécanique. Le 2^{ème} chapitre est consacré à un rappel de principe de certaines méthodes théoriques utilisées dans le calcul des structures de bandes des semi-conducteurs à zinc blende de cocentré sur

l'une des méthodes théoriques principales de notre travail appelé méthode empirique du pseudo-potentiel (E.P.M). Dans le dernier chapitre, nous présentons les résultats et discussion de nos calculs, leur interprétation ainsi qu'une comparaison avec certains travaux théoriques et expérimentaux. Finalement, notre travail est achevé par une conclusion générale.

Références

- [1] J.M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287
- [2] Faiza Boukazouh grade de Docteur en Sciences publiquement, le 17-01-2016
- [3] Rémi Rouffaudle grade de Docteur de l'université François le 1 Décembre 2014 page 23
- [4] M. L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semi conductors, Springer, Berlin, 1988

Chapitre I:

**Notions fondamentales sur les
Semi-conducteurs: propriétés
piézoélectriques et constantes de
couplage électromécanique**

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

I.1. Introduction

Depuis longtemps, les matériaux semi-conducteurs sont étudiés et leurs propriétés physiques sont en général très bien connues. Une investigation plus profonde de la physique de ces matériaux se nécessite des structures de plus en plus sophistiquées. Dans le domaine des semi-conducteurs, Dernières années ont été marquées par un effort est soutenu dans le développement et la maîtrise de nouveaux matériaux à fortes potentialités technologiques. Dans ce chapitre, on présente la généralité sur les matériaux semi-conducteurs et en particulier les matériaux semi-conducteurs de type II-VI [1-5].

I.2. Définition

Le semi-conducteur est un matériau dont la conductivité électrique intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sim 10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et des isolants ($\sim 10^{-22}$ à $\sim 10^{-14} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). La conductivité des matériaux semi conducteur varie sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (défauts du réseau, dopage) [6]. La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux est schématisée sur la figure I.2.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

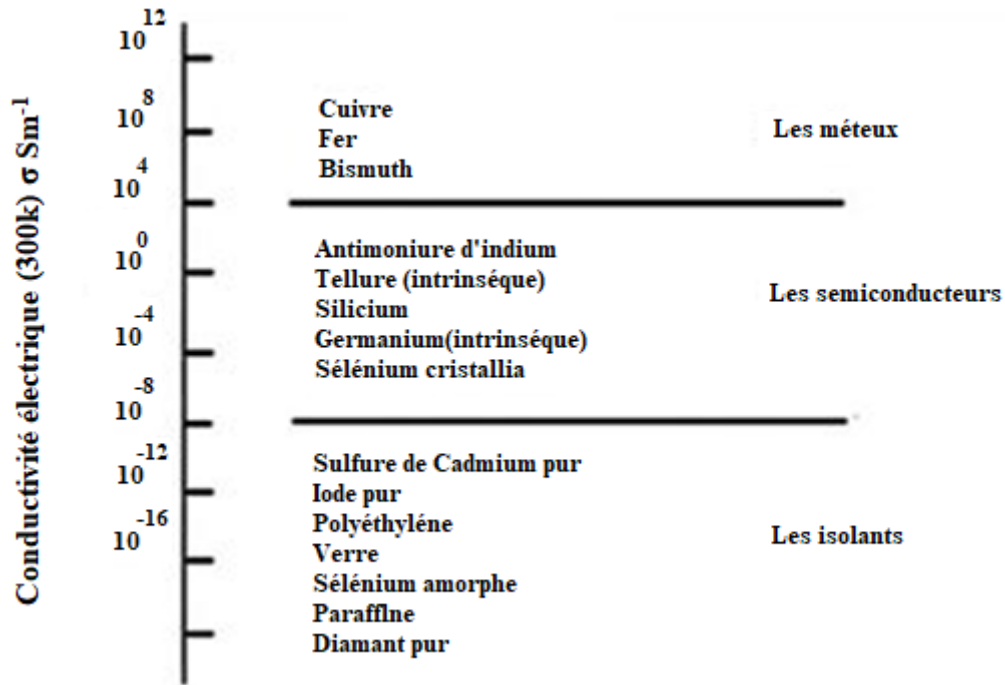


Figure I.1: La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux [7].

I.3. Structures cristallines

La matière condensée peut prendre deux différents états solides, l'état amorphe dans lequel l'arrangement des atomes est aléatoire. Les matériaux qui se solidifient dans cet état sont généralement appelés des verres et sont considérés comme des liquides de haute viscosité [8].

Le deuxième état, qui nous intéresse plus particulièrement ici, est l'état cristallisé, là les atomes sont rangés régulièrement (périodiquement) aux nœuds d'un réseau. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes. On associe les électrons des couches internes des atomes avec leur noyau, ce qui représente un ion positif et on traite les électrons périphériques comme des particules

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

quasi-libres dans le champ des ions. On distingue, à partir de ce type de représentation, essentiellement quatre familles de solides cristallisés : les cristaux ioniques, les cristaux covalents, les métaux et les cristaux moléculaires [9].

↳ Les cristaux ioniques

Les cristaux ioniques résultent de l'association d'un élément fortement électropositif et d'un élément fortement électronégatif. L'élément électropositif a généralement un seul électron périphérique (métaux alcalins : Li, Na, K, Rb, Cs), qu'il cède facilement pour devenir un ion positif avec une configuration électronique stable de couches saturées. L'élément électronégatif a généralement sept électrons périphériques (halogènes : F, Cl, Br, I), il accepte facilement un huitième électron pour devenir un ion négatif avec une configuration électronique stable. Les deux ions ainsi créés sont liés par attraction coulombienne, d'où le nom de cristaux ioniques [10].

L'électron libéré par le métal alcalin est fortement fixé sur l'halogène de sorte qu'aucun électron n'est libéré dans le réseau du matériau, ces cristaux sont des isolants. En outre, l'énergie de liaison entre les atomes est très importante de sorte que ces cristaux sont généralement très durs.

↳ Les cristaux covalents

Les cristaux covalents sont construits avec des éléments de la colonne IV du tableau périodique (C, Si, Ge, Sn). Ces éléments ont quatre électrons périphériques qu'ils mettent en commun avec quatre voisins pour établir des liaisons covalentes.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Les électrons de valence sont liés mais leur énergie de liaison est beaucoup plus faible que dans les cristaux ioniques. Cette énergie de liaison est importante dans le carbone diamant, ce qui en fait un isolant, elle est nulle dans l'étain, ce qui en fait un conducteur. Dans le silicium et le germanium cette énergie a une valeur intermédiaire qui fait de ces matériaux des semi-conducteurs [11].

↳ Les métaux

Les métaux sont construits avec des éléments électropositifs, c'est-à-dire ayant un seul électron périphérique. Cet électron périphérique est libéré dans la réalisation du cristal, ces matériaux sont très conducteurs. Les liaisons entre atomes sont plus faibles que dans les cristaux ioniques ou covalents, ces matériaux sont moins durs et fondent à basse température. On distingue les métaux alcalins Li, Na, K, Cs et les métaux nobles Cu, Ag, Au [12].

↳ Les cristaux moléculaires

Les cristaux moléculaires, comme leur nom l'indique, sont bâtis sur une unité de base qui n'est plus l'atome mais la molécule. Les forces de liaison sont grandes à l'intérieur de la molécule mais du type Van der Waas entre molécules et par conséquent faibles. Ces matériaux sont peu résistants et fondent à basse température [13].

I.4. Les propriétés électriques des semi-conducteurs

I.4.1. Conductivité électrique

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont la conductivité est intermédiaire entre celles des isolants et des conducteurs. Dans les semi-conducteurs la conduction est assurée par deux types de porteurs les électrons et les trous [14].

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

σ représente la conductivité électrique du semi-conducteur, elle dépend de la température. la conductivité $\sigma(T)$ et la résistivité $\rho(T)$, sont données par :

$$\sigma(T) = q(n\mu_n(T) + p\mu_p(T)) \dots\dots\dots(I.1)$$

En général, la conductivité électrique dépend, en outre, de la température, de la radiation électromagnétique, du champ magnétique et de toute forme d'irradiation et de défauts. Ce sont ces variations de la conductivité électrique, sous l'effet d'influences variées, qui font des semi-conducteurs des matériaux importants pour l'électronique et ses applications.

La conductivité électrique d'un matériau ne suffit pas pour définir de manière rigoureuse l'état de semi-conducteur. Il existe des semi-conducteurs qui conduisent mieux que certains métaux et d'autres plus isolants que certains non métaux. Par contre, pour l'ensemble des semi-conducteurs, certaines grandeurs physiques obéissent à des lois caractéristiques parfaitement définies. Ces comportements représentatifs permettent d'établir des définitions phénoménologiques de la classe des matériaux semi-conducteurs [15].

I.5. Les différents types des semi-conducteurs

Les semi-conducteurs sont des matériaux se situant entre le conducteur et l'isolant. Les semi-conducteurs à l'état pur (intrinsèque) ne sont pas un bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments uniques les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le silicium (Si), le germanium (Ge) et le carbone (C) [16].

Il y'a deux types de semi-conducteurs, l'intrinsèque et l'autre appelé extrinsèque.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

I.5.1. Les semi-conducteurs intrinsèques

Des semi-conducteurs sont très purs et très bien cristallisés présentant un réseau cristallin parfaitement périodique tout en ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour 10¹³ atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température, la conductivité de semi-conducteurs intrinsèques augmente avec la température [17].

Un semi-conducteur ne renfermant aucune impureté ($N_d = N_a = 0$) est dit intrinsèque.

L'équation de neutralité correspondante est:

$$n-p = 0 \text{ ou } n=p \dots\dots\dots (I.2)$$

Cette équation signifie que lorsqu'un électron quitte la bande de valence, il se produit dans cette dernière un trou et, de ce fait, dans un semi-conducteur intrinsèque le nombre de trous et toujours égal au nombre d'électrons (Figure I.2).

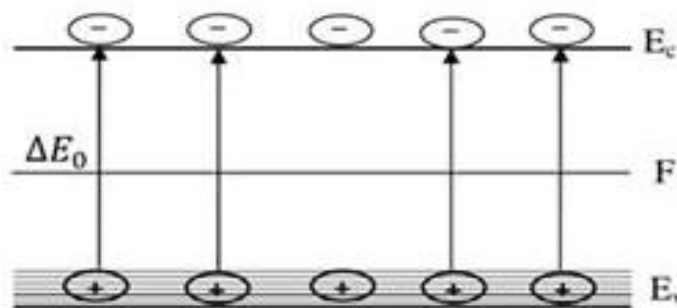


Figure I.2: Génération d'électrons et des trous dans un semi-conducteur intrinsèque [17].

Le niveau de fermi est indépendant de la température et se situe presque au milieu de la bande interdite.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

$$E = \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3}{4} kT \text{Log} \frac{m_v}{m_c} \dots \dots \dots (I.3)$$

A l'équilibre thermique, les densités totales d'électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence sont données par les expressions suivantes:

$$n = N_c e^{-\frac{E_c + F}{kT}} = N_c e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}} \dots \dots \dots (I.4)$$

$$p = N_v e^{-\frac{F - E_v}{kT}} = N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}} \dots \dots \dots (I.5)$$

N_c et N_v sont les densités d'états effectives respective des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence

sont respectivement la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction et la densité effective d'états des trous dans la bande de valence.

La concentration des porteurs de charge intrinsèques est définie par l'équation (I.6),

$$n_i = n = p = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}} \dots \dots \dots (I.6)$$

I.5.2. Les semi-conducteurs extrinsèques

Des semi-conducteurs extrinsèques sont dopés par des impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage, lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques (diodes, transistors, etc...) et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, etc...) [18].

Selon la nature des atomes introduits, soit le nombre d'électrons devient très supérieur au nombre de trous et le semi-conducteur est appelé de type n, soit le nombre de trous devient très supérieur à celui des électrons et le semi-conducteur est appelé de type p. nous allons

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

expliquer le phénomène de dopage et ses conséquences sur le nombre d'électrons et de trous ainsi que sur la position du niveau de Fermi (niveau statistique moyen) dans le semi-conducteur.

Considérons un semi-conducteur dopé, par exemple, avec une impureté de type donneur de sorte que. L'équation de neutralité s'écrit alors :

$$n + n_d - p = N_d \dots \dots \dots (I.7)$$

Cette dernière équation signifie que l'apparition des électrons libres est due d'une part aux transitions de la bande de valence, ce qui conduit à la création de p trous libres et d'autre part aux transitions du niveau d'impureté(FigureI.3).

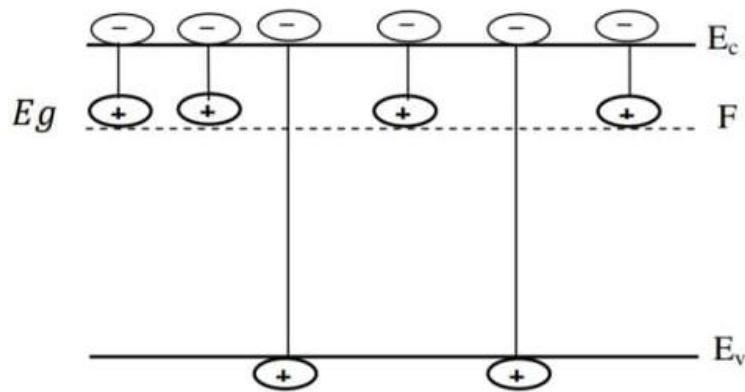


Figure I.3: Génération thermique de porteur de charge dans un semi-conducteur dopé par un donneur [16].

Dans le semi-conducteur non dégénéré il suffit de déterminer la concentration des porteurs de charge d'un seul type :

$$n p = n_i^2 = N_c N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{kT}} \dots \dots \dots (I.8)$$

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Reprenons l'équation (I.6), comme les électrons libres apparaissent grâce à l'ionisation de l'impureté et à l'excitation thermique du semi-conducteur lui-même, le rôle respectif de ces deux processus est différent selon la température.

Pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction, on doit dépenser une énergie égale à la largeur de la bande interdite ΔE_0 [19].

I.6. Les semi-conducteurs II-VI

Les semi-conducteurs II-VI sont constitués par l'association d'un élément de la colonne II avec un élément de la colonne VI de la classification périodique de Mendeleïev (Tableau 1). Le sulfure de zinc (ZnS) et le tellure de cadmium (CdTe) en sont des exemples [20].

Tableau I.1: Extrait du tableau périodique des éléments chimiques [20].

II	III	IV	V	VI
	B ⁵	C ⁶	N ⁷	O ⁸
Mg ¹²	Al ¹³	Si ¹⁴	P ¹⁵	S ¹⁶
Zn ³⁰	Ga ³¹	Ge ³²	As ³³	Se ³⁴
Cd ⁴⁸	In ⁴⁹	Sn ⁵⁰	Sb ⁵¹	Te ⁵²
Hg ⁸⁰	Tl ⁸¹	Pb ⁸²	Bi ⁸³	Po ⁸⁴

La dernière orbitale s des atomes du groupe II ne possède que deux électrons; tandis que la couche électronique périphérique des atomes du groupe VI renferme six électrons de valence dont deux sur l'orbitale s et quatre sur l'orbitale p. Un matériau II-VI comportera donc des

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

liaisons hybrides de type sp^3 où chaque cation (élément II) se retrouve dans un environnement tétraédrique d'anions (élément VI) et inversement.

Ces liaisons sont polaires, avec un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente [21].

I.6.1. Propriétés structurales des semi-conducteurs II-VI

Les semi-conducteurs II-VI peuvent avoir des structures cristallines de deux types: la structure cubique du type sphalérite (phase bêta) et la structure hexagonale du type wurtzite (phase alpha), qui toutes les deux se caractérisent par une disposition tétraédrique des atomes. Les deux structures sont stables à température ambiante [21].

Dans ces composés on peut assister, sous certaines conditions, à des transitions d'une structure à l'autre ou bien à la coexistence des deux structures [22]. Les paramètres cristallographiques de certains semi-conducteurs II-VI sont rapportés dans le tableau 2.

Tableau I.2: Paramètres de maille de composés semi-conducteurs II-VI [21].

Composé	Paramètres de maille		
	Sphalérite a(Å)	Wurtzite a(Å) c(Å)	
ZnO	4.871	3.249	5.206
ZnS	5.414	3.823	6.25
ZnSe	5.573	3.886	6.625
ZnTe	6.101	4.314	7.044
CdS	5.832	4.135	6.749
CdSe	6.050	4.300	6.007
CdTe	6.482	4.583	7.484

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

I.6.1.1. Structure sphalérite

A chaque nœud sont associés deux atomes A(II) et B(VI); les atomes A et B sont disposés sur deux réseaux cubiques à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale du cube.

La maille élémentaire comporte quatre molécules du composé II-VI, réparties selon la symétrie cubique du groupe d'espace $F43m$ (n° 216)

Les atomes du type II sont situés en : $(0,0,0)$, $(0,1/2,1/2)$, $(1/2,0,1/2)$, $(1/2,1/2,0)$, et les atomes du type VI en : $(1/4,1/4,1/4)$, $(1/4,3/4,3/4)$, $(3/4,1/4,3/4)$, $(3/4,3/4,1/4)$ [23].

Chaque atome est entouré de quatre atomes de l'autre espèce, placés aux sommets d'un tétraèdre régulier (figure I.4).

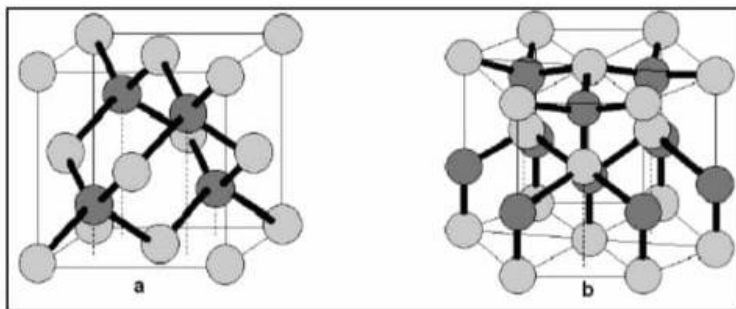


Figure I.4: Structures cristallographiques des composés semi-conducteurs II-VI:

a: sphalérite, b: wurtzite[23].

I.6.1.2. Structure wurtzite

Dans ce cas les atomes A et B sont disposés sur deux réseaux hexagonaux décalés l'un par rapport à l'autre de $3/8$ du paramètre c . De même que pour la structure cubique, un atome de type II est entouré de quatre atomes de type IV disposés aux sommets d'un tétraèdre régulier

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Ceux sont finalement les bandes Γ_6 et Γ_8 qui bordent la bande interdite.

Quant à la bande de valence, Γ_8 , elle se compose de deux bandes de courbure différente, d'où deux masses effectives : une lourde et une légère. La bande de forte courbure est celle des trous dits légers (lh : light holes), l'autre est celle des trous lourds (hh : heavy-holes).

I.6.2.1. Gap direct et gap indirect

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde k . Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de k : on dit que le semi-conducteur est à gap direct [27].

Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de k différentes : on dit que le semi-conducteur est à gap indirect; c'est le cas du silicium et du germanium.

Cette distinction entre matériaux semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante, particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons [28].

En effet, lors de la transition d'un électron de la BV vers la BC ou de la recombinaison électron-trou, il faut conserver l'énergie (relation scalaire) et l'impulsion (relation vectorielle).

La transition d'énergie minimale entre ces deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect.

Cette différence oriente le choix des matériaux pour les applications optoélectroniques [29].

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

I.6.2.2. Transitions inter bandes

Au sein d'un semi-conducteur on différencie les transitions radiatives de celles qui sont non radiatives.

Les transitions radiatives dites inter-bande sont à leur tour classifiées selon la configuration des bandes du semi-conducteur en transitions directes et indirectes (avec intervention d'un phonon) [30]:

↳ Les transitions directes ou verticales

Dans le processus d'absorption directe, un photon est absorbé par le cristal avec création d'un électron et d'un trou. Comme le minimum de la bande de conduction est à la même valeur de k que le maximum de la bande de valence (figure I.6), la transition optique a lieu sans changement significatif de k , car le photon absorbé a un très petit vecteur d'onde [31]. Ces transitions sont très efficaces dans le cas des semi-conducteurs II-VI.

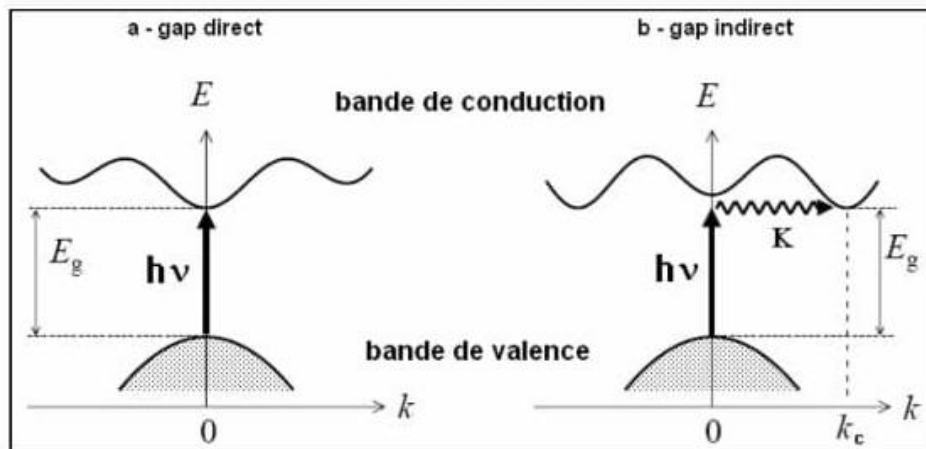


Figure I.6 : Transitions inter bandes a) directe b) indirecte [31].

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

↳ Les transitions indirectes

Dans le processus d'absorption indirecte la largeur minimale de la bande interdite fait intervenir des électrons et des trous séparés par un vecteur d'onde non négligeable.

Dans ce cas une transition directe correspondant à la largeur minimale de la bande interdite ne peut satisfaire à la condition de conservation du vecteur d'onde; ce processus fait intervenir en plus de l'électron et du photon, un phonon [32].

Si un phonon de vecteur d'onde K et de fréquence Ω est créé par ce processus, alors nous avons d'après les lois de conservation :

$$k(\text{photon}) = k_c + K \sim 0 \dots \dots \dots \text{(I.9)}$$

$$h\nu - E_p = E_g \text{ (émission de phonon d'énergie } E_p = \hbar\Omega) \dots \dots \dots \text{(I.10) ou}$$

$$h\nu + E_p = E_g \text{ (absorption de phonon) } \dots \dots \dots \text{(I.11)}$$

L'énergie du phonon est, en général, bien inférieure à E_g (0,01 à 0,03 eV). Dans ce processus d'absorption, un photon est absorbé avec création de trois particules: un électron, un trou et un phonon; ce type de processus est moins probable que celui de l'absorption directe.

Les semi-conducteurs II-VI sont à gap direct [33] et possèdent une bande interdite suffisamment élevée. Ces propriétés leur confèrent un intérêt particulier pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques fonctionnant dans les régions proche UV et visible du spectre de la lumière.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Ils luminescent dans l'ultraviolet avec le MgTe, le rouge avec le CdTe, voire l'infrarouge grâce à l'incorporation de mercure. C'est en particulier dans l'infrarouge que les tellures ont trouvé leur principale application (domaine militaire). Les diodes électroluminescentes vertes à base de ZnTe et les diodes lasers jaunes-vertes à base de ZnSe sont des exemples de luminescence dans le visible. [34]

I.7. La Piézoélectricité

I.7.1.Définition

La piézoélectricité, qui littéralement veut dire pression (piézo signifie pression en Grec) et électricité a été expliquée par Pierre et Jacques Curie en 1880. Cady a défini la piézoélectricité de la façon suivante: «polarisation électrique produite par des contraintes mécaniques dans les cristaux se rapportant à certaines classes, la polarisation étant proportionnelle à la contrainte et changeant». Deux effets existent: l'effet piézoélectrique direct défini comme étant l'apparition de charges électriques par l'application d'une pression et l'effet piézoélectrique inverse caractérisé par l'apparition d'une déformation à l'application d'un champ électrique, dont la nature (expansion ou contraction) dépendant de la polarité. L'effet direct peut être utilisé dans les capteurs, tandis que l'effet indirect est à la base des actionneurs [35].

L'épaisseur de la céramique augmente si le champ électrique appliqué est dans le même sens que le champ électrique de polarisation (P). Si l'on inverse le sens du champ électrique, l'allongement change de signe, c'est-à-dire que l'on passe d'une dilatation à une compression.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

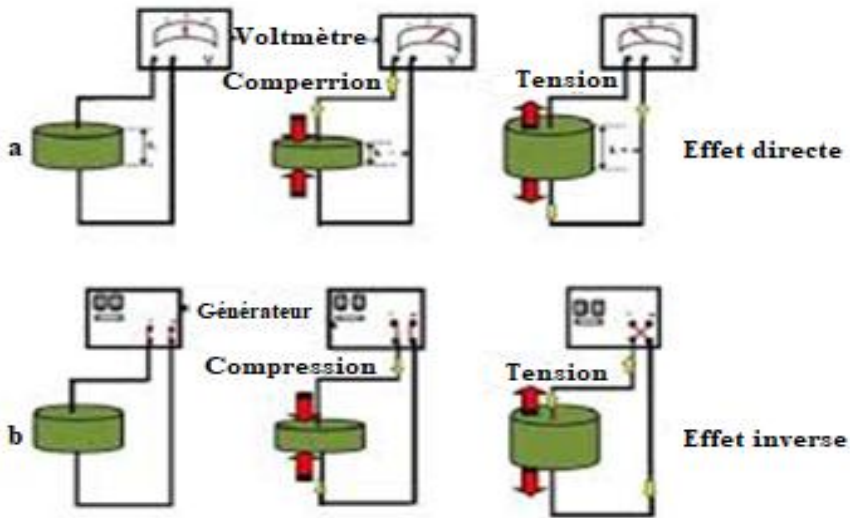


Figure I.7 : Illustration des effets Piézoélectriques d'un matériau en céramique: a) Effet direct b) effet inverse [35].

Figure I.7 : Illustration des effets Piézoélectriques d'un matériau en céramique: a) Effet direct b) effet inverse [35].

I.7.2. La piézoélectricité naturelle

Certains cristaux existant naturellement tel que le Quartz sont piézoélectriques. La maille du Quartz est composée d'atomes de Silicium portant une charge électrique positive et d'atomes d'oxygène portant une charge électrique négative. Sur la figure I.8, on voit bien qu'en l'absence de déformation, le barycentre des charges positives est confondu avec celui des charges négatives (représenté par le point noir au milieu). Par contre, si l'on applique une force de compression, la maille cristalline se déforme de telle sorte que les barycentres des

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

charges positives et négatives s'écartent. Ainsi, sera créé un dipôle électrique qui, par réaction, va faire apparaître des charges de signes opposés sur les deux électrodes, c'est l'effet piézoélectrique direct. Au contraire, si l'on crée une différence de potentielle entre les électrodes pour y apporter des charges électriques, c'est alors la maille cristalline qui se déforme pour rétablir l'équilibre des forces électrostatiques, c'est l'effet inverse ou réciproque [36].

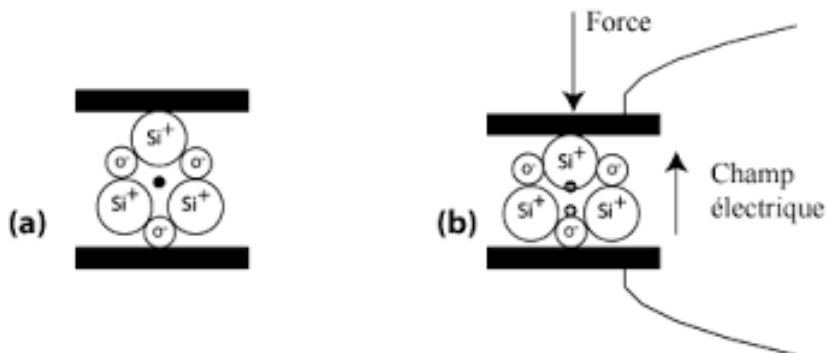


Figure I.8 : Piézoélectricité du Quartz naturel à l'équilibre (a) et avec une force appliquée (b) [36].

I.7.3. Origine de la piézo-électricité

Dans les solides cristallins, la piézoélectricité est directement liée à la symétrie des cristaux et se manifeste par une polarisation de la maille. Ce moment dipolaire est créé par la séparation du centre de gravité des charges positives et de celui des charges négatives, suite aux déformations sous l'action de contrainte [37].

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Les propriétés de symétrie des cristaux ont une importance fondamentale pour l'existence ou non de la piézoélectricité. Tout corps présentant un centre de symétrie ne peut être piézoélectrique alors que les cristaux ne possédant pas de centre de symétrie peuvent l'être.

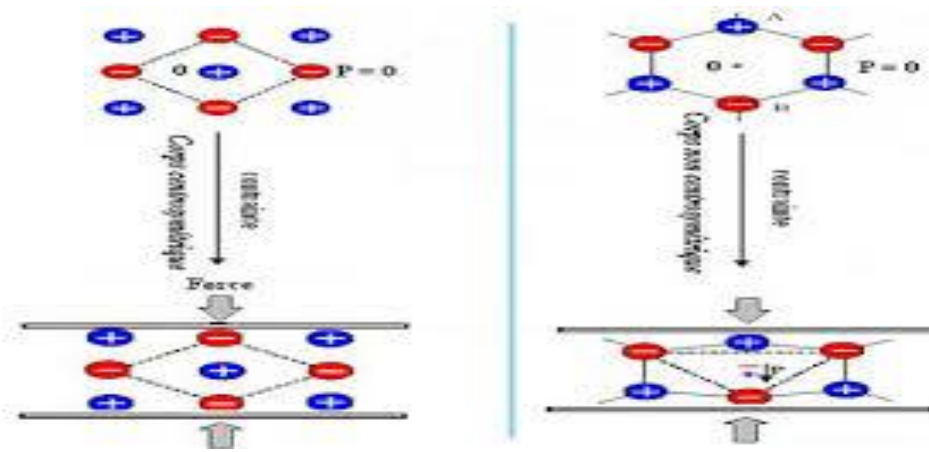


Figure I.9 : Représentation schématique de l'apparition de la piézoélectricité[37].

I.7.4. Phénomène de la piézoélectricité

On appelle piézoélectricité, la propriété que possèdent certains matériaux (cristaux, céramiques, polymères ou composites) à pouvoir transformer une énergie électrique en une énergie mécanique. La charge électrique est proportionnelle à la contrainte mécanique imposée : c'est l'effet piézoélectrique direct l'effet réciproque, encore appelé effet inverse, fait que l'application d'un champ électrique externe provoque une déformation mécanique du matériau. Ce sont les frères Curie qui ont observé et expliqué l'effet direct en 1880. Mais c'est Lippmann qui suggéra théoriquement l'effet inverse qui fut confirmé expérimentalement par les frères Curie.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

La piézoélectricité peut se définir comme un phénomène de couplage entre énergie élastique et énergie électrique (relation entre deux variable : électrique et mécanique et viceversa). Ces effets piézoélectriques ne peuvent être observés que sur des isolants [38].

I.7.5. Propriétés générales des PZT

Les céramiques sont des matériaux inorganiques, non métalliques obtenu suite à la mise en forme d'une poudre et un traitement thermique à haute température. Elles sont très dures et très rigides (supportent bien des tensions très élevées), elles résistent à la chaleur, à l'usure, aux agents chimiques et à la corrosion. Leur principale inconvénient est la fragilité (se casse facilement sous une sollicitation).

Les propriétés générales des céramiques découlent des propriétés de leurs liaisons chimiques, de leur état (cristallin ou amorphe) et de leur microstructure [39].

a. Liaisons chimiques

Les éléments qui entrent dans la composition des céramiques sont liés entre eux par des liaisons fortes, covalentes ou ioniques, et forment des composés hétéro polaires (anion et cation). Les propriétés générales qui découlent de ces liaisons sont :

- Mauvaise conductivité de l'électricité et de la chaleur par les céramiques. Donc on les utilise comme diélectriques et comme isolants thermiques.
- Les céramiques ont des températures de fusion très élevée due à la forte stabilité des liaisons ioniques et covalentes. Donc on les utilise largement comme matériaux réfractaires [40].

b. Microstructure

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

La plupart des céramiques sont des matériaux polycristallins, c'est à dire comportant un grand nombre de microcristaux bien ordonnés (grains) reliés par des zones moins ordonnées (joins de grains) [41].

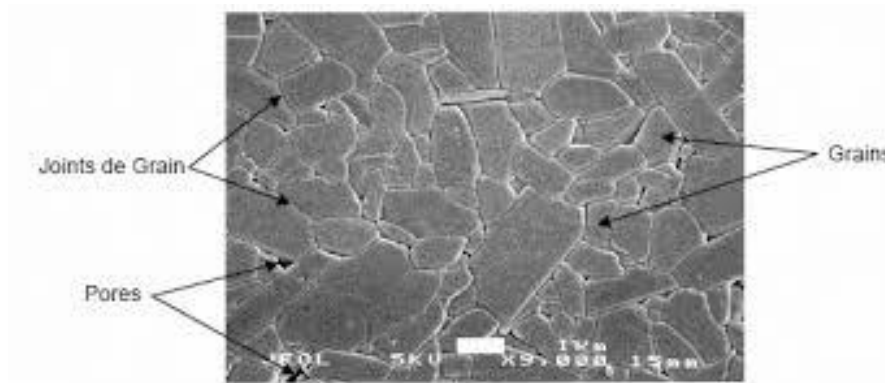


Figure I.10: Microstructure typique d'une surface céramique.

I.7.6. Matériaux piézoélectriques

Rapidement après la découverte de la piézoélectricité, plusieurs matériaux ayant cette caractéristique ont été trouvés. Néanmoins des nouveaux matériaux continuent à apparaître, toujours avec des meilleures caractéristiques et performances. Maintenant les matériaux, leurs présentations, leurs tailles, peuvent s'adapter à leurs applications pratiques et non l'inverse comme on le faisait il y a quelques années. C'est pour cela que les innovations dans le domaine de la piézoélectricité sont à l'ordre du jour.

Les matériaux piézoélectriques peuvent être soit des cristaux ou matières minérales naturelles, soit des créations de l'homme [42].

➤ **Cristaux naturels**

- Berlinite

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

- Quartz
- Topaze
- **Céramiques et cristaux fabriquées par l'homme**
- Phosphate de gallium
- Titanate de barium
- Sodium tungstane
- Lithium niobate
- Titanate zirconate de plomb nommé PZT par ses sigles en anglais. Ses propriétés piézoélectriques sont efficaces pour fabriquer des outils de type capteurs ou actionneurs. Les plaques piézoélectriques que l'on a achetées aux Etats-Unis sont en PZT.
- Sodium potassium
- Niobate
- Ferrite de bismuth
- Titanate de bismuth

La performance des différents matériaux est différente, leur prix et accessibilité sont tout à fait inégaux. La plupart des matériaux sont encore très rares, et par conséquence, trop chers. Il n'y a que quelques entreprises qui les fabriquent et distribuent. La piézoélectricité reste encore un domaine qui se renouvelle chaque jour mais qui manque de recherche et d'investissement. C'est pour cela que dans notre pays presque tous les matériaux piézoélectriques artificiels peuvent être considérés comme inexistant [43].

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

I.7.7. Caractéristiques piézoélectrique

Le phénomène piézoélectrique se manifeste par la conversion de l'énergie électrique en énergie mécanique et réciproquement.

Trois types de coefficients interviennent :

- Des coefficients purement électriques.
- Des coefficients purement mécaniques.
- Des coefficients mixtes qui traduisent le couplage entre les grandeurs électriques et les grandeurs mécaniques [44].

a. La constante piézoélectrique de charge d_{mn}

Elle indique la charge produite par une force d'unité où la déformation produite par un potentiel donné [45].

➤ Effet direct (à champ constant)

densité de charge sur l'électrode normale à l'axe m

$$d_{mn} = \frac{\text{densité de charge sur l'électrode normale à l'axe m}}{\text{contrainte suivant l'axe n}} \quad (C/N)$$

contrainte suivant l'axe n

➤ Effet inverse (à effort constant)

Déformation relative suivant l'axe n

$$d_{mn} = \frac{\text{déformation relative suivant à l'axe n}}{\text{champ électrique suivant l'axe m}} \quad (m/V)$$

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Champ électrique suivant l'axe m

b. La constante piézoélectrique de tension g mn

Elle indique le gradient de potentiel causé par un effort donné, ou réciproquement la contrainte produite par une densité de charge donnée [46].

➤ Effet direct (à induction constante)

Champ électrique suivant l'axe m

$$g_{mn} = \frac{\text{champ électrique suivant l'axe m}}{\text{contrainte suivant l'axe n}} \quad (\text{V.m/N})$$

Contrainte suivant l'axe n

➤ Effet inverse (à effort constant)

déformation relative suivant l'axe n

$$g_{mn} = \frac{\text{déformation relative suivant à l'axe n}}{\text{densité de charge sur l'électrode normale à l'axe m}} \quad (\text{m}^2/\text{C})$$

densité de charge sur l'électrode normale à l'axe m

Les deux indices des coefficients piézoélectriques (m, n) désignent respectivement la direction de l'axe de polarisation et celui de la déformation de l'échantillon.

I.7.8. Couplage électromécanique

La caractérisation des cristaux et des céramiques piézoélectriques peut être effectuée par des tenseurs piézoélectriques, diélectriques et élastiques, en tenant compte de toutes les formes

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

des lois de comportement. Les facteurs de couplage sont des coefficients sans dimensions qui sont utiles pour la description d'un matériau piézoélectrique particulier sous une configuration de contrainte et de champ électrique particuliers pour la conversion de l'énergie stockée sous l'action d'une action mécanique ou électrique. Les facteurs de couplage sont notamment constitués de combinaisons des coefficients piézoélectriques, diélectriques et élastiques. Comme ils sont sans dimensions, [47] il est évident que les facteurs de couplages servent à fournir une comparaison utile entre les différents matériaux piézoélectriques indépendamment de la spécificité des valeurs de permittivité ou d'élasticité, dont les deux peuvent varier largement.

Le concept de l'amortissement piézoélectrique shunté (PSD) repose sur la transformation, via un transducteur piézo céramique collé à la structure vibrante, de l'énergie mécanique en une énergie électrique qui est dissipée par le composant résistif d'un circuit électronique de shunt. L'efficacité de la conversion énergétique est reconnue mesurable par le coefficient de couplage électromécanique (CCEM) intrinsèque (matériau), et il a été démontré que la performance du PSD dépend particulièrement du coefficient de couplage électromécanique généralisé (effectif), la mesure de la conversion d'énergie des patches quand ils sont collés à, ou intégrés dans une structure d'accueil. En outre, il a été montré que l'amortissement ajouté est proportionnel à ce paramètre [48]. Le circuit de shunt peut être résistif, résonant et capacitif, avec une capacité positive ou négative. De plus, la commutation (switch) entre les deux types de connexions électriques circuit ouvert (CO) et court-circuit (CC), ou entre le (CO) et des circuits résistifs ou résonants shuntés, peut aussi réduire les vibrations.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Au cours des trois dernières décennies, le concept PSD a fait l'objet d'intenses recherches. Son évaluation expérimentale et son estimation ont été conduites sur des structures simples, telles que des barres, des poutres, des plaques et des anneaux. De loin, la poutre en flexion libre avec des patchs piézo céramiques symétriques (colocalisés) était la structure la plus expérimentée utilisant des circuits de shunt divers allant d'un circuit de résistance simple jusqu'au plus complexe[49]. Dans le cas de patchs multiples, la direction de polarisation et les connexions électriques (le câblage) de leurs électrodes affectent l'état de déformation de structure. Ainsi, quand les patchs ont la même direction de polarisation, la connexion électrique parallèle est exigée ; tandis que quand ils ont des directions de polarisation opposées, la connexion électrique en série est nécessaire. Dans les deux cas, des champs électriques opposés sont produits dans les patchs pour que lorsque le patch inférieur s'allonge, le patch supérieur se contracte créant ainsi une flexion pure ascendante de la poutre en flexion libre [50].

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

Références

- [1] S. Saib, N. Bouarissa, Phys. Stat. Sol. B 244 (2007) 1063
- [2] F. Mezrag, W. Kara Mohamed, N. Bouarissa, Physica B 405 (2010) 2272
- [3] N. Bouarissa, Infrared Phys. Technol. 39 (1998) 265
- [4] A. Gueddim, S. Zerroug, N. Bouarissa, J. Lumin. 135 (2013) 243
- [5] L. Hannachi, N. Bouarissa, Superlattice. Microstruc. 44 (2008) 794
- [6] C. Kittel, 1998, Physique de l'état solide, édition Dunod, Paris .
- [7] F. Lévy, 1995, Physique et technologie des semi-conducteurs, Presses polytechnique et universitaire romandes CH-1015, Suisse.
- [8] L. Berger, 1996, Semiconductor Materials CRC Press. P 116 .ISBN 978-0-8493- 8912-2
- [9] T. Floyd, 2004, Electronique: Composants et systèmes d'application, Ed. Reynald Goulet inc.
- [10] N. Ashcroft ,N. Mermin, 2002, Physique des solides », Ed EDP Science, France.
- [11] B. Olivier, 2003 , Physique des Solides, des Semi-conducteurs et dispositifs, Université de Rennes 1.
- [12] A. Abdelali, Role du rayonnement dans l'élaboration et l'étude de nanoagrégats semi conducteurs de ZnS, Thèse de Magister, Université de Constantine, Algérie
- [13] K. Jeriouat, Optimisation du rendement des cellules photovoltaïques à hétérojonctions GaInP/GaAs, Université de Tlemcen, Algérie
- [14] F. Bourouba, Modélisation et simulation des contacts métal-semi-conducteur à arrière inhomogène, Université de Sétif, Algérie

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

- [15] Journal of Electron Devices, Vol. 5, 2007, pp. 122-126, Etude de la jonction PN d'un semi-conducteur.
- [16] Sari-Ali, B. Benyoucef, B. Chikh-Bled, Etude de la jonction PN d'un semiconducteur à l'équilibre thermodynamique, Université Abou-BakrBelkaïd, Tlemcen, Journal of Electron Devices, Vol. 5, 2007, pp. 122-126.
- [17] S.M. Sze and KWOK. Ng, Physics of semiconductor devices, third edition, WileyInterscience, 2007.
- [18] T. Lee, K. Ohmori, C.S. Shin, D. G. Cahill, I. Petrov, J. E. Greene, Phys. Rev. B., 71 (2005) 144106
- [19] D.G. Sangiovanni, V. Chirita, L. Hultman, Phys. Rev. B., 81 (2010) 104107
- [20] Philippe ROUX, Théorie générale simplifiée des semiconducteurs, jonction PN au silicium, effet transistors bipolaire, 2008.
- [21] T. Desrues, Développement de cellules photovoltaïques à hétérojonctions silicium et contacts en face arrière, Thèse de doctorat, université de Lyon, 2009.
- [22] C. Kittel – Physique de l'état solide, Dunod Paris(1983).
- [23] M. Wautelet, Techniques de l'ingénieur - RE 19-1 (2004).
- [24] Maïlys Grau, Réalisation de nouvelles structures de cellules solaires photovoltaïques à partir de couches minces de silicium cristallin sur substrat de silicium préparé par frittage de poudres, thèse de doctorat, L'institut national des sciences appliquées de Lyon, 2012, HAL archives-ouvertes.fr

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

- [25] L.CHIBANE, O. BOUSSOM, Etude des cellules à base de matériaux organique, Thèse d'ingénieur, Université MM.TIZI-OUZOU, 2006
- [26] A. Chovet et P. Planson, “Physiques des semi-conducteurs”, Cours de l'école polytechnique universitaire de Marseille, (2004).
- [27] L. Lasne, “Physique et technologie des composants de puissance”, de Bordeaux, 2001.
- [28] Ecole nationale supérieure polytechnique “dispositifs et circuits micro-onde”, Cours de l'université de Yaoundé I.
- [29] “Les semi-conducteurs”, Cours de l'université du Maine, [En ligne]. Available: http://ressources.univ_lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/cours_elec/semicon.pdf
- [30] S. M. Sze « Physics of Semiconductor Device », (2nd edition) Wiley Inter-Science, 1981.
- [31] V. P. Zhukov, V. A. Gubanov, O. Jepsen, N. E. Christensen, and O. K. Anderson, J. Phys. Chem. Solids 49, 841 (1988).
- [32] D. R. Hamann, Phys. Rev. B 40, 2980 (1989).
- [33] N. Troullier, J. L. Martins, Phys. Rev. B 43, 1993 (1991).
- [34] L. E. Koutsokeras, G. Abadias, Ch. E. Lekka, G. M. Matenoglou, D. Anagnostopoulos, G. A. Evangelakis, P. Patsalas, Appl. Phys. Lett., 93 (2008) 011904
- [35] S. H. Jhi and J. Ihm, Phys. Rev. B., 56 (1997) 13826
- [36] G. M. Matenoglou, Ch. E. Lekka, L. E. Koutsokeras, G. Karras, C. Kosmidis et al. J. Appl. Phys., 105 (2009) 103714

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

- [37] D. Holec, M. Friák, J. Neugebauer, P. H. Mayrhofer, Phys. Rev. B., 85 (2012) 064101
- [38] PowderDiffraction File, Joint Committee on PowderDiffraction Standards, Swarthmore, - TiN)δ-TaN), 38-1420 (δPA, 1998, Cards 32-1283
- [39] G.M. Matenoglou, L.E. Koutsokeras, P. Patsalas, Appl. Phys. Lett., 94 (2009) 152108
- [40] L. Qian and al, Microstructural characteristics and electrical properties of xPb(Mg1/3 Ta2/3)O3-(0.1-x)Pb(Mn1/3 Sb2/3)O3-0.9Pb(Zr0.52 Ti0.48)O3 high power piezoelectric ceramics, Mat. Sc. Eng., Vol. 163, (2009), 145–150.
- [41] M.M.S. Pojucan, M.C.C. Santos, F.R. Pereira, M.A.S. Pinheiro and M.C. Andrade, Piezoelectric properties of pure and (Nb5+ + Fe3+), Ceramics International, Vol. 36, (2010), 1851–1855.
- [42] A. Y. DANTSIGER and E. G. FESENKO, Relation between the Main Electro-Physical and Structural Parameters of Ferro- (Piezo-) Electric Ceramics and Methods of Their Changing, J. phys. Soc. Japan, Vol 28, p325 - 327, (1970)
- [43] W. Long, W. Chung-Chuang, W. Tein-Shou and L. His-Chuan, Piezoelectric properties of modified PZT ceramics, J. Phys. C: Solid State Phys., Vol. 16, (1983), 2813- 2821.
- [44] A. Boutarfaia and S.E. Bouaoud, Tetragonal and Rhombohedral Phase Co-Existence in the System: PbZrO3-PbTiO3-Pb(Fe1/5, Ni1/5,Sb3/5)O3, Ceramics International, Vol. 22, No . 4, (1996), 281-286.
- [45] IEEE, IEEE Standards on piezoelectricity. ANS n° 176-187, (1988).
- [46] R. L. Forward, Electronic damping of vibrations in optical structures, Appl. Opt. 18, (1979) 690-697.

Chapitre I : Notions fondamentales sur les semi-conducteurs: propriétés piézoélectriques et constantes de couplage électromécanique

[47] M. Naillon, R.H. Coursant, F. Besnier, Analyse de structures piézoélectriques par une méthode d'éléments finis. *Acta Electronica* 25 (1983) 341-362.

[48] IRE, IRE Standards on piezoelectric crystals: determination of the elastic, piezoelectric, and dielectric constants. *Proc. IRE* 46 (1958) 764-778.

[49] S.H. Chang, N.N. Rogacheva, C.C. Chou, Analysis methods for determining electromechanical coupling coefficients of piezoelectric elements. *IEEE Trans Ultras. Freq. Contr.* 42 (1995) 630-640.

[50] N.W. Hagood, A.VonFlotow, Damping of structural vibrations with piezoelectric materials and passive electrical networks. *J. Sound Vib.*, 146 (1991) 243-268.

Chapitre II:

La méthode du pseudo-potentiel

II.1.Introduction

Le pseudo potentiel a été proposé dans les années 1930 par Fermi pour l'étude des états atomiques des couches minces [1,2]. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Phillips et Kleinman [3,4] qui se sont basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W). Ainsi, le théorème d'annulation de Phillips Kleinman [3,4] qui est pris de la méthode de sondes planes orthogonalisées, a montré que les électrons de valence présentent expérimentalement un potentiel répulsif lorsqu'ils sont proches du cœur, ce potentiel répulsif agit pour tenir les électrons de valence en dehors du cœur.

Finalement, on obtient par effet d'annulation le "pseudo-potentiel".

Ceci est traité par l'utilisation de la méthode des éléments finis non linéaires (N.F.E.M) ou autrement dit une méthode pour résoudre l'équation de Schrödinger.

II. 2. Formulation mathématique

Le potentiel du cristal est faible, donc la résolution de l'équation de Schrödinger, est faite à partir de la méthode des N.F.E.M.

La fonction d'onde cristal est donnée par:

$$\psi = \Phi + \sum b_c \Phi_c \dots\dots\dots (II.1)$$

La fonction d'onde doit être orthogonale aux états du cœur, c'est à dire:

$$\langle \Phi_c | \psi \rangle = 0 \dots\dots\dots (II.2)$$

Ce qui nous donne:

$$\psi = \Phi - \sum \langle \Phi_c | \Phi \rangle \Phi_c \dots\dots\dots (II.3)$$

Avec ψ est la fonction d'onde, elle satisfait l'équation de Schrödinger:

$$H\psi = E\psi \dots\dots\dots (II.4)$$

En remplaçant la fonction d'onde par son expression dans l'équation de Schrödinger on obtient:

Chapitre II : La méthode du pseudo-potentiel

$$H\Phi + \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle = E\Phi \dots\dots\dots (II.5)$$

PhillipsetKleinmanontnotéque l'orthogonalizationdesondesplanesauxétatsducœur estformellementéquivalentea l'introductiond'unterme répulsiveVR, donconpeut réécrirel'équation(II-5)d'unefaçoncondenséecommesuit[5,6],

$$(H+V_R)\Phi = E\Phi \dots\dots\dots (II.6)$$

Ou

V_R est le potentiel répulsif

$$V_R \Phi = \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle \dots\dots\dots (II.7)$$

Onestdonc arrivera formuler l'équation qui est satisfaite par Ψ sans oublier de noter que la valeur propre de l'énergie E n'est pas un pseudo-énergie mais la vraie énergie correspondant à la vraie fonction d'onde.

Le pseudo-potentiel est définie comme étant la somme du potentiel cristallin et le potentiel V_R :

$$H+V_R = T+V_C+V_R = T+V_P \dots\dots\dots (II.8)$$

Ou $V_P=V_C+V_R$ est le pseudo-potentiel, la pseudoéquation de Schrödinger est donnée par:

$$(H+V_R)\Phi = E\Phi \dots\dots\dots (II.9)$$

Le potentiel V_R s'oppose au potentiel attractif cristallin V_C .

Il est important de noter que V_R est très faible ce qui justifie l'utilisation de la méthode N.F.E.M pour résoudre l'équation de Schrödinger [7].

L'équation (II-9) devient:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_c + V_R \right) \Phi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \dots\dots\dots (II.10)$$

Chapitre II : La méthode du pseudo-potentiel

VP devient faiblement attractif dans la

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

Le pseudo-potentiel est considéré comme une perturbation, les éléments

matrices du potentiel V_R sont données par [6]:

$$\langle \Psi | V_R | \Psi \rangle = \sum_c (E^V - E^c) \int dr \Psi^{c*} \Psi |^2 \dots \dots \dots (II.11)$$

Etant donné que E^V est Légèrement supérieure à E^c , donc V_R est
 toujours positif ainsi V_R est très faible, d'où! 'utilisation

de la théorie des électrons presque libres pour le calcul des niveaux de valences.

Si on néglige l'effet du cœur, le pseudo-potentiel devient local et dépend explicitement de la position. Si on néglige l'effet du cœur, le pseudo-potentiel peut-être écrit comme suit [8]:

$$V_R = v(\mathbf{R}, r) = \sum_c (E - E_c) | \mathbf{Q}(\mathbf{r}) \rangle \langle \mathbf{Q}(\mathbf{r}) | \mathbf{Q} \rangle \dots \dots \dots (II.12)$$

Où la fonction Q dépend de r .

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

L'expression non locale du pseudo-potentiel est réservée pour le moment angulaire, puisque V_R est la somme sur les états occupés du cœur.

II.3. Les modèles du pseudo-potentiel

La méthode du pseudo-potentiel est basée principalement sur des données expérimentales telle que l'analyse des paramètres cristallins au rayon X, la réflexion et l'absorption des cristaux [5]. Il existe deux sortes de pseudo-potentiel: le pseudo-potentiel local et le pseudo-potentiel non local.

II.3.1. Le modèle local

Dans cette méthode, pour déterminer les fonctions propres et les valeurs propres de l'équation de Schrödinger, on s'attend nécessairement que l'on ait toujours une forme du potentiel. En fait, un potentiel local dépendant de la variable r , reste le modèle le plus simple pour ce fait, plusieurs formes du potentiel ont été proposées.

Le premier est considéré comme un potentiel Coulombien à une distance large et un potentiel constant dans la région du cœur, il est présenté sous la forme suivante [9].

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & r > r_c \\ -\frac{Z_e}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad \text{.....(II.13)}$$

Ou:

Z : est la valence atomique.

r_c : est le potentiel utilisé pour ajuster les données atomiques. Abarenkov et Heine ont introduit un potentiel considéré comme constant dans la région du cœur, dans ce cas le potentiel est [10],

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad \text{.....(II.14)}$$

Chapitre II : La méthode du pseudo-potentiel

Enfin Ashcroft a proposé dans son modèle une autre forme de potentiels similaire qui est beaucoup utilisée, c'est le potentiel du cœur inoccupé. Ashcroft a proposé dans son modèle une autre forme de potentiels similaire qui est beaucoup utilisée, c'est le potentiel du cœur inoccupé « the empty core potential » donnée par [9,11],

$$V(r) \begin{cases} = -\frac{Z_e}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \dots \dots \dots (II.15)$$

II.3.2. Le modèle non local

Le pseudo potentiel est à l'origine non local, il dépend de r et de l'énergie E . La dépendance en énergie peut être ainsi introduite, en remplaçant la constante A par des constantes différentes $A_l(E)$ dans la région du cœur et cela pour chaque valeur l du nombre Quantique.

On peut donc écrire le pseudo potentiel non local sous la forme suivante [12],

$$V^P = V_{NL}(r, E) = \sum A_l(E) f_l(r) P_l \dots \dots \dots (II.16)$$

Où

A_l : Une fonction dépendante de l'énergie des états du cœur.

f_l : Une fonction qui repasse l'effet des états du cœur.

P_l : L'opérateur projecteur de la l ème composante des moments angulaires.

La fonction $f_l(r)$ peut prendre plusieurs formes telles que la forme Gaussienne, Heine-Abarenkov et la forme de Ashcroft.

II.3.2.1. Le modèle de Heine-Abarenkov [13,14]

Heine et Abarenkov ont proposé une méthode pour obtenir un modèle de pseudo-potentiel pour les métaux. L'information sur l'ion est déduite des niveaux d'énergie atomiques tirés des données spectroscopiques plutôt qu'un calcul élaboré de mécanique quantique. Le pseudo-potentiel peut se mettre sous la forme suivante (Figure II-1):

$$V^l = A^l \Theta(R^l - r) \dots\dots\dots (II.17)$$

Où:

A^l : caractérise la profondeur du puits de potentiel carré. $S(R^l - r)$: est une fonction stimulant l'effet du cœur. R^l représente le rayon du cœur ionique.

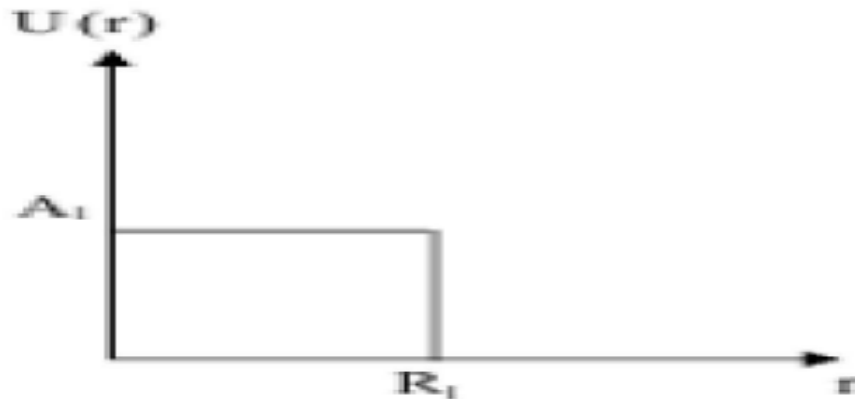


Figure II.1. Fonction de Heine-Abarenkov

II.3.2.1. Le modèle de Gauss [15-17]

La fonction de Gauss est donnée par l'expression [18],

$$F(r) = \exp(-r/R)^2 \dots\dots\dots (II.18)$$

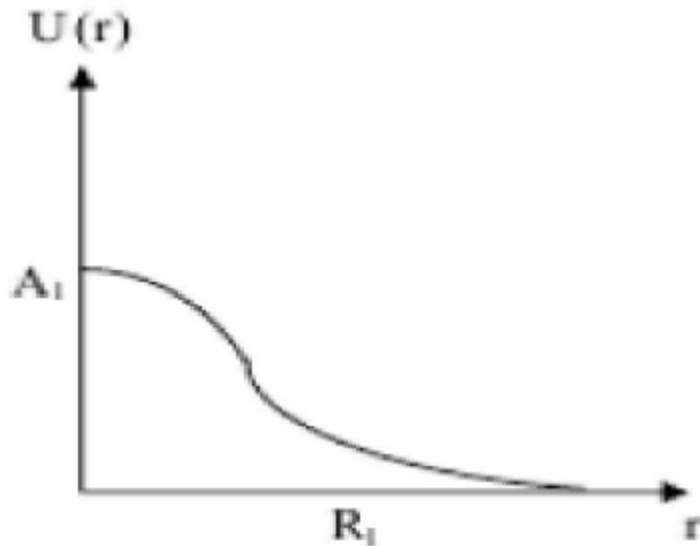


Figure II.2 .Fonction de Gauss

II.3.2.3. Le modèle d'Ashcroft [11,19]

Dans ce modèle: $F(r)=0$ (II-19)

Cette dernière

équation confirme que le potentiel répulsif du δ^1 l'orthogonalisation de la fonction d'onde des électrons

de conduction sur les états du cœur, invalide le potentiel

coulombien à l'intérieur du cœur ionique.

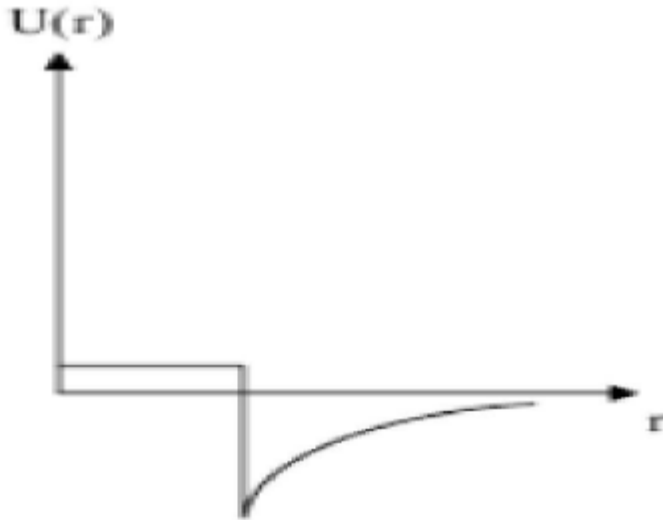


Figure II.3. Fonction d'Ashcroft

II.4. La méthode empirique du pseudo potentiel (l'E.P.M)

C'est une autre variante de la méthode des pseudo potentiels permettant de déterminer les paramètres entrant dans le calcul de la structure de bande électronique, en utilisant des données expérimentales [20]. On peut dire que cette technique a été appliquée avec succès aux semi-conducteurs de structure spécifique, diamant et zinc blende [21-26].

L'EPM a deux approximations importantes :

- L'approximation empirique locale.
- L'approximation empirique non locale.

II.4.1. La méthode empirique de pseudo-potentiel local (EPM)

La méthode empirique des pseudo-potentiels est appliquée dans les semi-conducteurs diamants ou zinc-blende, l'étude des ressources matinales est basée sur une approximation locale [27]. Cette méthode est très importante dans les calculs de la structure des bandes électroniques [28].

Dans cette technique, la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelques termes de $V(G)$ que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations faites sur la réflexion et l'absorption des cristaux. On peut dire autrement que l'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de formes $V(G)$ du pseudo-potentiel $V_p(r)$ que l'on imagine être une superposition linéaire des pseudo-potentiels atomiques et peut être écrit comme suit [29],

$$V_p(r) = \sum_G V_a(r - R - \tau) \dots \dots \dots (II.20)$$

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:

$$V_p(r) = \sum_{G \in G_0} V(G) \exp(iG \cdot r) \dots \dots \dots (II.21)$$

Avec

$$V(G) = \sum_a S_a(G) V_a(G) \dots \dots \dots (II.22)$$

$V_a(G)$ est le facteur de forme

$S(G)$ est le facteur de structure donné par [30],

Chapitre II : La méthode du pseudo-potentiel

$$S_a(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(iG \cdot r) \dots \dots \dots \quad (\text{II.23})$$

N_a étant le nombre d'atomes de base.

Dans le cas des composés $A^N B^{&N}$ cristallisant dans la structure zinc blende, les facteurs de forme symétrique et antisymétrique sont donnés par [31].

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) + V_B(G)] \dots \dots \dots (\text{II.24})$$

$$V^A(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) - V_B(G)] \dots \dots \dots (\text{II.25})$$

Avec :

V_s est le facteur de forme symétrique.

V_a est le facteur de forme antisymétrique.

Le potentiel $V(G)$ est attractif pour les G faibles et devient positif à cause de la nature répulsive du cœur atomique pour les grands G et lorsque G devient petit le potentiel devient faible [8].

Cette approximation se base sur l'interpolation des facteurs de forme à partir des expériences comme l'expérience de la réflectivité pour la raison que le potentiel $V(G)$

est plus faible pour les petites valeurs de G , on se limite à quelques facteurs de forme [30,31].

La procédure de calcul de la méthode EPM est illustrée dans le diagramme suivant:

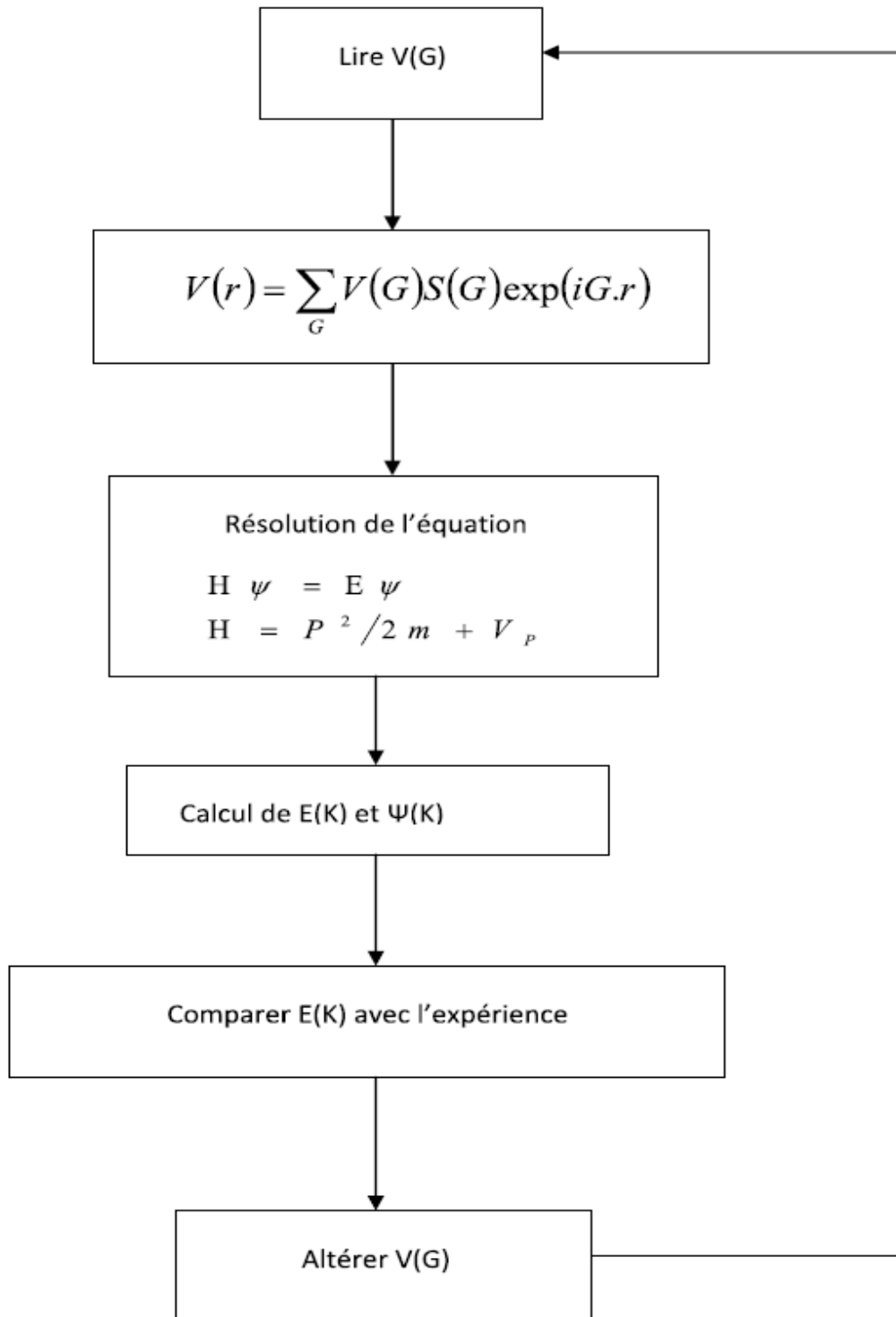


Figure.II.4. Diagramme de la procédure de calcul par EPM.

References

- [1] R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* Cambridge University Press, 2004
- [2] R.D.Lide, *CRCHandbookofChemistryand Physics*, 87th ed (2007)
- [3] J.C.Phillips, L.Kleinman, *Phys.Rev.* 116(1959) 287
- [4] J.C.Phillips, *Phys.Rev.* 112(1958) 685
- [5] F. D. Mumaghan, J. Wang, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 300 (1944) 244
- [6] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot, D. Wolf, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 12627
- [7] T. Kobayashi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci. , Tokoku. Univ.* 2(1993) 7
- [8] A. KanGarlu, *Phys. Rev. B* 38(1998) 9790
- [9] K. Ichino, Y.-H. Wu, Y. Kawakami, S. Fujita, S. Fujita, *J. Crystal Growth* 117 (1992) 527
- [10] J.C.Phillips and K.C.Pandy, *Phys.Rev. Lett.* 30 (1973) 787
- [11] N.W.Aschroft, *Phys.Rev.Lett.* 23(1966) 48
- [12] G.-D. Lee, M. H. Lee, J. Ihm, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 1459
- [13] L.V.Abarenkov, V.Heine, *Phil.Mag.* 13(1965) 559
- [14] M.L.Cohen and V.Heine, *Solid State Physics* 24, Eds, H. Emenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic press, New York) p37-248 (1970)
- [15] V.Heine, *Solid State Phys.* 24 (1970) 1
- [16] M.Gelletal., *Phys.Rev.B* 35(1987) 1196
- [17] H.Nara and A. Morita, *J.Phys.Soc.Jpn.* 21(1966) 1852
- [18] F. Mezrag, PhD thesis, University of Biskra, Algeria, 2012

Chapitre II : La méthode du pseudo-potentiel

- [19] W.A. Harisson, «Pseudopotentials in the theory of metals», Benjamin, New York, 1966, 336 p.
- [20] A. G. Areshkin, G. S. Pekar, G. N. Polisskii, T. B. Popova, L. G. Suslina, D. L. Fedorov, Sov. Phys.-Solid State 28 (1986) 2109
- [21] K. Kassali, N. Bouarissa, Microelectron. Eng. 54 (2000) 277
- [22] N. Bouarissa, Infrared Phys. Technol. 39 (1998) 265
- [23] F. Benmakhlouf, A. Bechiri, N. Bouarissa, Solid State Electron. 47 (2003) 1335
- [24] N. Bouarissa, S. Bougouffa, A. Kamli, Semicond. Sci. Technol. 20 (2005) 265
- [25] N. Bouarissa, Phys. B 406 (2011) 2583
- [26] N. Bouarissa, Solid State Electron. 44 (2000) 2193
- [27] N. Bouarissa, R. Bachiri, Physica B 322 (2002) 193
- [28] M.L. Cohen
and J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Berlin: Springer (1989)
- [29] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285
- [30] J.M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287
- [31] S. Yu. Davydov, S. K. Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947 and references cited therein

Chapitre III:

Résultats et discussion

Résultats et discussion

Dans ce travail, nous avons effectué un calcul semi-empirique à l'aide de la méthode du pseudopotentiel [1-6], afin d'étudier la piézoélectricité et les constantes de couplage électromécanique des semi-conducteurs de type II-VI. Les semi-conducteurs d'intérêts sont: ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe. Nous avons examiné et discuté les quantités physiques suivantes: facteurs de formes du pseudopotentiel, constante piézoélectrique, constante de déformation, constante diélectrique statique, constante diélectrique de haute fréquence et constante de couplage électromécanique. Les calculs semi-empiriques exigent l'ajustement de certains facteurs de formes dites symétriques et antisymétriques des semi-conducteurs d'intérêts. Pour cela, nous avons effectué un ajustement des facteurs de formes décomposés binaires semi-conducteurs de type II-VI, à savoir: ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe en utilisant la méthode des moindres carrés non linéaires comme décrit dans les références [7-9]. Nos résultats concernant les facteurs de formes symétriques et antisymétriques'ajustés décomposés semi-conducteurs d'intérêts dans la phase zinc-blende et à température ambiante sont présentés dans le tableau III.1.

Chapitre III : Résultats et discussion

Tableau III.1. Facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés, exprimés en Ryd des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.

Matériau	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
ZnS	-0.312939	0.021262	0.170554	0.030061	0.116	0.129269
ZnSe	-0.225333	0.00707	-0.007421	0.116490	0.129940	-0.100180
CdS	-0.23	0.01	0.06	0.134	0.096	0.019
CdSe	-0.404199	0.174645	0.340923	0.1311	0.28	0.572395
ZnTe	-0.247293	0.021262	0.255724	0.030061	0.116	0.290414
CdTe	-0.396388	0.198275	0.459548	0.1311	0.28	0.708145

Figure III.1 représente la variation du facteur de forme symétrique $V_S(3)$ en fonction de la constante de réseau pour les semi-conducteurs binaires de type II-VI, a savoir: ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe. On remarque que lorsqu'on augmente la constante de réseau en allant de ZnS vers CdTe, $V_S(3)$ varie d'une façon non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(3)$ en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$V_S(3) = - 8.71 + 2.95a - 0.26 a^2 \dots\dots\dots(III.1)$$

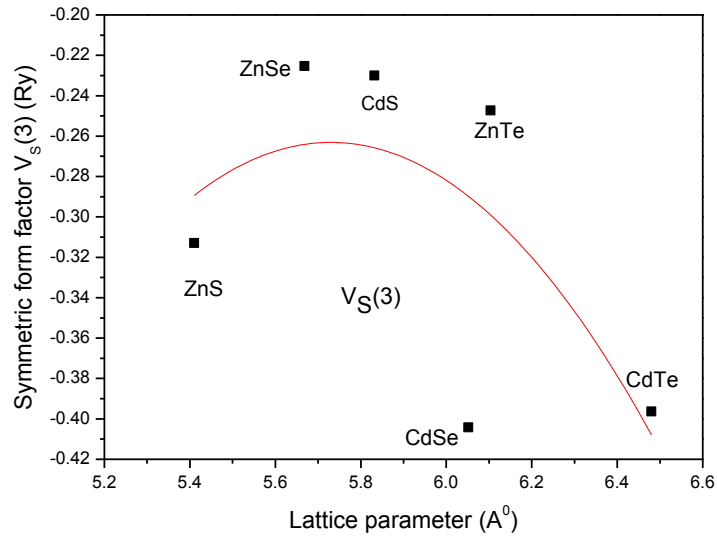


Figure III.1. Variation du facteur de forme symétrique $V_S(3)$ en fonction de la constante de réseau.

Figure III.2 montre le changement du facteur de forme symétrique $V_S(8)$ en fonction de la constante de réseau pour les semi-conducteurs binaires de type II-VI, à savoir: ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe. Notons que lorsqu'on augmente la constante de réseau en allant de ZnS vers CdTe, $V_S(8)$ varie d'une façon non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(8)$ en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$V_S(8) = 5.42 - 1.98 a + 0.18 a^2 \quad (\text{III.2})$$

Figure III.2. Variation du facteur de forme symétrique $V_S(8)$ en fonction de la constante de réseau.

Chapitre III : Résultats et discussion

Figure III.3 représente la dépendance en constante de réseau du facteur de forme symétrique $V_S(11)$ pour les semi-conducteurs binaires ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe. On remarque que lorsqu'on augmente la constante de réseau en allant de ZnS à CdTe, $V_S(11)$ change d'une manière non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(11)$ en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$V_S(11) = 15.02 - 5.36 a + 0.48 a^2 \dots\dots\dots (III.3)$$

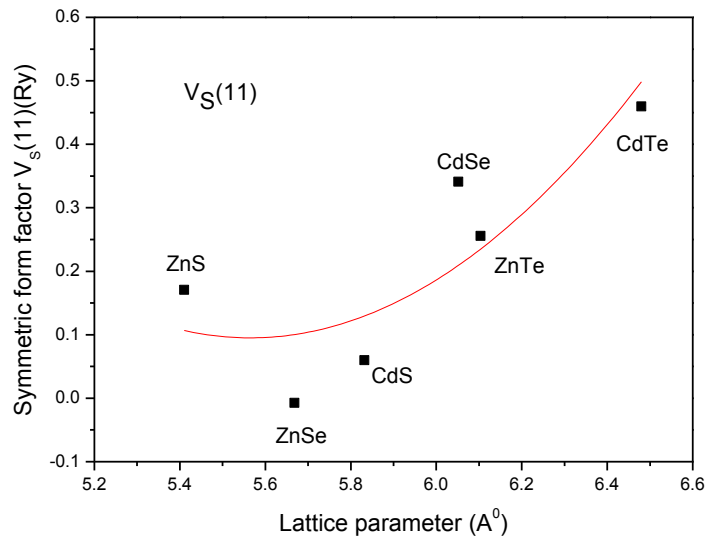


Figure III.2. Variation du facteur de forme symétrique (11) en fonction de la constante de réseau.

Figure III.4 représente le changement du facteur de forme antisymétrique $V_A(3)$ en fonction de la constante de réseau pour les semi-conducteurs binaires ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe. Nous observons que l'augmentation de la constante de réseau mène à une variation

Chapitre III : Résultats et discussion

non-monotone de $V_A(3)$. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(11)$ en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$V_A(3) = -3.18 + 1.05 a - 0.08 a^2 \dots\dots\dots (III.4)$$

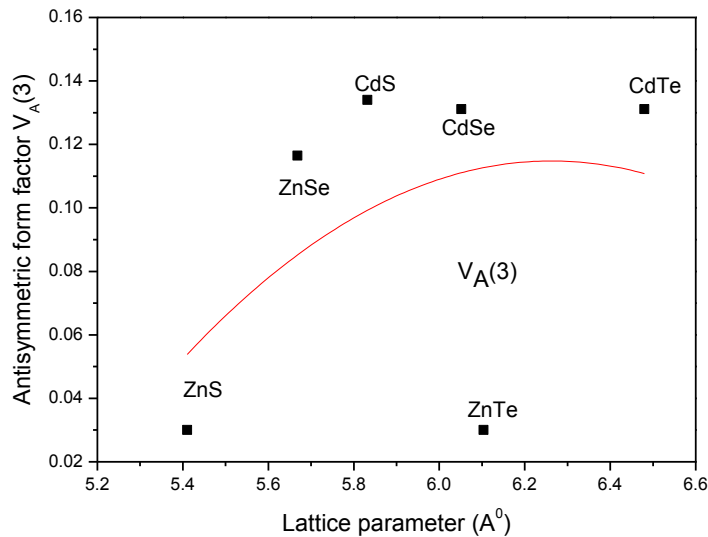


Figure III. 3. Variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(3)$ en fonction de la constante de réseau.

La variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(4)$ en fonction du paramètre de réseau pour les semi-conducteurs binaires ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe en allant de ZnS a CdTe est illustrée dans la Figure III.5. Notons que l'augmentation du paramètre de réseau affecte $V_A(4)$ d'une manière non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(11)$ en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$V_A(4) = 4.21 - 1.52 a + 0.14 a^2 \dots\dots\dots (III.5)$$

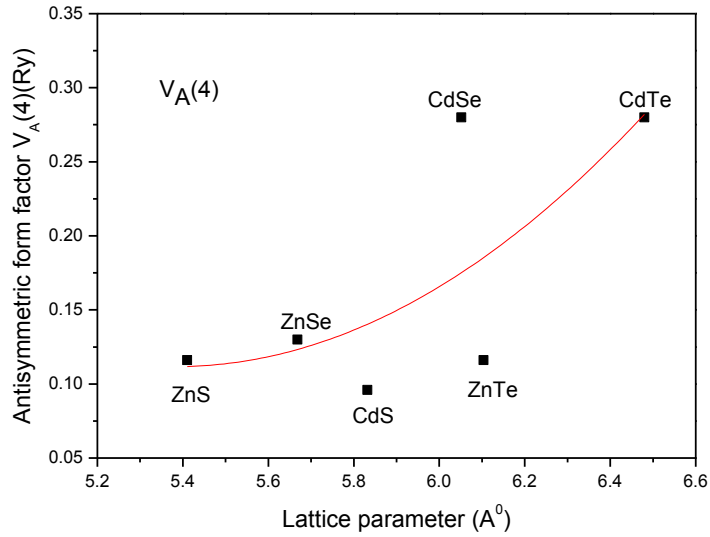


Figure III.4. Variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(4)$ en fonction de la constante de réseau.

Figure III.6 représente la variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(11)$ en fonction de la constante de réseau pour les semi-conducteurs binaires ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe. On remarque que lorsqu'on augmente la valeur de a , $V_A(11)$ varie d'une façon non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de $V_S(11)$ en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$V_A(11) = 19.73 - 7.26 a + 0.67 a^2 \dots\dots\dots (III.6)$$

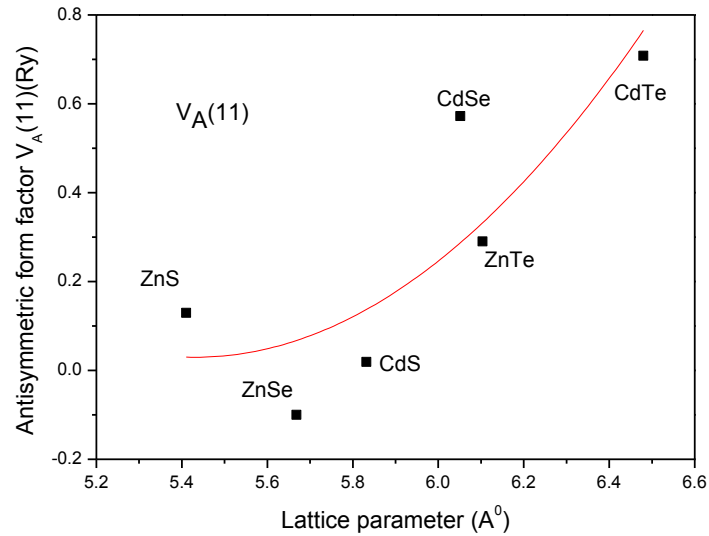


Figure III.5. Variation du facteur de forme antisymétrique $V_A(11)$ en fonction de la constante de réseau.

La connaissance des constantes piézoélectriques est indispensable pour les dispositifs électroniques et une forte polarisation piézoélectrique peut affecter l'énergie de transition optique en raison de l'effet Stark confiné quantique [10-12].

La structure zinc-blende est supposée pour les semi-conducteurs sous investigation, et par conséquent nous ne traitons qu'une seule composante du tenseur de contrainte piézoélectrique, à savoir la constante de contrainte piézoélectrique e_{14} . Ce dernier est obtenu en utilisant le modèle d'Adachi tel que décrit dans la ref. [13] et en suivant la même procédure utilisée plus récemment par Bouarissa [14]. Nos résultats concernant e_{14} pour le zinc-blende ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe sont présentés dans le tableau III.2. En absence d'autres résultats dans la littérature pour comparer, nos valeurs calculées sont pour référence.

Chapitre III : Résultats et discussion

Tableau III.2. Constante de contrainte piézoélectrique e_{14} exprimée en C/m^2 et constante de déformation d_{14} exprimée en 10^{-12} m/V des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.

Matériau	e_{14}	d_{14}
ZnS	0.046	0.63
ZnSe	0.048	1.33
CdS	0.066	2.48
CdSe	0.07	1.96
ZnTe	0.042	1.06
CdTe	0.074	2.94

La variation de la constante de contrainte piézoélectrique e_{14} en fonction du paramètre de réseau des semi-conducteurs d'intérêts est représentée sur la figure III.7. Nous observons qu'en augmentant le paramètre de réseau lors du passage de ZnS a CdTe, e_{14} varie de manière on-monotone. Il est intéressant de noter que les valeurs de e_{14} varient d'un semi-conducteur l'autre. Cela peut être attribué la différence entre la polarisabilité électrique des atomes de Cd et Zn. L'interpolation quadratique de nos données d' e_{14} en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$e_{14} = 0.13 - 0.05 a + 0.01 a^2 \dots\dots\dots(III.7)$$

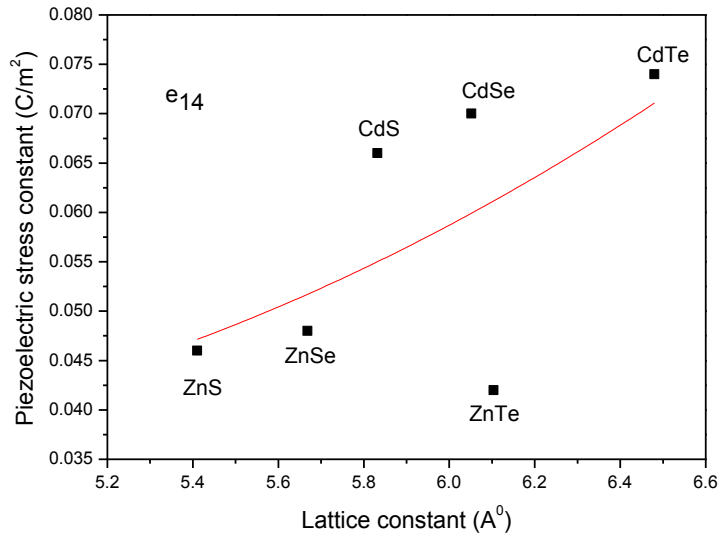


Figure III.6. Variation de la constante piézoélectrique e_{14} en fonction de la constante de réseau.

Nous avons aussi calculé la constante piézoélectrique de déformation d_{14} en utilisant la relation suivante [14]:

$$d_{14} = \frac{e_{14}}{C_{44}} \dots\dots\dots (III-8)$$

ou C_{44} est la constante élastique de rigidité. Cette dernière a été calculée en utilisant la relation suivante qui a été obtenue en se basant sur le modèle de champ de la force de valence [15,16],

$$C_{44} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{7C_{11} + C_{12}} \dots\dots\dots (III-9)$$

Chapitre III : Résultats et discussion

Dans ce présent travail, les constantes élastiques C_{11} et C_{12} ont été calculée en utilisant la même méthodologie que celle utilisée par Bouarissa [17-21], ou C_{11} et C_{12} sont exprimées par les relations suivantes:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[4.37 \frac{\eta^2}{m} (5 + \lambda) (1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} - 0.6075 (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\eta^2}{m} \right] \dots \dots \dots (III.10)$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[4.37 \frac{\eta^2}{m} (3 - \lambda) (1 - \alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} + 0.6075 (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\eta^2}{m} \right] \dots \dots \dots (III.11)$$

Dans les équations (III.10) et (III.11), m représente la masse de l'électron, d représente la distance entre les plus proches voisins qui est égale a:

$$d = \frac{\sqrt{3}a}{4} \quad (III.12) \quad \alpha_p \text{ représente la polarité définie par Vogl [22,23] comme suit:}$$

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (III.13)$$

et λ est un paramètre sans dimension qui a une valeur de 0.738 [24].

Nos résultats concernant d_{14} pour les semi-conducteurs binaires ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende sont présentés dans le Tableau III.2. En absence d'autres résultats dans la littérature pour comparer, nos valeurs calculées sont encore une fois pour référence.

La variation de la constante de déformation piézoélectrique d_{14} en fonction du paramètre de réseau des semi-conducteurs d'intérêts est représentée sur la figure III.8. Nous

Chapitre III : Résultats et discussion

observons qu'en augmentant le paramètre de réseau lors du passage de ZnS a CdTe, d_{14} varie de manière non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de d_{14} en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$d_{14} = -8.75 + 1.84 a - 0.01 a^2 \dots\dots\dots(III.14)$$

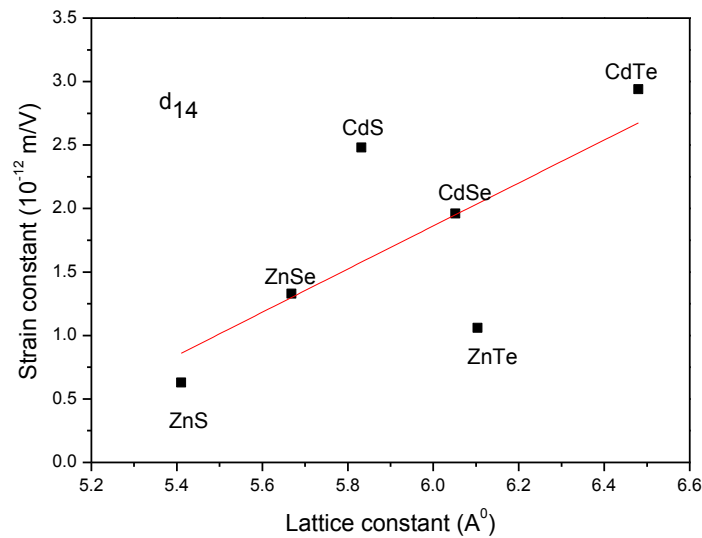


Figure III.7. Constante de déformation piézoélectrique en fonction de la constante de réseau.

L'un des paramètres importants des propriétés optiques des matériaux semi-conducteurs est l'indice de réfraction (n). La connaissance précise de n est nécessaire pour la conception du guide d'ondes afin d'optimiser les performances des dispositifs [25,26] dans la conception des lasers ahétéro-structures et dans les applications de cellules solaires [27,28]. Dans la contribution actuelle, n est calculé en utilisant la relation modifiée de Moss [29] comme

Chapitre III : Résultats et discussion

suggéré par Ravinera et Srivastava [30]. Le modèle est préféré a d'autres modèles rapportés dans la littérature car il a fourni un meilleur accord avec les données connues dans la littérature pour les semi-conducteurs II-VI [16,31].

Un autre paramètre optique important des matériaux semi-conducteurs est la constante diélectrique. La connaissance précise de ce paramètre est nécessaire pour concevoir et appliquer correctement les instruments. Dans notre cas ici, la constante diélectrique de haute fréquence (ϵ_{∞}) et la constante diélectrique statique (ϵ_0) sont calculées pour les semi-conducteurs binaires ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende en utilisant une procédure similaire à celle utilisée par Bouarissa et al. [23]. Nos résultats sont présentés dans le tableau III.3. Les données existantes dans la littérature sont également présentées à des fins de comparaison. Nos résultats sont en générale en bon accord avec ceux de la littérature.

Tableau III.3. Constantes diélectrique statique et de haute fréquence des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.

Chapitre III : Résultats et discussion

Matériau	ϵ_0	ϵ_∞
ZnS	5.50 ^{a)}	5.43 ^{a)}
	8.3 ^{b)}	5.1 ^{b)}
ZnSe	9.64 ^{a)}	6.32 ^{a)}
	9.1 ^{c)}	
CdS	11.80 ^{a)}	6.72 ^{a)}
	9.8 ^{d)}	5.4 ^{d)}
CdSe	9.23 ^{a)}	7.99 ^{a)}
ZnTe	7.04 ^{a)}	6.91 ^{a)}
	7.4 ^{c)}	
CdTe	9.90 ^{a)}	8.47 ^{a)}
	10.2 ^{c)}	

^{a)}Present travail; ^{b)} Quoted in Ref. [11] for β -ZnS; ^{c)} Ref. [32]; ^{d)}Quoted in Ref. [11] for c-CdS (calculated or estimated);

La variation des constantes diélectriques statiques et de haute fréquence en fonction du paramètre de réseau des semi-conducteurs d'intérêts sont montrées sur les figures III.9 et III.10, respectivement. Nous observons qu'en augmentant le paramètre de réseau lors du passage de ZnS a CdTe, les deux constantes diélectriques en question varient de manière non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de ϵ_0 et ϵ_∞ en fonction de la constante de réseau (a) donne les relations suivante:

$$\epsilon_0 = -239.17+81.51a-6067a^2 \dots\dots\dots(III.15)$$

$$\epsilon_\infty = -28.54+9.21a-0.54a^2 \dots\dots\dots(III.16)$$

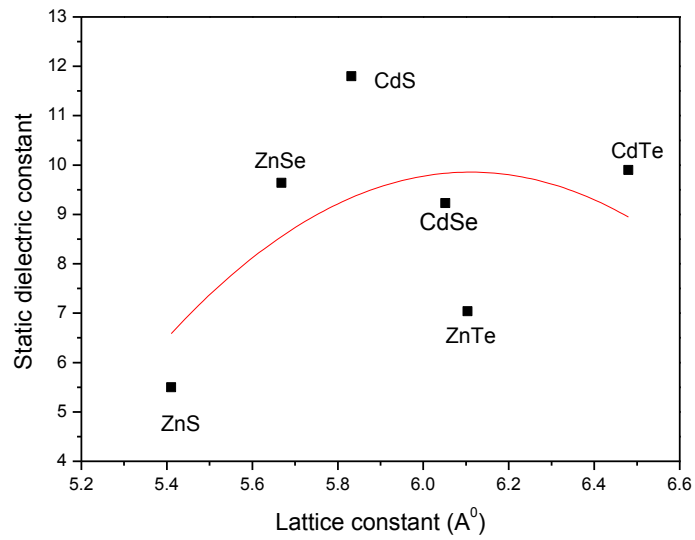


Figure III.8. Constante diélectrique statique en fonction de la constante de réseau.

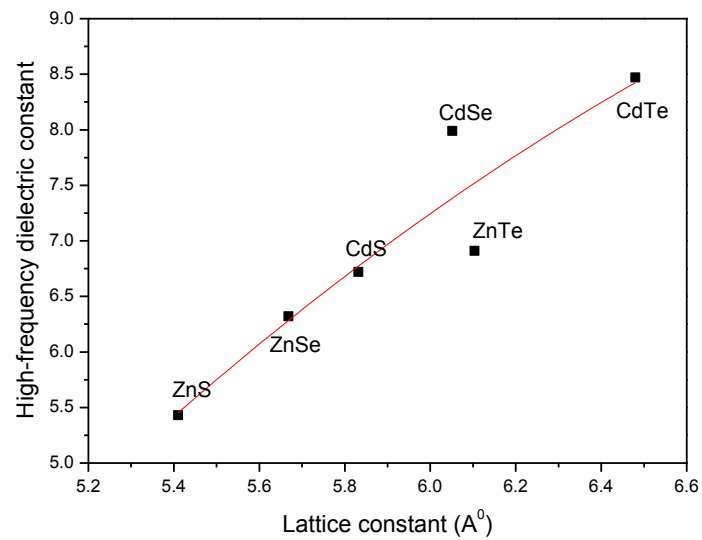


Figure III.9. Constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la constante de réseau.

Chapitre III : Résultats et discussion

Un autre paramètre important pour la caractérisation des matériaux piézoélectriques est la constante de couplage électromécanique k^2 . Ce paramètre décrit la résistance du couplage électromécanique et mesure l'échange d'énergie électrique et mécanique. Dans ce travail, $k^2_{[110]}$ est déterminé en utilisant la relation [14],

$$k^2_{[110]} = \frac{e_{14}^2}{\epsilon_0 \epsilon_s C_{44}} \dots\dots\dots(III.17)$$

Dans l'équation (III.17), ϵ_0 est la permittivité diélectrique de l'espace libre et ϵ_s est le constant diélectrique statique. Pour les paramètres e_{14} et C_{44} , nous avons utilisé les valeurs obtenues dans le travail actuel. Nos résultats concernant $k^2_{[110]}$ pour les semi-conducteurs binaires ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende sont décrits dans le tableau III.4. Là encore, en l'absence de données concernant $k^2_{[110]}$ dans la littérature pour les matériaux en question, a notre connaissance, nos résultats peuvent servir pour référence.

Tableau III.4. Constante de couplage électromécanique des composés semi-conducteurs ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe dans la phase zinc-blende et a température ambiante.

Chapitre III : Résultats et discussion

Matériau	$10^3 \times k_{[110]}^2$
ZnS	0.59
ZnSe	1.05
CdS	1.57
CdSe	1.86
ZnTe	0.91
CdTe	2.59

La variation de la constante de couplage électromécanique en fonction de la constante de réseau est représentée sur la figure III.11. Comme clairement observé sur la figure III.11, l'augmentation du paramètre de réseau lors du passage de ZnS a CdTe, $k_{[110]}^2$ conduit a la variation de $k_{[110]}^2$. Le comportement est non-monotone. L'interpolation quadratique de nos données de $k_{[110]}^2$ en fonction de la constante de réseau (a) donne la relation suivante:

$$k_{[110]}^2 = 16.33 - 6.65a + 0.69a^2 \dots\dots\dots (III.18)$$

Cela indique que le rapport de l'énergie mécanique cumulée en réponse a une entrée électrique ou vice versa change en allant de ZnS a CdTe.

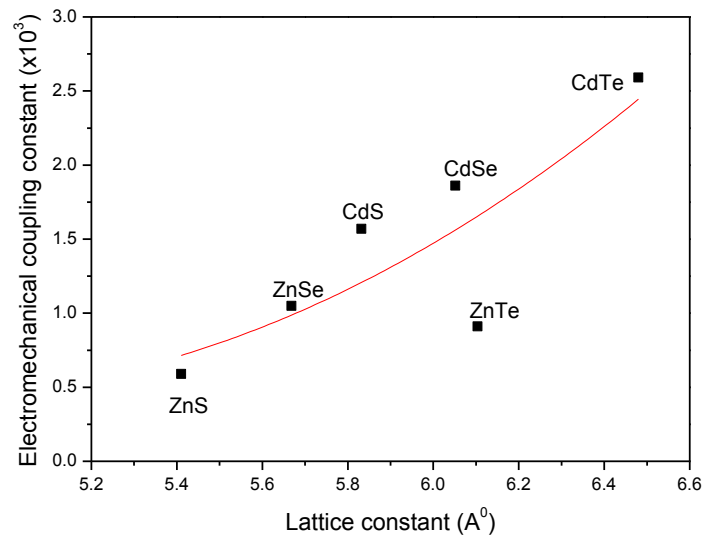


Figure III.10. Constante de couplage électromécanique fonction de la constante de réseau.

References

- [1] R.M. Martin,
Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods Cambridge
University Press, 2004
- [2] R.D. Lide,
CRC Handbook of Chemistry and Physics, 87th ed (2007)
- [3] J.C. Phillips, L. Kleinman, Phys. Rev. 116 (1959) 287
- [4] J.C. Phillips, Phys. Rev. 112 (1958) 685
- [5] F.D. Mumaghan, J. Wang, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 300 (1944) 244
- [6] J. Wang, S. Li, S. Yip, S.R. Phillpot, D. Wolf, Phys. Rev. B 52 (1995) 12627
- [7] T. Kobayashi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci., Tokoku Univ. 2 (1993) 7
- [8] A. KanGarlu, Phys. Rev. B 38 (1998) 9790
- [9] K. Ichino, Y.-H. Wu, Y. Kawakami, S. Fujita, S. Fujita, J. Crystal Growth 117 (1992)
527
- [10] J.C. Phillips and K.C. Pandey, Phys. Rev. Lett. 30 (1973) 787
- [11] N.W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. 23 (1966) 48
- [12] G.-D. Lee, M.H. Lee, J. Ihm, Phys. Rev. B 52 (1995) 1459
- [13] L.V. Abarenkov, V. Heine, Phil. Mag. 13 (1965) 559
- [14] M.L. Cohen and V. Heine, Solid State Physics 24, Eds, H. Emenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, New York) p37-248 (1970)
- [15] V. Heine, Solid State Phys. 24 (1970) 1
- [16] M. Gellertal., Phys. Rev. B 35 (1987) 1196
- [17] H. Nara and A. Morita, J. Phys. Soc. Jpn. 21 (1966) 1852

Chapitre III : Résultats et discussion

- [18] F. Mezrag, PhD thesis, University of Biskra, Algeria, 2012
- [19] W.A.Harisson, «Pseudopotentials in the theory of metals», Benjamin, New York, 1966, 336 p.
- [20] A. G. Areshkin, G. S. Pekar, G. N. Polisskii, T. B. Popova, L. G. Suslina, D. L. Fedorov, Sov. Phys.-Solid State 28 (1986) 2109
- [21] K. Kassali, N. Bouarissa, Microelectron. Eng. 54 (2000) 277
- [22] N. Bouarissa, Infrared Phys. Technol. 39 (1998) 265
- [23] F. Benmakhlouf, A. Bechiri, N. Bouarissa, Solid State Electron. 47 (2003) 1335
- [24] N. Bouarissa, S. Bougouffa, A. Kamli, Semicond. Sci. Technol. 20 (2005) 265
- [25] N. Bouarissa, Phys. B 406 (2011) 2583
- [26] N. Bouarissa, Solid State Electron. 44 (2000) 2193
- [27] N. Bouarissa, R. Bachiri, Physica B 322 (2002) 193
- [28] M.L.Cohen and J.R.Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Berlin: Springer (1989)
- [29] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285
- [30] J.M.Baranowski, J.Phys.C 17 (1984) 6287
- [31] S. Yu. Davydov, S. K. Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947 and references cited therein

Chapitre IV:
Conclusion générale

Conclusion générale

Au cours de ce travail, nous avons étudié la piézoélectricité et les constantes de couplage électromécanique des semi-conducteurs de type II-VI. Les quantités physiques étudiées sont la constante piézoélectrique, constante de déformation, constante diélectrique statique, constante diélectrique de haute fréquence et constante de couplage électromécanique. Les calculs ont été réalisés en utilisant la méthode EPM.

La structure zinc-blende est supposée pour les semi-conducteurs sous investigation, et par conséquent nous ne traitons qu'une seule composante du tenseur de contrainte piézoélectrique, à savoir la constante de contrainte piézoélectrique e_{14} . Ce dernier est obtenu en utilisant le modèle d'Adachi.

Nos résultats montrent la variation des constants diélectriques statiques et de haute fréquence en fonction du paramètre de réseau des semi-conducteurs. Nous observons qu'en augmentant le paramètre de réseau lors du passage de ZnS à CdTe, les deux constantes diélectriques en question varient de manière non-monotone et la variation de la constante de contrainte piézoélectrique e_{14} en fonction du paramètre de réseau des semi-conducteurs. Nous observons qu'en augmentant le paramètre de réseau lors du passage de ZnS à CdTe, e_{14} varie de manière non-monotone. Il est intéressant de noter que les valeurs de e_{14} varient d'un semi-conducteur à l'autre. Cela peut être attribué à la différence entre la polarisabilité électrique des atomes de Cd et Zn. Nos résultats montrent que toutes les caractéristiques d'intérêt changent de manière significative lors de la transition de ZnS à CdTe. Une tentative a été faite pour étendre ces fonctionnalités à l'aide du paramètre réseau. Une telle mise à l'échelle n'a pas été jugée possible.

Résumé

La contrainte piézoélectrique, les constantes de déformation piézoélectrique et le coefficient de couplage électromécanique des composés semi-conducteurs II-VI, à savoir ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe et CdTe ont été examinés. Les calculs sont effectués en utilisant l'approche pseudo-potentiel avec le modèle Adachi où le concept Phillips d'ionique est considéré. Le travail est principalement basé sur le travail que Bouarissa a publié récemment [Philos. Mag. Lett. 99 (2019) 138]. Nos résultats sont comparés au plus près aux données disponibles dans la littérature. Nos résultats montrent que toutes les caractéristiques d'intérêt changent de manière significative lors de la transition de ZnS à CdTe. Une tentative a été faite pour étendre ces fonctionnalités à l'aide du paramètre réseau. Une telle mise à l'échelle n'a pas été jugée possible.

Abstract

The piezoelectric stress, piezoelectric strain constants and electromechanical coupling coefficient of II-VI binary semiconductor compounds, namely ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, ZnTe and CdTe have been investigated. The computations are carried out using a pseudopotential approach combined with the Adachi model where the Phillips concept of ionicity is considered. The work is essentially based on that of recently published by Bouarissa [Philos. Mag. Lett. 99 (2019) 138]. Our results are compared where possible with available data in the literature. Our findings show that all features of interest change significantly when going from ZnS to CdTe. An attempt has been made to scale these features with the lattice parameter. Such scaling is found to be not possible.

المخلص

تم فحص الإجهاد الكهروإجهادي وثوابت الانفعال الكهروضغطية ومعامل الاقتران الكهروميكانيكي لمركبات أشباه الموصلات II-VI التالية ZnS و ZnSe و CdS و CdSe و ZnTe و CdTe. وتم إجراء الحسابات باستخدام تطبيق بسودويوتنسيال مع نموذج اداشي او مفهوم فيليبس للأيونات. يعتمد العمل بشكل أساسي على العمل الذي نشره بو عريسة مؤخرًا [Philos. Mag. Lett. 99 (2019) 138]. تمت مقارنة نتائجنا قدر الإمكان بالبيانات المتوفرة في منشوراته العلمية. تظهر نتائجنا أن جميع خصائص الرئيسية تتغير بشكل كبير أثناء الانتقال من ZnS إلى CdTe. جرت محاولة لتوسيع هذه الوظائف باستخدام إعدادات الشبكة. هذا السلم لم يكن يعتبر ممكنا .

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ