

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT PHYSIQUE

N° : Ph/ APP /15/2021



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : Physique appliquée

**Mémoire présenté pour l'obtention**

**Du diplôme de Master Académique**

**Par : HALLAB Khawla**

**Matériaux pour l'optoélectronique : Propriétés et  
application**

**Soutenu le / /2021 devant le jury composé de:**

Mezrag Fadila

Prof Université de M'sila

Président

Bouarissa Nadir

Prof Université de M'sila

Rapporteur

Benyettou Samia

MCA Université de M'sila

Examineur

**Année universitaire : 2020/2021**



## *Remerciements*

*Nous remercions Dieu Tout-Puissant, qui nous a permis de mener à bien cette recherche scientifique et qui m'a inspiré la santé et le bien-être.*

*Dieu merci,*

*J'adresse mes sincères remerciements et ma gratitude au Prof. Bouarissa Nadir pour toutes les précieuses informations qu'il m'a fournies qui ont contribué à enrichir le sujet de mon étude dans ses divers aspects, et je prie Dieu de le préserver et prolonger sa vie. Je remercie également le professeur vertueux, Dr Mezrag Fadila, pour ses efforts, et l'honneur de mes conseils jusqu'à la fin de cette étude et la mise de Dieu dans la balance de son travail.*

*Je remercie également les honorables membres du comité de discussion, l'examinatrice, Mme "Benyettou Samia", Que Dieu la protège.*

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



## *Dédicaces*

*Je dédie cet humble travail à l'homme qui m'a appris à quel point la patience est le chemin du succès. Mon père bien-aimé, que Dieu prolonge sa vie.*

*A qui sa satisfaction est mon objectif et mon ambition, alors elle m'a beaucoup donné et n'a pas attendu merci, ma mère, mon amour, que Dieu prolonge sa vie.*

*A mon cher mari, Mammeri Abd el Madjid, que Dieu le protège, et mon cher fils, Mammeri Bejad et à mes frères (Achraf, Islam) et mon âme sœur (chahd )et à la famille de mon mari et à mes deux amis (Zhour, Nadia, Abir, Djihad) a tous mes chers amis. À tous mes collègues, Master Class 2021. Mille pardons pour ceux que j'ai oubliés. Pour tous ceux que j'aime.*

*À tous ceux qui m'aiment.*

## ***Table des matières***

Remerciements.....	I
Dédicace.....	II
Table des matières.....	III

<b><i>Introduction générale</i></b> .....	1
---	---

### ***Chapitre1 : Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs***

1.1- Introduction.....	5
1.2- Définition d'un semi-conducteur .....	6
1.2.1- La conduction électrique dans les semi-conducteurs.....	7
1.2.2- La notion de bande d'énergie dans un semi-conducteur .....	7
1.2.3- La notion d'électrons - trous dans les semi-conducteurs.....	9
1.3- Différentes types des semi-conducteurs.....	11
1.3.1- Semi-conducteur intrinsèque.....	11
1.3.2- Semi-conducteur extrinsèque.....	12
a- Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N.....	13
b- Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P.....	14
1.3.3- Un semi-conducteur non dégénéré.....	15
1.3.4- Un semi-conducteur dégénéré.....	16
1.4- Structure de bandes d'énergies.....	17
1.4.1- Gap direct et indirect.....	18
a- Gap direct.....	19

b- Gap indirect.....	19
1.5- Les matériaux semi-conducteurs .....	19
1.5.1- Les semi-conducteurs par groupe.....	19
a- Groupe IV.....	19
b- Groupe III .....	20
c-Groupe II-VI .....	21
1.6- Le dopage des semi-conducteurs.....	22
1.7- Conclusions.....	23
Références bibliographiques .....	24

***Chapitre 2: Effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques du composé semi-conducteur InSb***

2.1- Introduction.....	27
2 .2- Les propriétés physiques des semi-conducteurs .....	27
2.2.1- Les propriétés structurales des semi-conducteurs.....	27
2.2.1.1- Structure cristalline .....	28
2.2.1.2- La constante de réseau.....	31
2.2.2- Les propriétés électronique des semi-conducteurs.....	32
2.2.2.1- Structures de bandes.....	33
2.2.2.2- Bande interdite (gap énergétique).....	33
2.2.2.3- Gap direct et gap indirect .....	35
2 .2.3- Les propriétés électrique des semi-conducteurs .....	36
2.2.3.1- Conductivité électrique.....	36

2.2.4- Les propriétés optiques du semi-conducteur.....	37
2.2.4.1- Notions de base optiques des semi-conducteurs.....	38
2.2.4.2- La Fonction diélectrique.....	39
2.2.4.3- La relation entre un diélectrique et l'indice de réfraction.....	41
2.2.4.4- La constante diélectrique statique $\epsilon(o)$ et de haute fréquence $\epsilon(\infty)$ .....	42
2.2.4.5- Interaction rayonnement - semi-conducteur .....	43
2.3- Les applications des semi-conducteurs.....	44
2.3.1- Les applications en électronique.....	45
2.3.2- Les applications optoélectroniques.....	45
2.4- Les avantages des semi-conducteurs IIIV.....	46
2.5- Effet de la pression sur les semi-conducteurs.....	46
2.5.1- Définition la pression .....	46
2.5.2- L'effet de la pression hydrostatique sur les semi-conducteurs.....	47
2.5.3- L'effet de la pression sur la géométrie de la structure.....	47
2.5.4- Dépendance du paramètre du réseau avec la pression.....	48
2.5.5- L'effet de la pression sur les niveaux électroniques.....	49
2.5.6- La technologie de haut pression.....	49
2.6- Conclusions.....	50
Références bibliographiques .....	51

### ***Chapitre 3 : Résultats et discussions***

3.1- Introduction.....	54
3.2- Étude des propriétés électronique.....	54

3.2.1- Structure de bandes électroniques.....	54
3.2.2- Le gap d'énergie.....	57
3.3- Étude des propriétés optiques.....	61
3.3.1- L'indice de réfraction du composé binaire InSb.....	61
3.3.1.1- Modèle de Moss.....	62
3.3.1.2- Modèle de Ravindra.....	63
3.3.1.3- Modèle de Gupta Ravindra .....	64
3.3.1.4- Modèle de Hervé et Vandamme.....	65
3.3.1.5- Modèle de Reddy et Anjaneyu.....	66
3.4- Étude des propriétés diélectriques.....	68
3.4.1- La constante diélectrique de haute fréquence $\epsilon_{\infty}$ .....	68.
3.4.2- La constante diélectrique statique $\epsilon_0$ .....	70
3.5- Conclusion.....	72
Références bibliographiques .....	73
4- <b>Conclusion générale</b> .....	75
Liste des figures.....	76
Liste des tableaux.....	79

---

# **Introduction générale**

---

## **Introduction générale**

Les matériaux et semi-conducteurs constituent une classe bien définie, qui possède certaines propriétés physiques qui sont une source d'intérêt en termes de connaissances de base et d'applications. Ces facteurs indissociables rendent ce matériau important, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs.

Les semi-conducteurs sont utilisés dans presque tous les équipements les matériaux à base d'alliages semi-conducteurs (ternaires ou quaternaires..) sont électriques et optiques, en raison de leurs propriétés électroniques [1].

Parmi tous les matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe importante, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux. Les composés semi-conducteurs sont considérés comme une classe bien définie des matériaux et cela grâce à la richesse de leur propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectroniques [1].

D'intérêt pratique dans la technologie actuelle de l'optronique ; ils permettent l'élaboration des détecteurs et des émetteurs fonctionnant dans une gamme de longueur d'onde choisie, on peut, en jouant sur la composition de l'alliage, couvrir un grand intervalle de l'énergie du gap [2].

Du côté théorique, les méthodes de calcul de la structure électronique peuvent fournir des données complémentaires importantes au travail expérimental. Les calculs du premier principe, basé sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT), ont fait

preuve dans plusieurs cas de leur utilité, pour comprendre la stabilité et transition de phase structurale des composés semi-conducteur en calculant l'énergie totale [3].

Les calculs des propriétés électroniques sont principalement basés sur la méthode empirique du pseudo potentiel (EPM), alors que les propriétés optiques et diélectrique sont basées sur l'utilisation des formules empiriques, en combinant la méthode du pseudo potentiel au modèle de Harrison [2].

Le travail présenté porte sur l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé semi-conducteur InSb. Notre étude utilise la méthode du pseudo potentiel empirique local. Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électronique, diélectrique et optique des solides. Pour pouvoir expliquer les propriétés du composé InSb.

Les valeurs énergétiques ont été utilisées pour déterminer la structure de bande des composés semi-conducteurs ainsi que les propriétés diélectriques, optiques et électroniques. Ce mémoire se compose de trois chapitres. Après une introduction générale, dans le chapitre un, nous parlerons de notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs, le chapitre deux comprend un rappel: effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques du composé semi-conducteur InSb. Dans le troisième et dernier chapitre, nous présentons les résultats obtenus dans notre étude ainsi que leurs analyses. Enfin, notre travail se termine par une conclusion générale

## **Références bibliographiques**

[1] K. Benatmane, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V (Doctoral dissertation, Batna) (2011).

[2] F. Mezrag, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider-Biskra), (2012).

[3] S. Adachi, Properties of group-iv, iii-v and ii-vi semiconductors (Vol. 16). John Wiley & Sons, (2005).

# **Chapitre 1 :**

---

## **Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs**

---

## **1.1- Introduction**

Les technologies de l'information et de la communication évoluent rapidement grâce à l'industrie des semi-conducteurs. Ces matériaux conducteurs de courant électrique ont des propriétés physiques à mi-chemin entre le métal et l'isolant. Ce sont des composants essentiels de l'électronique et de l'informatique modernes car ils permettent de contrôler la direction et l'intensité du courant.

La famille des semi-conducteurs est très large et va du tableau périodique des éléments à quatre colonnes (Si et Ge) aux composés multi-colonnes tels que: double, triple et quadruple. Le sujet de ce chapitre est une présentation simple sous forme de concepts de base permettant de comprendre les propriétés électriques et structurelles des semi-conducteurs [1].



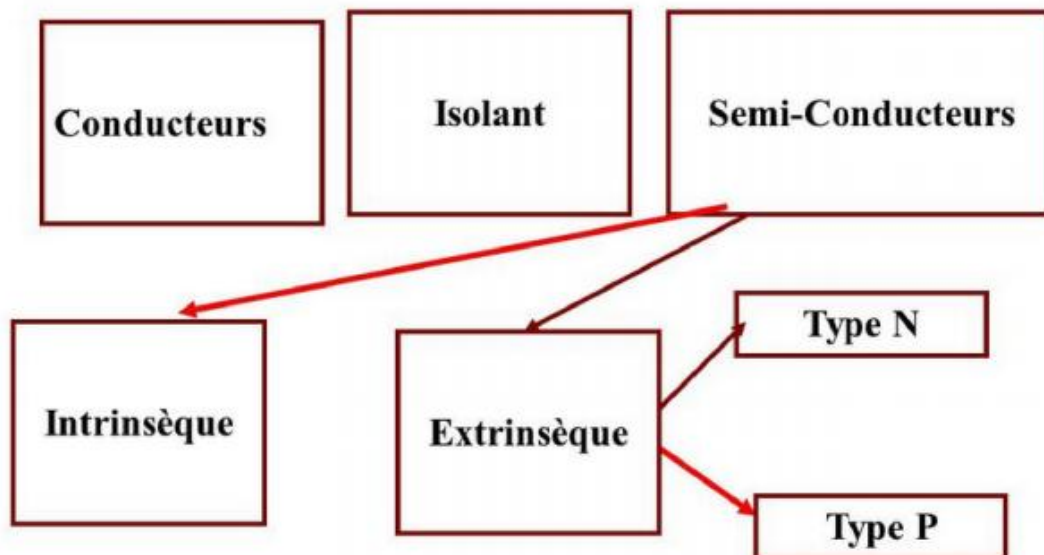
**Figure 1-1** Matériaux semi-conducteurs InSb

## 1.2- Définition d'un semiconducteur

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

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

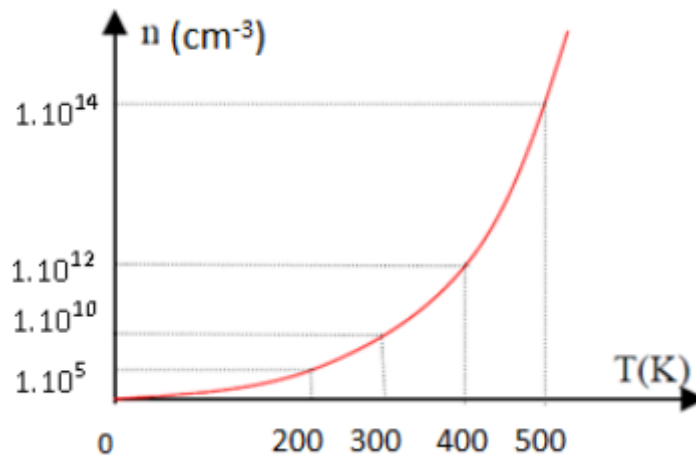
Les semi-conducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique, est intermédiaire entre celle des conducteurs ( $10^6 - 10^{-1}$ ) et celle des isolants ( $10^{-22}$  à  $10^{-14} - 10^{-1}$ ), elle varie dans une grande proportion sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau) [2].



**Figure 1-2** différent matériaux

### 1.2.1- La Conduction électrique dans les semi-conducteurs

Un semi-conducteur serai isolant à une température de 0°K, contrairement à un métal, alors qu'à température plus élevée, il devient un conducteur électronique par excitation thermique, comme c'est indiqué sur le schéma ci-contre 5.



**Figure 1-3** L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium).

Un semi-conducteur peut transporter de l'électricité et devenir conducteur, c'est cette propriété qui est à la source de la forte réactivité des semi-conducteurs leur permette, en fait, d'être d'un intérêt technologique.

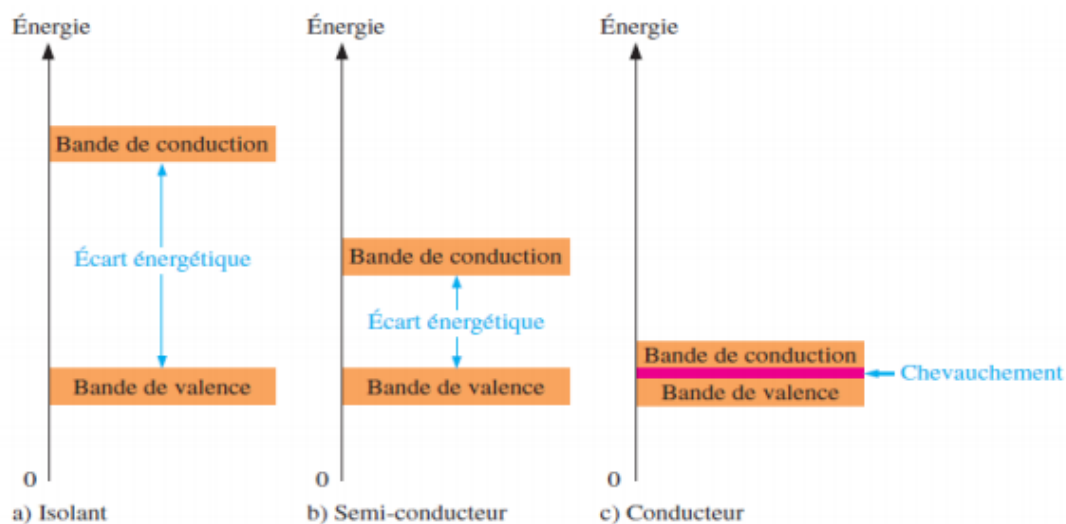
Pour mieux comprendre cette dynamique des électrons responsable du phénomène de conduction dans un semi-conducteur, on fait appel à la théorie de bandes, qui décrit le comportement des électrons, dans le cas ou une excitation leur permet de devenir libres et participent à la conduction [3].

### 1.2.2- La notion de bandes d'énergie

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

## Chapitre 1                      Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs

sauter de la bande de valence à la bande de conduction. Dans les semi-conducteurs, l'énergie de gap décrit l'énergie nécessaire pour permettre à un électron de sauter de la bande de valence vers celle de conduction. En outre, c'est la largeur de cette bande d'énergie qui trace une ligne entre les semi-conducteurs et les isolants [4].



**Figure 1-4** Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux.

Le comportement électrique des semi-conducteurs est modélisé en utilisant la théorie des échelles, qui est un modèle quantitatif en physique du solide, déterminer les énergies admissibles des électrons dans un solide et permet leur compréhension l'idée de conduction électrique, cette théorie vient de la théorie des orbitales moléculaires.

Dans ce modèle, les énergies potentielles de l'électron sont sous cette forme solide les bandes autorisées sont appelées, séparées par d'autres bandes sont appelées bandes des énergies interdites ou diviser. Cet écart correspond à la puissance requise du système passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

Les bandes de faible puissance sont entièrement occupées; Ce sont les soi-disant bandes l'équivalence, par contre, les plages d'énergie élevée sont vides; On les appelle des gangs connectivité.

Un matériau semi-conducteur se caractérise par sa structure de bande :

- ✓ La bande de valence : c'est la bande qui correspond à la bande d'énergie la plus élevée entièrement remplie d'électrons.
- ✓ La bande de conduction : est définie comme le premier niveau énergétique au-dessus de la bande de valence où accèdent les électrons excités.
- ✓ La bande interdite : cette bande représente l'énergie qu'il faut fournir à un électron pour qu'il passe de la bande de valence à la bande de conduction [5].

### **1.2.3- La notion d'électrons - trous dans les semi-conducteurs**

On peut briser une liaison de valence si on apporte une énergie suffisante, on arrache ainsi un ou plusieurs électrons (précédemment engagés dans ces liaisons), ces derniers peuvent passer de la bande de valence vers la bande de conduction : l'électron est libre (il ne participe plus à une liaison cristalline) et peut, par contre, participer à la conduction électrique. Il se comporte comme une particule « quasi-libre » sous l'influence du réseau.

Dans le même temps qu'apparaît un électron libre dans la bande de conduction, apparaît une case (place) vide dans la bande de valence qui peut être occupée par un autre électron de la bande de valence.

A cette place vide qu'on appelle trou est affectée une charge positive. Le rôle important joué par ces particules est dû au fait qu'elles réagissent comme des porteurs des charges.

Les électrons et les trous meuvent dans deux directions opposées sous l'action d'un champ électrique.

On peut dire que la conduction électrique dans un semi-conducteur a pour origine:

- ✓ Les électrons, qui se trouvent dans la bande de conduction.
- ✓ Les états inoccupés ou trous, présents dans la bande de valence [6].

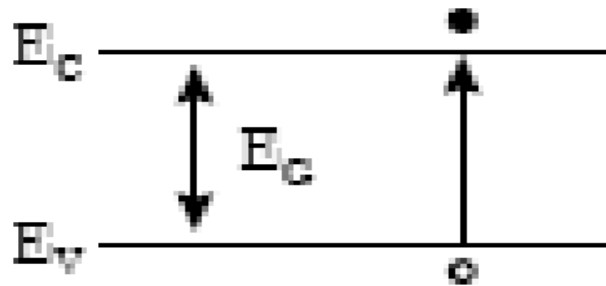


Figure 1-5 La transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction.

L'apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente est donnée sur la figure si dessous :

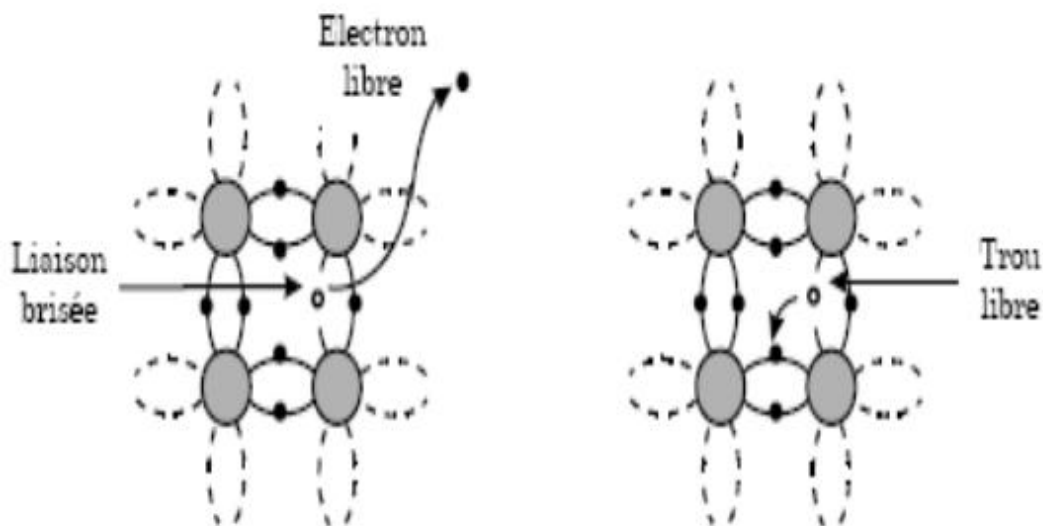
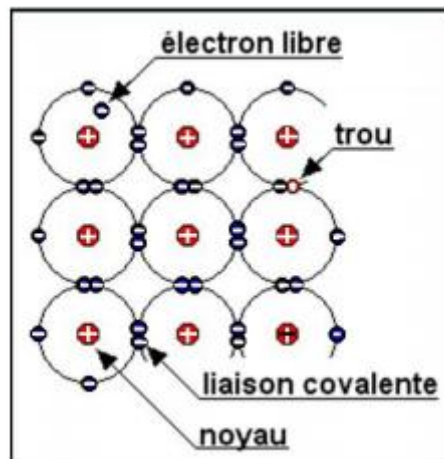


Figure 1-6 Apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente [6].

Les porteurs libres intrinsèques dans un semi-conducteur est double, soit des électrons (charge négative) soit des trous (charge positive) dont le nombre  $n_i$  et  $p_i$  est fonction de la température. La neutralité du matériau fait que  $n_i$  doit être égal à  $p_i$ , comme le représente la figure ci-dessous [1.7].



**Figure.1.7** La dualité de la conductivité électrique dans les semi-conducteurs

Ce nombre est très faible comparé au nombre d'atomes par cristal, d'où la conductivité intrinsèque est considérée comme faible. Le fait d'augmenter soit le nombre d'électrons soit le nombre des trous modifie énormément les propriétés électriques des semi-conducteurs [7].

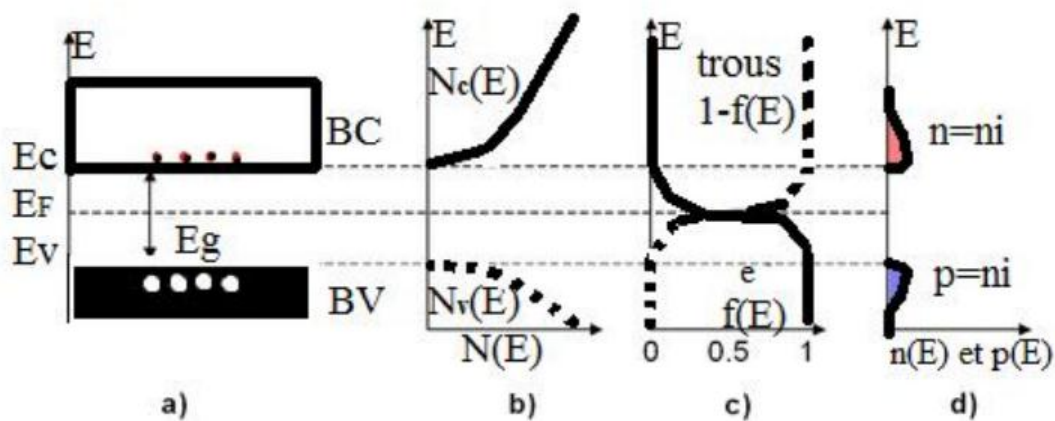
### **1.3- Les différents types de semi-conducteurs**

Fondements des semi-conducteurs. Les métaux tels que l'aluminium et le cuivre servent à transporter un courant électrique dans les circuits. On qualifie ces métaux de conducteurs parce qu'ils offrent une résistance minimale au courant électrique. Par contre les matériaux tels que le verre, le caoutchouc et la céramique ne se prêtent pas à la conduction électrique ; on qualifie ces substances d'isolants. Un troisième groupe de matériaux possède des caractéristiques qu'on peut placer entre celles des conducteurs et des isolants ; on qualifie ces métaux de semi-conducteurs [8].

#### **1.3.1- Les semi-conducteurs intrinsèques**

Un semi-conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés y est très faible [9].

Ce sont des semi-conducteurs 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 10<sup>13</sup> atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température, la figure ci-dessous donne un résumé global des semi-conducteurs intrinsèques du point de vu structure de bandes et distributions des charges [3].



**Figure 1-8** Le bilan électronique pour un semi-conducteur intrinsèque.

- a. Diagramme des bandes d'énergie b. Densités d'états énergétiques c. Distributions de Fermi-Dirac d. Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs  $n$  et  $p$ ) [7].

### 1.3.2- Les semi-conducteurs extrinsèques

Les semi-conducteurs externes sont d'une grande importance en raison de leur conductivité et sont des semi-conducteurs internes dopés avec des impuretés spécifiques, tout en maintenant la pureté initiale nettement supérieure à celle du dopage, leur conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques (diodes, transistors, etc.) et optoélectroniques (émetteurs) Lumière et ses récepteurs, etc.).

La conductivité d'un semi-conducteur peut être augmentée par d'autres moyens, en ajoutant des impuretés dans le cristal. Nous l'appelons un dopage, donc un semi-conducteur est dopé, et on l'appelle un semi-conducteur exogène.

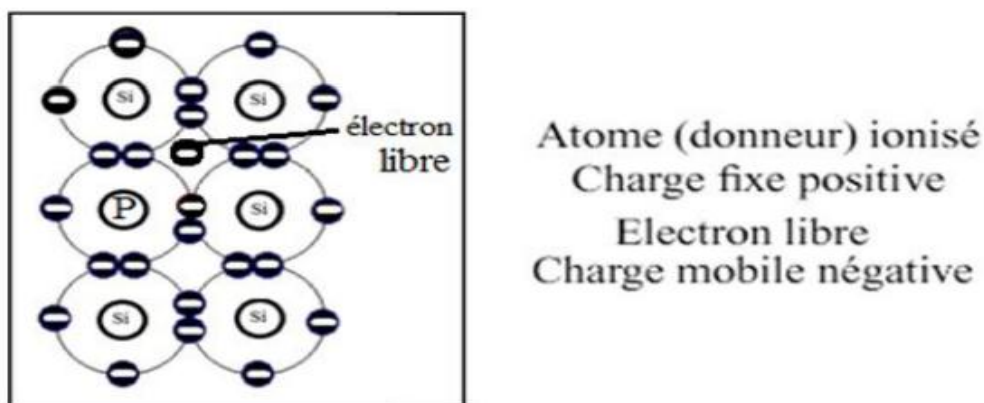
## Chapitre 1                      Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs

Ce germanium ou le silicium peuvent être dopés avec une substance pentavalente telle que l'arsenic ou le phosphore, qui sont deux éléments à cinq électrons terminaux [8].

### **a- Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N**

Considérons par exemple les semi-conducteurs tétravalents tels que Si ou Ge. Ils cristallisent dans une structure où chaque atome est relié à quatre atomes voisins par des liaisons covalentes. Introduisons un atome ayant cinq électrons de valence (phosphore, arsenic antimoine...). Il prend la place d'un atome du cristal. Parmi les électrons de l'impureté, quatre participeront aux liaisons avec les voisins et le cinquième restera célibataire. L'atome d'impureté est associé à un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semi-conducteur est dit de type n [7].

En introduisant des atomes pentavalents tels que le phosphore P, l'arsenic As (dopage N) dans un cristal, certaines liaisons se casent laissant place à ces extra atomes qui ont cinq électrons de valence, ce qui comble les liaisons en laissant un électron libre dans le cristal peu lié au noyau ( $E \approx 0.01 \text{ eV}$ ) et passe aisément dans la bande de conduction. Les atomes pentavalents ou donneurs deviennent des ions positifs après le passage des électrons excédentaires dans la bande de conduction. Ceci qui augmente considérablement la conductivité du matériau dopé. Les charges négatives (électrons) sont dits majoritaires, comme on peut le voir dans la figure suivante [7].



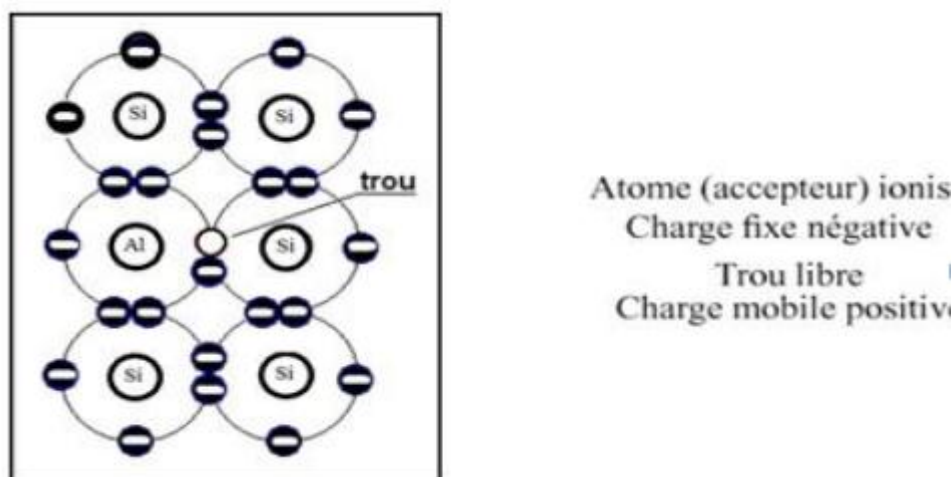
**Figure 1-9** Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N

**b- Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P**

Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore aluminium ou gallium). Cet atome ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semi-conducteur est dit de type p [10].

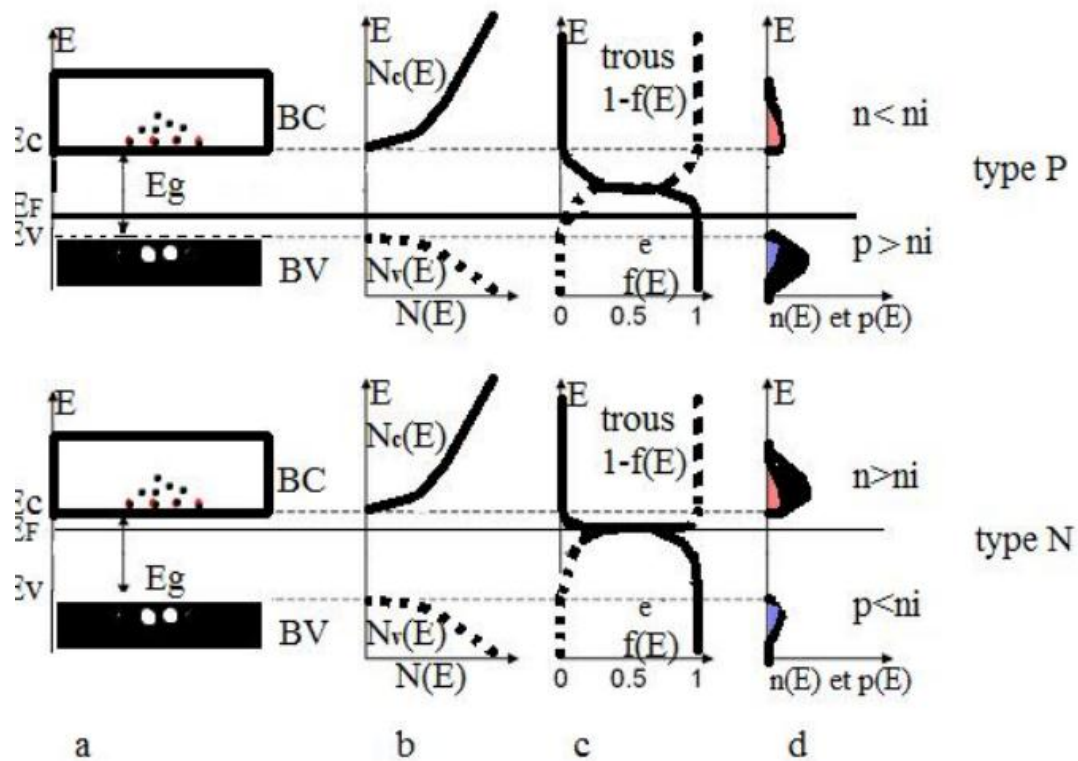
Là où des atomes trivalents comme le gallium Ga, l'indium In, le bore B, l'aluminium Al sont introduits, alors les impuretés n'ont pas l'électron de valence pour assurer les quatre liaisons avec les atomes de silicium voisins. La faible entrée d'énergie (0,05 eV) est suffisante pour capturer l'électron du silicium voisin par des impuretés: un trou lâche mobile est formé, et ainsi un trou mobile est formé. Les atomes trivalents (récepteurs) deviennent des ions négatifs en capturant un électron. Compte tenu des taux de dopage, ces trous sont beaucoup plus nombreux que les noyaux porteurs du cristal pur.

La conduction externe de type P (positive) augmente et est fournie par les trous, les trous deviennent majoritaires, et la figure ci-dessous montre clairement le phénomène.



**Figure 1-10** Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P.

Un bilan général du point de vue structure de bande, distribution des charges des deux types des semi-conducteurs est illustrée à titre indicatif et à titre comparatif.



**Figure 1-11** Le bilan électronique pour un semi-conducteur extrinsèque.

a. Diagramme des bandes d'énergie

c. Distributions de Fermi-Dirac

b. Densités d'états énergétiques

d. Densités énergétiques de porteurs (les

densités de porteurs n et p) Tous ces phénomènes de variation de conductivité trouvent leurs explications dans la théorie des bandes qu'on va expliciter ultérieurement (7).

### 1.3.3- Un semi-conducteur non dégénéré

Dans un semi-conducteur non dégénéré les concentrations des électrons et des trous se calculent à l'aide des équations suivant

$$n = N_c e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} \quad (1-1)$$

$$p = N_v e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}} \quad (1-2)$$

## Chapitre 1                      Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs

$$n = \frac{E_v - F}{kT} < -1 \text{ ou } F > E_v + kT \quad (1-3)$$

Dans un semi-conducteur non dégénéré le produit de la concentration des électrons par la concentration des trous ne dépend pas de la position de niveau de Fermi.

$$np = N_C N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{kT}} \quad (1-4)$$

On dit qu'un semi-conducteur n'est pas dégénéré lorsque le niveau de Fermi se trouve à une distance supérieure à  $kT$  au-dessous de  $E_c$  ou au-dessus de  $E_v$ . Autrement dit, dans un semi-conducteur non dégénéré le niveau de Fermi se situe dans la bande interdite [1].

### 1.3.4- Un semi-conducteur dégénéré

Pour un semi-conducteur complètement dégénéré on a :

$$n = \frac{E_v - F}{kT} > 5 \quad \text{ou} \quad F < E_v - 5kT \quad (1-5)$$

Ce qui montre que dans un semi-conducteur complètement dégénéré le niveau de Fermi doit se situer à l'intérieur de la bande de valence à une distance supérieure à  $5kT$  au-dessous du haut de la bande. Si le niveau de Fermi est disposé à plus de  $5kT$  au-dessous de  $E_c$ , la concentration des électrons ne dépend plus de la température :

$$n = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{2m_d}{h^2} \right)^{3/2} (F - E_c)^{3/2} \quad (1-6)$$

Lorsque le niveau de Fermi est disposé à plus de  $5kT$  au-dessous de  $E_v$ , la concentration des trous ne dépend plus de la température : La concentration correspondante des trous est donnée par l'équation [1],

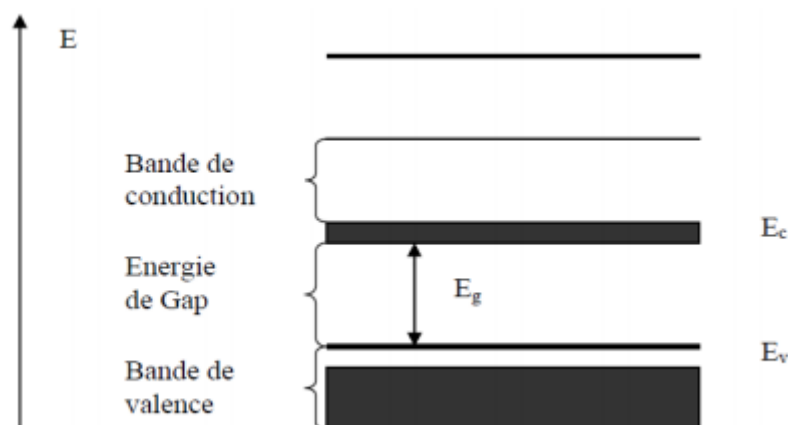
$$p = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{2m^*_{pd}}{h^2} \right)^{3/2} (E_v - F)^{3/2} \quad (1-7)$$

### 1.4- Structure de bandes d'énergies

Dans un atome un électron est soumis à un potentiel coulombien créée par le noyau et le nuage électronique qui est constitué par les autres électrons. Il ne peut occuper que des états quantiques bien définis et distincts les uns des autres. Ces états sont caractérisés par des niveaux d'énergie bien définis auxquels sont associées des fonctions d'onde. Chaque système quantique est caractérisé par des fonctions d'ondes  $\psi$  qui sont les solutions de l'équation de Schrödinger :

$$\frac{2m}{h} (E - V)\psi = 0 \quad (1-8)$$

Dans le cas de l'atome isolé la solution de l'équation de Schrödinger n'existe que pour des valeurs discrètes d'énergie  $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$ . Dans un solide cristallin les noyaux sont disposés en réseaux réguliers, les orbitales sont remplacées par des ondes de Bloch et les couches sont remplacées par des bandes d'énergie permises séparées par d'autres bandes interdites. Une bande permise comporte un nombre considérable de niveaux d'énergie comparable au nombre d'atomes dans le cristal, les niveaux d'énergie des électrons de valence et le niveau d'énergie d'ionisation génèrent ainsi deux bandes d'énergies permises particulièrement intéressantes, la bande de valence et la bande de conduction, séparées par une bande dépourvue de niveaux permis, nommée bande interdite (Figure 1-12). La particularité de ces bandes permises tient au fait que les électrons peuvent circuler librement dans toute la maille cristalline et ainsi générer des courants de conduction électrique (s'agissant d'électrons partagés par les atomes du réseau cristallin) [1].



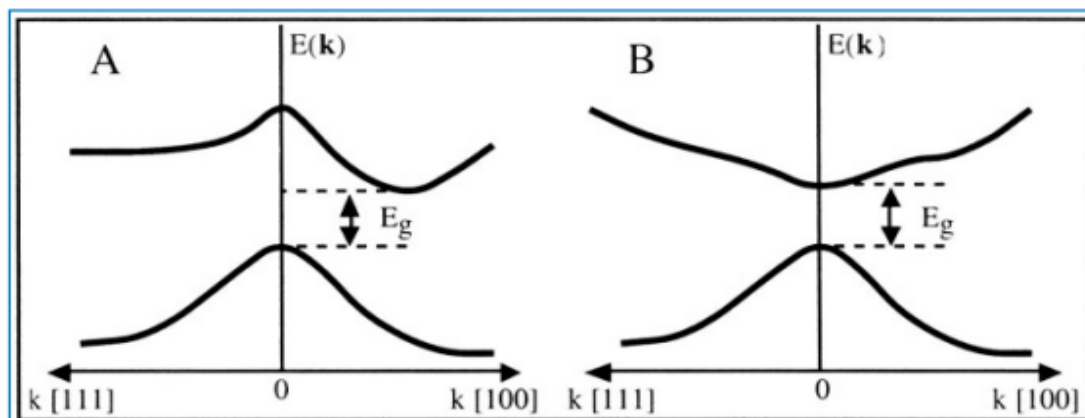
**Figure 1-12** Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs [9].

Plusieurs méthodes, basées sur des hypothèses simplificatrices, sont utilisées pour déterminer la structure des bandes dans les semi-conducteurs. Parmi celles-ci on peut citer : La méthode CLOA, appelée aussi méthode des liaisons fortes, consiste à développer les fonctions d'onde de cristal sous forme d'une combinaison linéaire d'orbitales atomiques. La méthode OPW (Orthogonalized Plane waves) consiste à développer les fonctions d'onde du cristal, sur la base des fonctions d'ondes des électrons libres [9].

### 1.4.1- Gap direct et indirect

Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence. Les structures de bande représentées dans la figure (1.5) font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteur. Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des  $k$  et les semi-conducteurs à gap direct pour lesquels ces extrema sont situés au même point de l'espace des  $k$  (au centre de la zone de Brillouin, en  $k=0$ ).

Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre ceux qui ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité [11].



**Figure 1-13** Structure de bande d'énergie du : A-gap indirect et B-gap direct.

**a- Gap direct**

Un semi-conducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde  $k$  [10].

**b- Gap indirect**

Un semi-conducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde  $k$  voir la figure (I.9.b). La distinction entre les semi-conducteurs à gap direct et indirect est très importante notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [1].

**1.5- Les matériaux semi-conducteurs**

La famille des semi-conducteurs est très vaste. Les semi-conducteurs sont classés selon leur composition chimique. Il existe des semi-conducteurs élémentaires tels que le silicium (Si), le germanium (Ge) et l'étain gris ( $\alpha$ -Sn), qui appartiennent tous au groupe IV du tableau périodique. Il existe également des semi-conducteurs composites, binaires, ternaires, quaternaires, voire quinaires, constitués de deux, trois, quatre ou cinq espèces chimiques différents respectivement. Ces éléments peuvent être du groupe IV, comme dans le cas carbure de silicium, mais il est plus courant qu'il s'agisse d'éléments d'autres groupes, les plus courants étant les semi-conducteurs III-V, constitués d'éléments du groupe III (aluminium, gallium, indium, etc.) et d'éléments du groupe V (azote, phosphore, arsenic, antimoine, etc).

**1.5.1- Les semi-conducteurs par groupe**

**a- Groupe IV**

Les éléments du groupe IV sont exceptionnels dans le tableau périodique en ce sens que l'enveloppe extérieure des atomes individuels est exactement à moitié remplie. Par un échange de quatre électrons de la coque extérieure avec un autre atome de Si, une structure cristalline tridimensionnelle sans direction préférentielle

## Chapitre 1                      Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs

peut être réalisée. On peut aussi combiner deux différents groupes semi-conducteurs IV pour obtenir un matériau composé tel que le SiC (carbure de silicium). SiC est une matière proche de la ligne frontière entre les semi-conducteurs et des isolants avec une constante de réseau de 0,436 nm et un écart d'énergie de 3,0 eV (413 nm).

Les semi-conducteurs suivants font partie des cristallogènes :

- Semi-conducteurs élémentaires
  - o Diamant (C) o Silicium (Si)
  - o Germanium (Ge)
- Semi-conducteurs composites :
  - o Carbure de silicium (SiC)
  - o Silicium-germanium (SiGe) 2)

### **b- Groupe III-V**

Un semi-conducteur III-V est un semi-conducteur composite fabriqué à partir d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, gallium, indium, etc.), et d'un ou plusieurs éléments de la colonne V (azote, phosphore, arsenic, antimoine, etc.). Les semi-conducteurs III-V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés :

- Ils sont robustes ;
- Ils possèdent une conductivité thermique élevée ;
- Leur point de fusion est élevé ;
- Ils ont une bande interdite directe.

Ces matériaux sont principalement utilisés en microélectronique pour des circuits intégrés, dans les cellules photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes (DEL ou LED en anglais) [13].

**Chapitre 1** Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs

**Tableau 1-1** Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs III-V

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

**c- Groupe II-VI**

Les semi-conducteurs suivants sont des alliages d'éléments appartenant au groupe 12 et aux chalcogènes. Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs II-VI présentée sur le tableau (1-2) [13].

**Tableau 1-2** Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs II-VI.

Alliages binaires	Alliages ternaires
Séléniure de cadmium (CdSe)	Tellure de zinc-cadmium (CdZnTe)
Tellure de cadmium (CdTe)	Tellure de mercure-cadmium (HgCdTe)
Séléniure de zinc (ZnSe)	Tellure de zinc-mercure (HgZnTe)
Tellure de zinc (ZnTe)	Séléniure de zinc-mercure (HgZnSe)

## 1.6- Le dopage des semi-conducteurs

Cette technique consiste à implanter des atomes correctement sélectionnés nommés impuretés dans un semi-conducteur intrinsèque. La forte variabilité des propriétés électriques est due d'une part, à la nature des impuretés et d'autre part, à la manière selon laquelle elles s'incorporent dans le semi-conducteur [4].

La technique du dopage augmente la densité des porteurs, par la suite la conductivité électrique augmente. Deux types de dopage sont envisagés [8] :

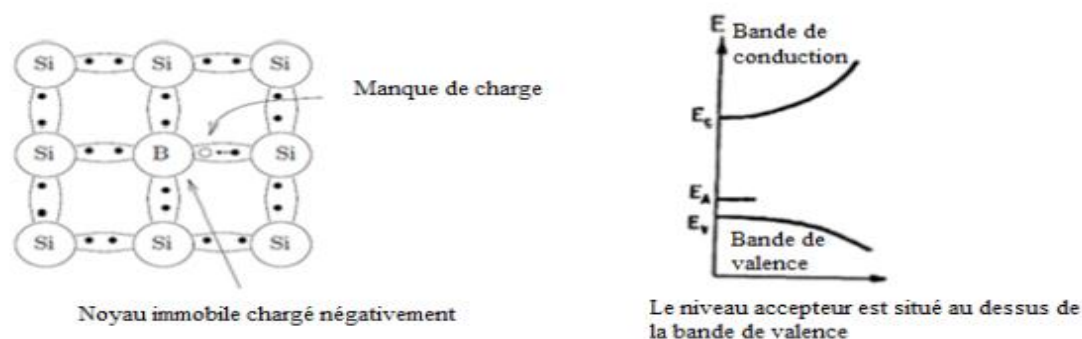
Dopage du type P.●

Dopage du type N.●

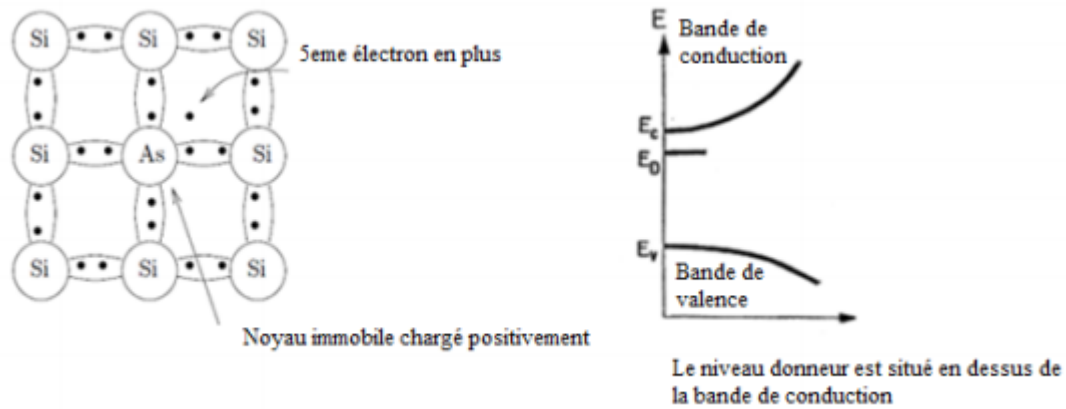
Le premier consiste à augmenter la densité des trous, pour ce faire, on introduit un certain nombre d'atomes pauvres en électrons dans le semi-conducteur, afin de créer un excès de trous .

Le second augmente la densité des électrons dans le matériau semi-conducteur par l'incorporation d'un certain nombre d'atomes riches en électrons.

Du point de vue énergétique, la formation des bandes interdites étant due à la régularité de la structure cristalline, les porteurs libres introduisent des états accessibles à l'intérieur de ces bandes, rendant le gap plus « perméable » à un niveau accepteur ou donneur selon le type de dopage P ou N. Dans le cas du silicium, ce caractère est décrit par les figures (1-14) et (1-15) [9].



**Figure 1-14** Représentation schématique de la substitution d'un atome de bore à un atome de silicium ( exemple du dopage P)avec la structure de bande énergétique relative



**Figure 1-15** Représentation schématique de la substitution d'un atome d'Arsenic à un atome de silicium ( exemple du dopage N)avec la structure de bande énergétique relative.

Dans un cristal semi-conducteur pur la bande de valence est pleine, la bande de conduction est vide, le matériau se comporte comme un isolant. Par contre si le cristal contient des impuretés de type donneur, comme par exemple des atomes de phosphore de symbole chimique  $P$ , ces impuretés ont tendance à s'ioniser pour donner un électron qui va peupler la bande de conduction du semi-conducteur. On a ainsi création d'une charge négative mobile, l'électron de la bande de conduction, et d'une charge positive fixe, l'ion du donneur, dans notre exemple  $P^+$  [12].

### 1.7- Conclusions

La réalisation de dispositifs adaptés aux exigences repose sur les atouts des domaines étendus de la variation de la composition chimique. L'avenir des matériaux semi-conducteurs se voit très prometteur et on est dans l'axe de la fabrication de petits dispositifs plus puissants et plus rentables, vers une technologie plus rapide, plus efficace et en plus moins chère, c'est la nanotechnologie de l'avenir.

## **Références bibliographiques**

- [1] MME, M. Etude et simulation de structures photovoltaïques à base de chalcogénures de métaux de transitions MX<sub>2</sub> (MoS<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub>) (Doctoral dissertation, Université de Tizi Ouzou-Mouloud Mammeri).
- [2] M. Labidi, Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires (Doctoral dissertation, Université de Badji-Mokhtar, Annaba), (2011).
- [3] F. Mezrag, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider-Biskra), (2012).
- [4] R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski, M. Ilegems, Absorption, reflectance, and luminescence of GaN epitaxial layers. *Physical Review B*, 4 (1971) 1211.
- [5] S. Laval, Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique (2002).
- [6] A. Chovet, P. Masson, Physique des semi-conducteurs. Ecole Polytechnique–université de Marseille, (2004).
- [7] W. Kara Mohamed, Les Structures de bandes électroniques et les propriétés relatives aux semi-conducteurs quasi binaires, (2012).
- [8] D. Desmarais, Semi-conducteurs et dioïdes. *Bulletin de L'Union des Physiciens*, 683, (1986) 735.
- [9] B. E. N., Brahmi, Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc, Université Abou-Bakhr Belkaid, Tlemcen, (2013).
- [10] A. Aouina, Role du rayonnement dans l'élaboration et l'étude de nano-agrégats semi-conducteurs de ZnS.
- [11] N. Baghdadli, Etude des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs III-V a base de gallium.

**Chapitre 1**                      **Notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs**

[12] F. Poupaud, Modélisation du transport des charges électriques dans les semi-conducteurs. In ESAIM: Proceedings,EDP Sciences, Vol. 11, (2002) 141-152.

[13] T. S. Moss, A relationship between the refractive index and the infra-red threshold of sensitivity for photoconductors. Proceedings of the Physical Society. Section B, 63 (1950) 167.

## **Chapitre 2 :**

---

**Effet de la pression sur les propriétés  
électroniques et optiques du composé  
semi-conducteur InSb**

---

## **2.1- Introduction**

L'étude des matériaux à hautes pressions connaît grande activité actuelle. La haute pression peut avoir un très grand effet sur les propriétés chimiques et physiques de la matière et les matériaux présentent souvent de nouvelles phases cristallines et un nouveau comportement sous pression. De plus, la possibilité d'étudier la structure la stabilité en fonction du volume a ajouté une nouvelle dimension à la question fondamentale concernant la relation entre la structure atomique et électronique.

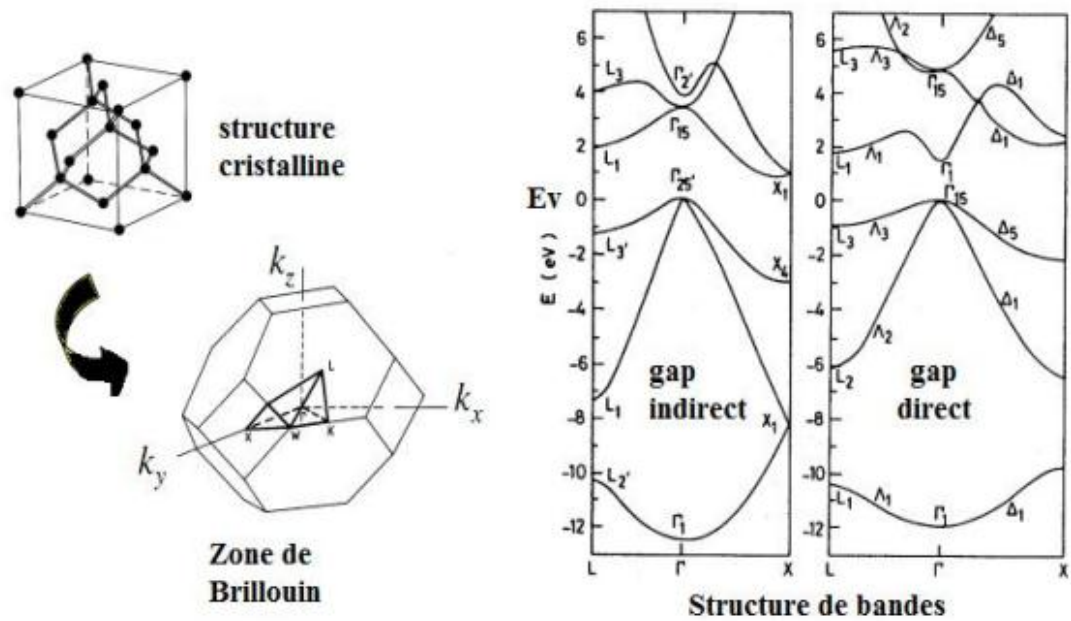
Avec le développement techniques de l'enclume de diamant et l'extension de la gamme pour les mesures optiques et radiographiques en statique pressions, une large gamme de compression est accessible qui a ouvert un nouveau domaine pour la physique du solide et cristallographie. En plus des avancées expérimentales, des méthodes de calcul fiables pour l'électronique la structure de bande et le calcul de l'énergie totale ont fait un impact substantiel sur la physique des hautes pressions , qui fournit des données complémentaires importantes à l'expérimentation travail [1].

## **2.2- Les propriétés physiques des semi-conducteurs**

### **2.2.1- Les propriétés structurales des semi-conducteurs**

La formation d'un matériau est une structure complexe dans l'espace réciproque dont la première zone de Brillouin qui est représentée ci-dessous. De cette complexité de structure découle une complexité de la structure de bandes d'énergie des semi-conducteurs comme illustré ci-dessous dans la même figure.

Les bandes peuvent avoir plusieurs extrema et peuvent être dégénérées à certains endroits de la zone de Brillouin. Et delà, on obtient les semi-conducteurs à un gap direct ou indirect.

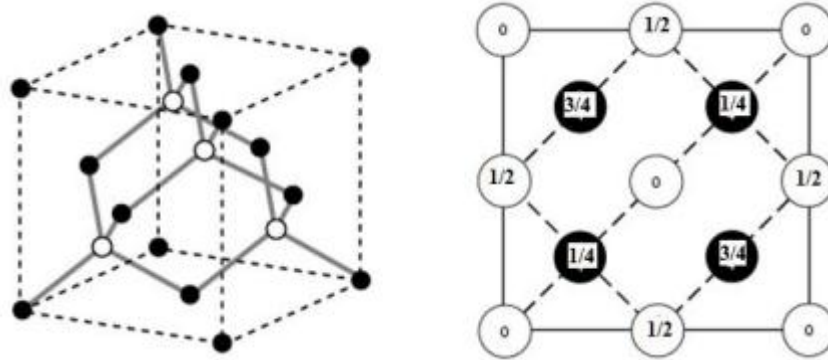


**Figure 2-1** La relation entre la structure cristalline et la structure de bandes des matériaux semi-conducteurs.

### 2.2.1.1- La structure cristalline

Un grand nombre de solides se cristallisent dans une structure périodique. L'immense majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si, Ge) ou optoélectroniques (composés III-V comme le GaAs ou GaP) sont basés sur la même structure cristallographique formant un cristal avec arrangement Zinc blende dite aussi sphalérite, comme le montre la figure ci-dessous. Les atomes du réseau sont à liaisons tétraédriques se décomposant en deux sous réseaux cubiques faces centrées décalés l'un par rapport l'autre par un quart de la diagonale du cube d'une valeur de  $(a/4, a/4, a/4)$ ,  $a$  étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube.

Dite aussi wurtzite. A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées [énergie - vecteur d'onde] dans lequel on représente les variations des fréquences de vibrations du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde  $k$  caractérisant la propagation de l'onde considérée (de nature vibrationnelle ou électronique).



**Figure. 2.2** La structure zinc blende des matériaux semi-conducteurs.

Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire correspond à la première zone dite de Brillouin. Elle présente un centre de symétrie  $\Gamma$  à l'origine ( $k=0$ ), et un certain nombre d'axes de symétries, trois axes équivalent. Certains composés semi-conducteurs II-VI (comme ZnSe ) cristallisent en deux structures l'une cubique zinc blende, la plus stable et la plus utilisée, et l'autre hexagots coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X, et quatre axes équivalents avec les points correspondants L. Les alliages cristallisant dans la structure Zinc-blende sont des cristaux simples manquant d'un centre de symétrie. Cette structure présente un taux de compacité d'ordre 0.35 (taux de remplissage). Elle est donc considérée comme étant une structure ouverte, d'où la possibilité d'insérer autres atomes légers. Donc il devient possible d'avoir des alliages de tout type aux propriétés différentes généralement mieux que celles de ses constituants. D'après la théorie des alliages, le paramètre du réseau, un paramètre très important lors de la croissance des matériaux semi-conducteurs, est ajustable, donc, on peut jouer sur la structure [2].

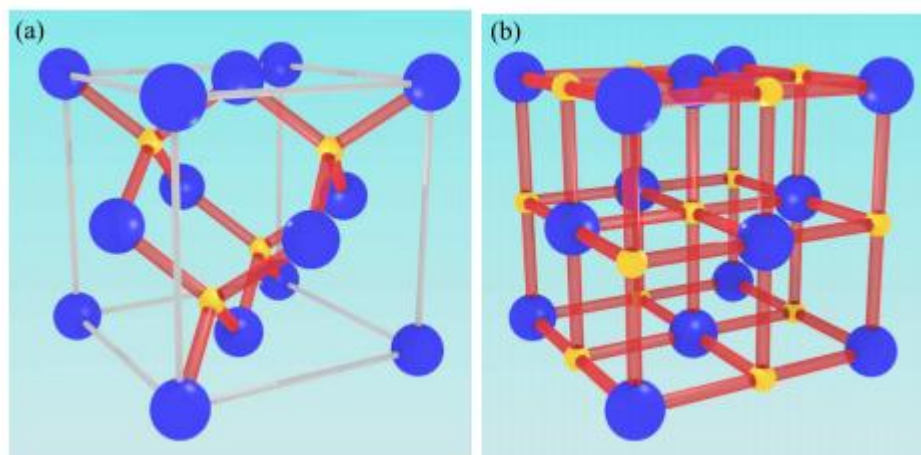
La famille des semi-conducteurs\* est très vaste puisqu'elle va des éléments IV (Si, Ge), aux composés III-V (AlAs, GaAs, InAs, AlSb, AlN...), II-VI (ZnTe, CdTe, ZnSe, CdSe, ZnS, ZnO...), I-VII (CuCl) et même II-IV-V<sub>2</sub> (tel ZnSiP<sub>2</sub>) ou encore I-III-VI<sub>2</sub> (tel AgGaS<sub>2</sub>) cf. Tableau I-1.

IA-B	IIA-B	<b>IIIB</b>	IVB	<b>VB</b>	VIB	VIIIB
Li <sup>Z=3</sup>	Be <sup>4</sup>	<b>B<sup>5</sup></b>	C <sup>6</sup>	<b>N<sup>7</sup></b>	O <sup>8</sup>	F <sup>9</sup>
Na <sup>11</sup>	Mg <sup>12</sup>	<b>Al<sup>13</sup></b>	Si <sup>14</sup>	<b>P<sup>15</sup></b>	S <sup>16</sup>	Cl <sup>17</sup>
Cu <sup>29</sup>	Zn <sup>30</sup>	<b>Ga<sup>31</sup></b>	Ge <sup>32</sup>	<b>As<sup>33</sup></b>	Se <sup>34</sup>	Br <sup>35</sup>
Ag <sup>47</sup>	Cd <sup>48</sup>	<b>In<sup>49</sup></b>	Sn <sup>50</sup>	<b>Sb<sup>51</sup></b>	Te <sup>52</sup>	I <sup>53</sup>
Au <sup>79</sup>	Hg <sup>80</sup>	<b>Tl<sup>81</sup></b>	Pb <sup>82</sup>	<b>Bi<sup>83</sup></b>	Po <sup>84</sup>	At <sup>85</sup>

**Tableau 2 -1** Morceaux choisis du tableau périodique (en gras : éléments III et V).[2]

Les semi-conducteurs III-V et II-VI considérés dans ce qui suit ont tous des structures atomiques de type Zinc-Blende (figure 1.1a). La structure Zinc-Blende est basée sur le réseau de Bravais cubique à faces centrées (CFC). Chaque nœud de ce réseau porte un motif avec les deux éléments atomiques (III et V, par exemple), de positions relatives  $(0, 0, 0)a$  et  $(0.25, 0.25, 0.25)a$ , où  $a$  est le paramètre de la maille CFC. Cette structure est analogue à la structure diamant des semi-conducteurs IV (silicium, germanium), à la différence que le motif de la structure diamant contient deux éléments identiques issus de la colonne IV.

Le semi-conducteur IV-VI (PbSe) possède une structure de type Rock-Salt. Cette structure peut être encore vue comme deux réseaux CFC interpénétrés. Le réseau CFC de l'élément IV est décalé suivant le vecteur  $(0.5, 0.5, 0.5)$  par rapport à celui de l'élément VI.



**Figure 2- 3** Schéma montrant les structures atomiques des semi-conducteurs.

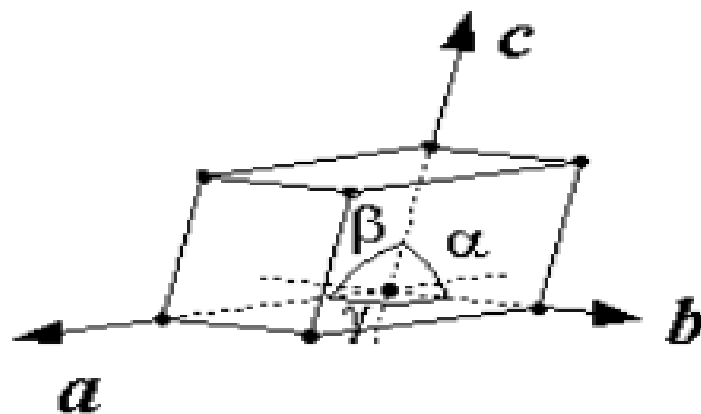
(a) La structure Zinc-Blende des semi-conducteurs III-V et II-VI étudiés dans le présent travail (GaAs, InAs, InSb, InP, AlSb, CdSe, CdTe, HgTe).

(b) La structure Rock-Salt des semi-conducteurs IV-VI (PbSe). Les sphères bleues et jaunes indiquent les deux types d'atomes. Les cylindres rouges indiquent les liaisons aux premiers voisins [3].

### 2.2.1.2- La constante de réseau

C'est une grandeur utilisée pour d'écrire la maille d'un cristal, la maille cristalline est définie par trois paramètres  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et par trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\lambda$  qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur la figure (2-2). Suivant les valeurs relatives de ces six grandeurs on définit les différentes structures cristallines.

C'est pour cela, la détermination de la constante du réseau est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. On voit clairement que, la connaissance de cette constante du réseau permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique. Néanmoins ces paramètres de réseau ne sont pas constants, ils peuvent varier en fonction de la température et de la pression [4].



**Figure 2-4** Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

**Tableau 2-2** Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-IV [5].

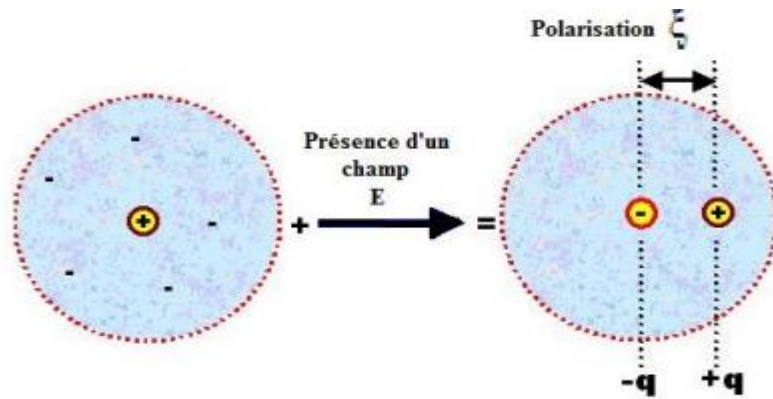
Matériau	a(Å)	Structure
GaAs	5.65330	zb
InAs	6.0583	zb
InP	5.8690	zb
GaSb	6.09593	zb
AlAs	5.66139	zb
AlSb	6.1355	zb
GaP	5.4508	zb

### 2.2.2- Les propriétés électronique des semiconducteurs

Un matériau est dit diélectrique si ses électrons ne peuvent pas, par définition, se déplacer sur des grandes distances (de façon macroscopique). Autrement dit, c'est un milieu ne pouvant pas conduire le courant électrique. De ce point de vue, on l'appelle parfois isolant électrique tels que le vide, le verre et de nombreux plastiques.

Malgré ce caractère d'impossibilité des milieux diélectriques de conduire le courant, ils présentent de nombreux critères électriques. La propriété la plus importante d'un diélectrique est la polarisation sous l'action d'un champ électrique externe. Comme le montre clairement la figure ci-dessous

En effet les atomes qui constituent le matériau peuvent se présenter sous forme de dipôles électrostatiques pouvant interagir avec un champ électrique. Cette interaction s'exprime sous forme d'une polarisation reliée à ce champ électrique, au niveau microscopique, par une polarisabilité, et au niveau macroscopique, par la susceptibilité électrique.



**Figure 2-5** L'effet d'un champ électrique à l'échelle microscopique.

Les semi-conducteurs font partie des matériaux diélectriques et ils sont donc polarisables. Ils sont le siège d'un champ électrique interne s'ils sont soumis à un champ externe, caractérisé par un paramètre déterminant à l'échelle macroscopique qui est la constante diélectrique  $\epsilon$ . Les semi-conducteurs sont alors des matériaux polarisables pouvant conduire de l'électricité conjuguant ainsi les propriétés des conducteurs et des diélectriques.

### **2.2.2.1- Structures de bandes**

Un atome d'un élément particulier a des niveaux d'énergie bien définis des fonctions d'onde bien définies peuvent être liées. C'est la même chose dans un solide cristallin les atomes sont disposés dans un triple réseau périodique. Allumez les électrons ensuite, les niveaux d'énergie bien définis correspondent également aux modèles de diffusion bien défini. Ces niveaux sont très proches les uns des autres et sont regroupés en plages appelées plages de puissance admissibles. Les plages de puissance admissibles sont séparées par zones appelées bandes restreintes où il n'y a pas de niveau d'énergie admissible. Donc, ces plages sont représentées dans l'espace réciproque, et à des fins de simplicité, elles sont représentées les tendances des symétries sont traitées plus haut dans la première région de Brillouin [6].

### **2.2.2.2- Bande interdite (gap énergétique)**

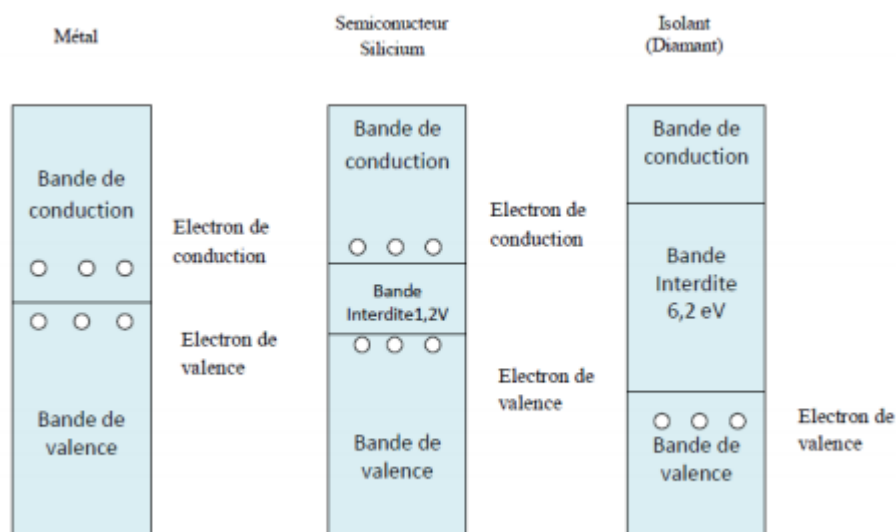
Dans un semi-conducteur comme dans un isolant, la différence d'énergie entre la bande la bande de conduction et de valence est appelée la bande d'énergie interdite, ou tout simplement un espace visible, par exemple, où le socle de chargement est

**Chapitre 2      Effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques du composé semi-conducteur InSb**

introuvable. Ce sont les informations de base qui déterminent les propriétés électroniques et optiques de semi-conducteurs et ainsi évaluer leur domaine d'application.

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas il ne peut pas passer d'une bande de valence à une bande de conduction. En ce qui concerne semi-conducteurs, cette plage est suffisamment petite pour une excitation suffisante, les électrons dans la bande de valence sont autorisés à rejoindre la bande de conduction, d'où semi-conducteur peut transporter de l'électricité et donc devenir conducteur. Par contre dans les métaux, on rencontre un chevauchement des bandes, les électrons peuvent passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circulent dans tout le solide [7].

Il existe trois types de matériaux métalliques, les semi-conducteurs l'isolation est illustrée à la figure 2-6



**Figure 2-6** Les structures des bandes énergétiques : Métal, semi-conducteur, isolant.

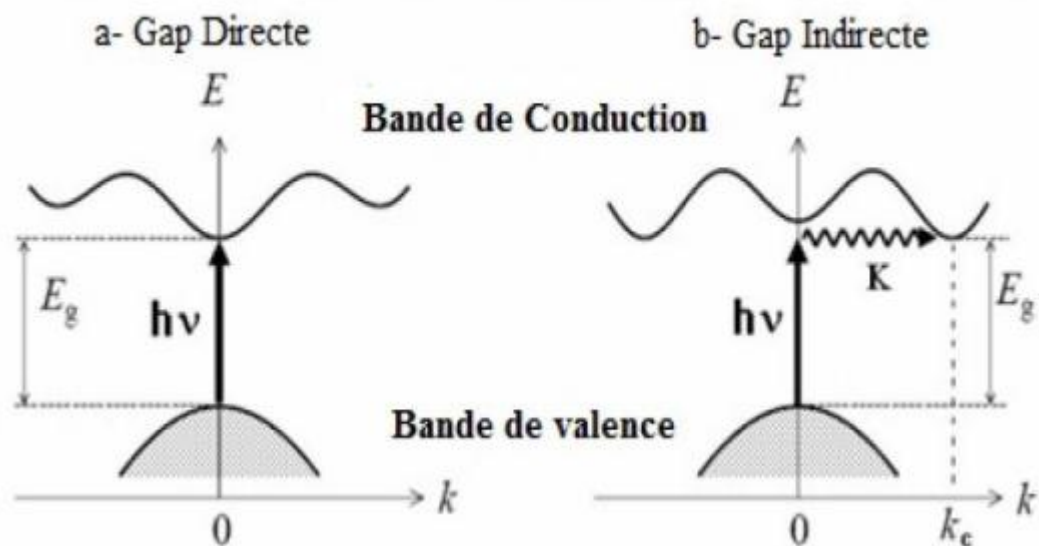
Le tableau suivant présente quelques exemples de largeur de bande interdite ainsi que la distance interatomique.

**Tableau 2-3** Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique [8].

Atome	$E_G$ (eV)	Type de matériau	$d$ (Å)
C (Carbone)	5.5	Isolant	3.567
Si (Silicium)	1.12	Semi-conducteur	5.431
Ge (Germanium)	0.7	Semi-conducteur	5.646
Sn (Etain)	0	conducteur	6.489

### 2.2.2.3- 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  $k$ . Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [10]. Les structures de bandes représentées sur la figure (2-7) font apparaitre deux types fondamentaux de semi-conducteurs [9].



**Figure 2-7** Les transitions optique directes et indirectes [4].

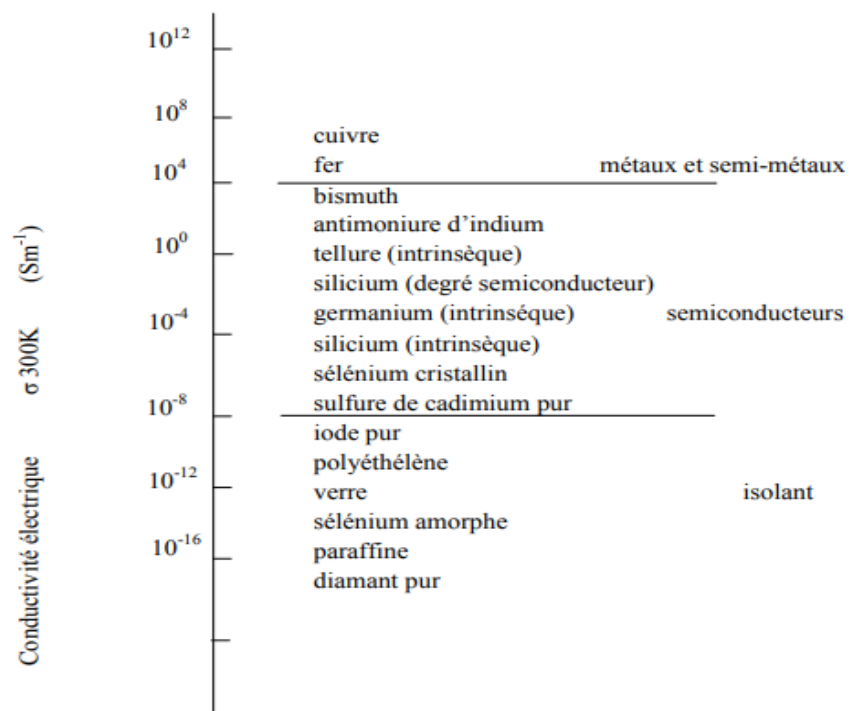
**2.2.3- Les propriétés électrique des semi-conducteurs**

**2.2.3.1- 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. La conductivité électrique  $\sigma$  des semi-conducteurs croit rapidement avec la température selon l'expression suivante :

$$\sigma(T) = q (n\mu_n (T) + p\mu_p (T)) \quad (2-1)$$

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.



**Figure 2-8** Conductivité électrique à température ambiante de quelque corps solide.

[4]

Dans le sens où les semi-conducteurs font partie des matériaux diélectriques, ils sont polarisables. Placés dans un champ électrique, des échantillons semi-conducteurs sont donc le siège d'un champ électrique interne pour lequel la permittivité diélectrique  $\epsilon$  est le paramètre

Macroscopique déterminant. En conséquence, il est possible de définir un matériau semi-conducteur comme un corps solide polarisable et capable de conduire l'électricité.

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 [10].

#### **2.2.4- Les propriétés optiques des semi-conducteurs**

Les propriétés optiques d'un semi-conducteur peuvent être définies comme une propriété qui implique l'interaction entre le rayonnement électromagnétique ou la lumière et le semi-conducteur, y compris l'absorption, diffraction, la polarisation, la réflexion, la réfraction et la diffusion. Les propriétés optiques des semi-conducteurs sont intégralement liées à la nature particulière de leurs structures de bandes électroniques. Leurs structures de bandes électroniques sont à leurs tours liés au type de structure cristallographique (la symétrie des groupes spatiaux), les atomes particuliers, ainsi que leur liaison.

Les phénomènes optiques (diffusion, émission et absorption), sont liés à la réponse du composé absorbeur lorsqu'il est soumis à un rayonnement électromagnétique. Il nous faut donc étudier la réponse d'un milieu diélectrique à un champ électromagnétique sinusoïdal et plus précisément au champ électrique de cette onde [11].

L'étude des propriétés optiques des semi-conducteurs se voit de deux angles différents soit qu'on veut traiter les propriétés caractéristiques de l'interaction

matériau → semi-conducteur rayonnement électromagnétique (l'absorption sélective donnant une couleur au matériau, la réflexion de la lumière, ainsi que l'émission) et l'utiliser comme moyen de mesure donnant certaines valeurs spécifiques telles que le gap énergétique ( seuil d'absorption ), distributions des niveaux d'impuretés etc. Soit qu'on veut utiliser les interactions électromagnétiques avec les → semi-conducteurs en vue de développer des applications et des dispositifs optiques.

#### **2.2.4.1- Notions de base optiques des semi-conducteurs**

Le rayonnement électromagnétique est un transfert d'énergie. Il peut être décrit de manière corpusculaire comme la propagation de photons, ou de manière ondulatoire comme une onde électromagnétique. Il se manifeste sous la forme d'un champ électrique couplé à un champ magnétique.

La dualité onde-particule , un affrontement concurrent entre les théories, est un concept des fondements de la mécanique quantique , un principe selon lequel tous les objets à l'échelle microscopique présentent simultanément des propriétés d'ondes et de particules. L'absence de représentation adéquate de la réalité des phénomènes oblige à adopter, selon le cas, un des deux modèles, onde ou particule.

La propagation de ce rayonnement donne lieu à de nombreux phénomènes observés tels que l'atténuation, l'absorption, la diffraction et la réfraction, le décalage vers le rouge, les interférences, les échos, les parasites électromagnétiques et les effets biologiques. La décomposition du rayonnement électromagnétique en ses différentes composantes en termes de fréquence (ou période), d'énergie des photons ou encore de longueur d'onde associée, les quatre grandeurs  $\nu$  (fréquence),  $T$  (période),  $E$  (énergie) et  $\lambda$  (longueur d'onde) donne ce qu'on appelle le spectre électromagnétique qui est abusivement considéré comme l'ensemble des fréquences possibles pour tous les rayonnements électromagnétiques.

Ces paramètres étant liés deux à deux par les relations suivantes :

désignant l'énergie transportée par le photon

$$E = h\nu = \frac{h}{T} \quad (2-2)$$

désignant le déplacement dans le vide du photon

$$c = \lambda \nu = \lambda / T \quad (2-3)$$

$$E = hc / \lambda \quad (2-4)$$

Avec : h la constante de Planck (approx.  $6,626069 \times 10^{-34}$  J·s  $\approx 4,13567$  feV/Hz)

C la vitesse de la lumière (exactement 299 792 458 m/s)

La lumière visible fait partie du rayonnement électromagnétique mais ne constituant qu'une petite tranche du spectre électromagnétique comme on le voit sur la figure 8 du spectre complet donnée ci-dessous.

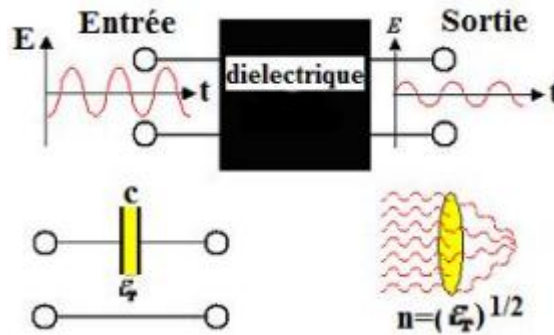
#### **2.2.4.2- La Fonction diélectrique**

Présentant un champ électrique, Cette polarisation créée dans le milieu diélectrique intervient dans des phénomènes mettant en jeu des ondes électromagnétiques, comme la lumière. Les équations de Maxwell permettent alors de montrer que la partie réelle de la susceptibilité électrique modifie la vitesse c d'une onde lumineuse qui se propage dans le matériau par rapport à la vitesse  $c_0$  qu'elle aurait dans le vide selon la relativité,

$$c_0 = c \sqrt{1 + \Re(x)} \quad (2-5)$$

Par analogie, cette relation est comparable à celle de l'indice de réfraction n d'un milieu. Cela explique le phénomène de réfraction de la lumière. D'autre part, la partie imaginaire correspond à une absorption de la lumière par le matériau.

Pour bien concrétiser le fonctionnement physique d'un diélectrique, on peut le schématiser comme une "boîte noire" ayant à l'entrée un signal sous la forme d'un champ électrique alternatif E et on observe la sortie comme indiqué dans la figure ci-dessous. L'entrée serait une tension simple alternance dans le cas du condensateur et serait une onde lumineuse dans le cas d'une lentille optique avec un indice de réfraction n.



**Figure 2-9** La réponse d'un diélectrique à une excitation alternative .

Si l'entrée est une superposition de plusieurs , alors on l'écrit sous forme de décomposition de Fourier comme suit :

$$E_{in} = E_{in} \cdot e^{i\omega t} \quad (2-6)$$

Le diélectrique suit linéairement et la sortie aura la même forme comme suit :

$$E_{out} = E_{out} \cdot e^{i(\omega t + \phi)} \quad (2-7)$$

Qu'on peut l'écrire sous cette forme plus simple comme suit :

$$E_{out} = f(\omega) \cdot E_{in} \quad (2-8)$$

Où :  $f(\omega)$  est appelée la fonction diélectrique du matériau exprimant la relation entre son entrée et sa sortie, qu'on peut écrire comme suit :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + j \cdot \varepsilon''(\omega) \quad (2-9)$$

$$\varepsilon'(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty}}{1 + (\frac{\omega}{\omega_0})^2} \quad (2-10)$$

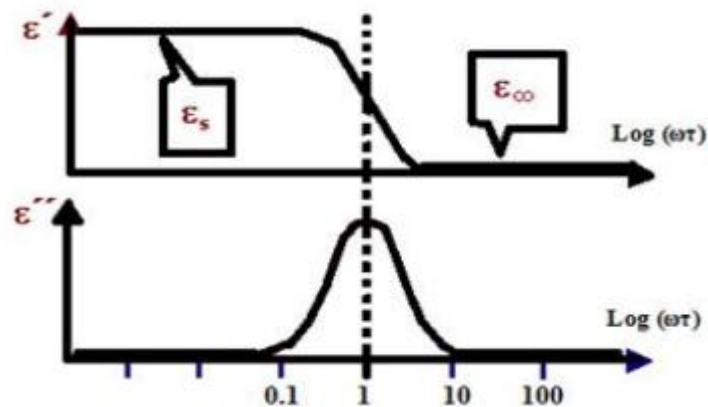
$$\varepsilon''(\omega) = \frac{(\frac{\omega}{\omega_0})(\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})}{1 + (\frac{\omega}{\omega_0})^2} \quad (2-11)$$

Avec : les conditions aux limites comme suit :

$$\varepsilon'(\omega = 0) = \varepsilon_s \quad (2-12)$$

$$\varepsilon'(\omega = \infty) = \varepsilon_{\infty} \quad (2-13)$$

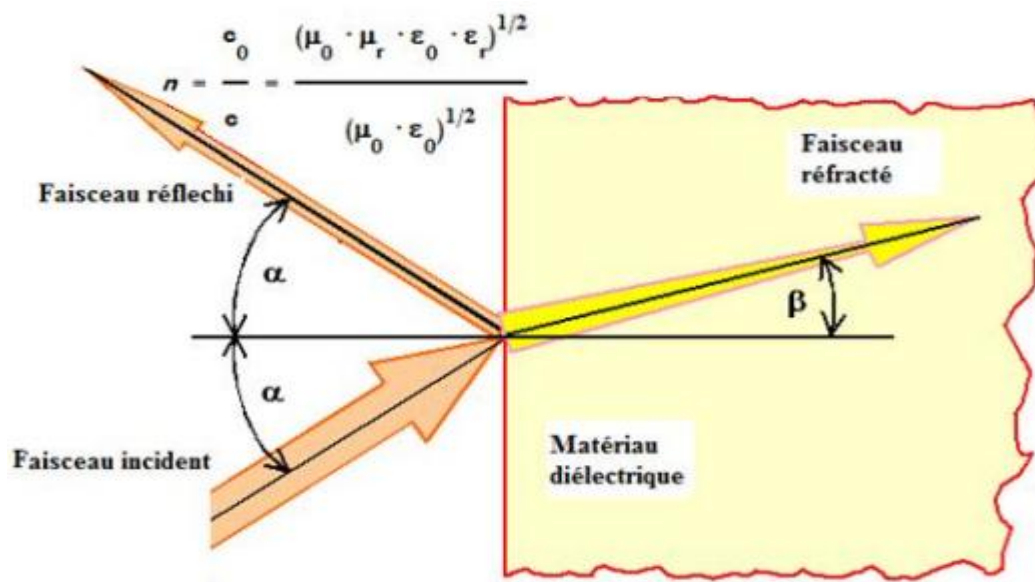
La variation de la fonction diélectrique en fonction de la fréquence est illustrée sur la figure ci-dessous.



**Figure 2-10** La variation de la constante diélectrique en fonction de la fréquence.

### 2.2.4.3- La relation entre un diélectrique et l'indice de réfraction

En frappant un matériau diélectrique avec un rayon avec un certain angle, plusieurs phénomènes se produisent en se basant sur les principes de l'optique, et la réaction du matériau dépendra énormément de sa nature comme le montre la figure ci-dessous.



**Figure 2-11** La relation entre l'optique et le diélectrique.

**Chapitre 2      Effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques  
du composé semi-conducteur InSb**

Sachant que l'indice de réfraction  $n$  est proportionnel à la racine carrée de la constante diélectrique  $\epsilon$  comme suit :

$$n = \epsilon^{1/2} \quad (2-14)$$

Et sachant aussi que cette fonction diélectrique est complexe, l'indice s'écrit alors comme suit :

$$n^* = n + jk \quad (2-15)$$

De la relation (1-5), on peut écrire ceci :

$$(n^*)^2 = (n + jk)^2 = \epsilon = \epsilon' + j\epsilon'' \quad (2-16)$$

D'après tout ce qu'on a vu, on peut dire qu'un diélectrique ne répond pas aux excitations de haute fréquence, et ceci doit être pris en compte lors du choix du matériau et de l'application à laquelle il est choisi [12].

**Tableau 2-4** L'indice de réfraction de quelque matériaux semi-conducteurs à 300 k [13].

matériau	n
Gap	2.92
InP	3.1
GaAs	3.3
InAs	3.5
InSb	3.95

**2.2.4.4- La constante diélectrique statique  $\epsilon_{(0)}$  et de hautes fréquences  $\epsilon_{(\infty)}$**

La constante diélectrique appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle a des conséquences importantes sur les propriétés physiques du solide. Elle intervient dans de nombreux domaines, notamment, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétique, en particulier en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière.

**Chapitre 2      Effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques du composé semi-conducteur InSb**

Autrement dit, les excitations propres d'un matériau sont décrites par la fonction diélectrique, cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur  $\varepsilon(\mathbf{k},\omega)$  d'onde  $\mathbf{k}$  [4].

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

Elle a été définie pour tenir compte de la contribution du cortège électronique des ions. Le tableau (2-1), présente des valeurs expérimentales de  $\varepsilon_{(0)}$  et  $\varepsilon_{(\infty)}$  pour quelques matériaux semi-conducteurs [4].

**Tableau 2-5** Constantes diélectriques statique et optique de quelques matériaux semi-conducteurs à 300 K.

Matériau	Constante diélectrique statique $\varepsilon_{(0)}$	Constante diélectrique optique $\varepsilon_{(\infty)}$
Si	11,7	11,7
Ge	15,8	15,8
InSb	17,7	15,6
InAs	14,9	12,3
InP	12,4	9,6
GaAs	12,9	10,9
GaSb	16 ,1	14,4
GaP	10,7	8 ,5

**2.2.4.5- Interaction rayonnement semi-conducteur**

Les semi-conducteurs sont caractérisés par leur bande interdite ou gap, des niveaux interdits pour les électrons séparant deux ensembles de niveaux permis par

les électrons, la bande de conduction complètement vide à 0°k et la bande de valence pleine à 0°K.

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique et par suite dans le fonctionnement des composants optoélectroniques.

#### Absorption fondamentale

Lorsque le photon absorbé provoque un saut d'électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état vide de la bande conduction, c'est-à-dire, si cette énergie est au moins égale à celle de la largeur de la bande interdite.

On dit qu'il y a absorption, le phénomène est illustré sur la figure ci-dessous en spécifiant les différents cas possibles.

Les semi-conducteurs parfaits, intrinsèques et sans impuretés ou défauts sont transparents pour des radiations d'énergie inférieure à leurs gaps et ils absorbent quasiment toute la lumière sur une épaisseur d'environ un micromètre près du seuil ce qui définit la longueur d'onde de coupure  $\lambda_c$ .

Les impuretés modifient le spectre d'absorption optique et augmentent la longueur d'onde de coupure.

La première cause d'émission de lumière dans les semi-conducteurs est l'émission spontanée de photons jouant un rôle important dans les dispositifs de génération de lumière (diodes électroluminescentes et lasers).

### **2.3- Les applications des propriétés des semi-conducteur**

L'avènement de l'ère du semi-conducteur a révolutionné le développement technologique, ils sont utilisés dans un large éventail d'appareillages. Le rythme vertigineux des percées technologiques survenues dans le domaine des semi-conducteurs a donné lieu à des systèmes électroniques de plus en plus complexes. Comprendre les concepts de base des semi-conducteurs et leurs comportements microscopiques et l'utiliser à l'échelle macroscopique pour donner naissance à des dispositifs électroniques avec des performances compétitives. Selon la propriété utilisée, on va exposer quelques dispositifs déjà conçus.

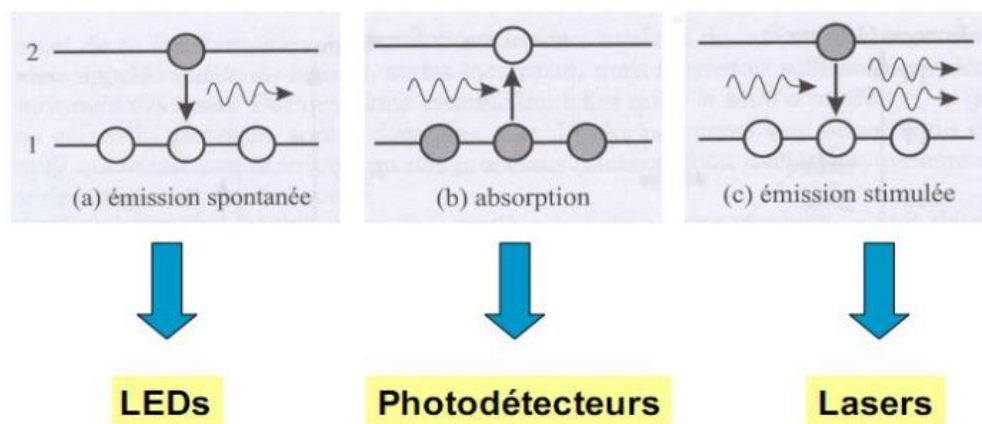
Les semi-conducteurs constituent un domaine d'application très important allant des dispositifs optoélectroniques, photovoltaïque, photonique à l'analyse biologique et le diagnostic médical [14].

### 2.3.1- Les applications en électronique

Utiliser la propriété majeure des semi-conducteurs qui est le contrôle de la conductivité pour réaliser soit des diodes, en tant qu'interrupteurs, régulateurs, soit des transistors, en tant qu'amplificateurs, Switch, suiveurs, ou soit des varistances en tant que résistance réglable [12].

### 2.3.2- Les applications optoélectroniques

Les matériaux semi-conducteurs interviennent dans la construction de détecteurs de rayonnement lumineux et de sources de radiation spontanée ou stimulée, la figure ci-dessous montre les trois phénomènes ainsi que leurs domaines d'applications.



**Figure 2-12** Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.

Dans ces applications, on exploite la réaction des semi-conducteurs à une excitation lumineuse. Les électrons du matériau sont mis en jeu soit par perte soit par gain de photon. Dans ce cas-là, on peut citer plusieurs dispositifs selon le phénomène utilisé dans le matériau [12].

## **2.4- Les avantages des semi-conducteurs II-IV**

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants :

- ✓ Leur propriété semi-isolant (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences. - leur résistance aux radiations.
- ✓ Leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- ✓ Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- ✓ Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHZ à plus de 100 GHZ.

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz [20].

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium [21].

Les composés III-V sont donc parfaitement appropriés à la réalisation de circuits hyperfréquences. On peut classer ces circuits par type :

- 1- Les circuits bas niveau :
- 2- Amplification faible bruit,
- 3 - Fonction de contrôle,
- 4- commutation, etc... [15].

## **2.5- Effet de la pression sur les semi-conducteurs**

### **2.5.1- Définition la pression**

La pression est une grandeur physique qui traduit les échanges de quantité de mouvement dans un système thermodynamique, et notamment au sein d'un solide ou d'un fluide. Elle est définie classiquement comme l'intensité de la force qu'exerce un fluide par unité de surface.

C'est une grandeur scalaire (ou tensorielle) intensive. Dans le Système international d'unités elle s'exprime en pascals, de symbole Pa. L'analyse dimensionnelle montre que la pression est homogène à une force surfacique ( $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$ ) comme à une énergie volumique ( $1 \text{ Pa} = 1 \text{ J/m}^3$ ).

On appelle parfois « pression exercée » (par un fluide sur une paroi) la force (dite « force pressante ») qu'il exerce par unité d'aire de la paroi, mais il s'agit alors d'une grandeur vectorielle définie localement, alors que la pression est une grandeur scalaire définie en tout point du fluide [16].

### **2.5.2- L'effet de la pression hydrostatique sur les semi-conducteurs**

Les matériaux en général sont utilisés dans des différentes conditions de températures et de pression. Donc il devient nécessaire d'étudier leur comportements sous l'effet des perturbations extérieures ; tel que la pression, la température, le champ électrique,...etc. Dans ce cas on a la pression comme perturbation extérieure. La pression modifie de façon très importante la structure cristalline des solides. Elle peut induire des variations structurales continues sans augmenter l'agitation thermique et présente donc des avantages par rapport au paramètre température [1]. L'effet de la pression se manifeste par la réduction du volume. Cela se fait par la diminution des distances interatomique, variation angulaires, transition structurales avec, dans de nombreux cas, une augmentation de la coordinance des cations et une modification de la nature des liaisons chimiques. Les propriétés physiques du matériau comprimé se modifient en fonction des variations de la structure cristalline [17].

### **2.5.3- L'effet de la pression sur la géométrie de la structure**

La compressibilité d'un cristal s'accompagne par des modifications de la géométrie de la structure, cela apparaît comme suit :

Pour les substances fortement comprimés, il y'aura un rétrécissement des liaisons atomiques qui correspondent à une diminution de la taille des tétraèdres qui est responsable à la réduction du volume, même pour les cristaux où l'empilement atomique n'est pas compact, la diminution du volume résulte d'une rotation des tétraèdres autours des sommets ou d'arrêts communes [3].

Lors de cette rotation, les distances entre un atome et ses plus proches voisins ne varient que très peu, mais les seconds voisins se rapprochent beaucoup plus.

L'aspect le plus remarquable que présente les semi-conducteurs covalents AN B 8-N ayant une structure tétraédrique est leur faible densité atomique (le taux de remplissage est de 0.34) par conséquent, il n'est pas surprenant que sous l'effet de la pression, ces semi-conducteurs puissent se transformer en structure à densité élevée. Il y a deux possibilités pour la transformation vers des structure à haute densité: une vers une structure isolante du type Na Cl est l'autre métallique du type  $\beta$ -Sn les deux structures sont approximativement de coordinence  $N_c = 6$  et elles sont de 20% plus denses que les structures tétraédriques [16].

#### **2.5.4- Dépendance du paramètre du réseau avec la pression**

Sous l'effet d'une pression la constante du réseau est décrite par l'équation d'état de Murnaghan [18],

$$p = \frac{B_0}{B'_0} \left[ \left( \frac{a_0}{a(p)} \right)^{3B_0} - 1 \right] \quad (2-17)$$

$a_0$  et  $a(p)$  sont respectivement les constantes du réseau à pression normale et sous l'effet d'une pression.  $B_0$  est le module de compression

$$B'_0 = \frac{dB_0}{dp} \quad (2-18)$$

' est la dérivée du module de compression.

La constante du réseau sous pression sera donc :

$$a(p) = a_0 \left( 1 + p \left( \frac{B'_0}{B_0} \right) \right)^{-\frac{1}{3B_0}} \quad (2-19)$$

### **2.5.5- L'effet de la pression sur les niveaux électroniques**

L'application de la pression sur les semi-conducteurs agit d'une manière isotrope sur la distance interatomique du réseau mais ne provoque pas aucun changement sur la symétrie. Cependant, les modifications apportées sur la distance interatomique entraînent des déplacements des états électroniques qui modifient par la suite la disposition relative des bandes d'énergie, ceci est dû à la redistribution des électrons dans les minima de ces bandes principalement dans les points de haute symétrie  $\Gamma$ , X et L dans le cristal [19], cette redistribution entraîne un élargissement des bandes et donc une augmentation des bandes interdites.

### **2.5.6- La technologie de la haute pression**

L'étude des matériaux sous l'effet des hautes pressions est l'un des nouveaux domaines de recherche dans la physique de l'état solide pour cela, un dispositif qui est la cellule à enclumes de diamant vient révolutionner le monde de la physique des matériaux par sa capacité de produire de très hautes pressions

Les avantages de la cellule du diamant incluent la capacité d'atteindre la plus haute pression ( $>150$  GPa). Bien que les dimensions de l'échantillon comprimé soient assez petites, la cellule du diamant est convenue idéalement pour la caractérisation des matières à haute pression

Sous pression, les matériaux présentent de nouveaux comportements et de nouvelles phases structurales. Généralement, on doit s'attendre à un comportement métallique pour la plupart des semi-conducteurs à hautes pressions du fait que les transitions de phase structurales induites sous l'effet des pressions apparaissent dès que les atomes deviennent fermement compacts [17].

Deux bases de l'équipement de la haute pression sont en variété de configurations expérimentales. De grandes avancées dans cette technologie ont été récemment produites, tel qu'il est maintenant possible de comprimer des échantillons considérablement larges aux plus hautes pressions maximums. Un type de presse à volume large un usage commun. Equipement à volume large qui typiquement compte sur la presse hydraulique pour comprimer l'échantillon en une est la presse à multi

enclume octaédrale qui peut être utilisée pour comprimer des échantillons avec des volumes de l'ordre de quelques mm<sup>3</sup> aux pressions dans la gamme de 40 GPa [20].

## **2.6- Conclusions**

L'effet de la pression hydrostatique sur les propriétés électroniques et optiques d'une étude de semi-conducteur. Réduire la distance entre les particules après application La pression provoque des changements structurels et électroniques.

## **Références bibliographiques**

- [1] N. Y. Aouina, F. Mezrag, M. Boucenna, M. El-Farra, N. Bouarissa, High pressure electronic properties and elastic stability criteria of AlAs. *Materials Science and Engineering*, B 123 (2005) 87.
- [2] A. Bechiri, F. Benmakhlouf, N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 77 (2003) 507
- [3] A. Tadjine, Structure électronique et propriétés de réseaux cohérents de nano cristaux semi-conducteurs (Doctoral dissertation, Université de Lille 1, France) (2018).
- [4] N. Bouarissa, S. Saib, M. Boucenna, F. Mezrag, *Comput. Condens. Matter* 17 (2018) e00346
- [5] S. Adachi, *Properties of semi-conducteur alloys: group-IV, III-V and II-VI semi-conductors* (Vol. 28). John Wiley & Sons, (2009).
- [6] S. Ouendadji, Etude des propriétés structurales, électroniques, optiques et thermodynamiques des composés binaires semi-conducteurs CdS, CdSe et CdTe et leurs alliages ternaires par la méthode des ondes plane linéarisées (FPLAPW) (Doctoral dissertation, thèse de doctorat), (2010).
- [7] C. Kittel, M. Poumellec, R. Mégy, & C. Dupas, *Physique de l'état solide* (Vol. 7). France: Dunod, (1983).
- [8] A. Chovet, & P. Masson, *Physique des semi-conducteurs*. Ecole Polytechnique–université de Marseille, (2004).
- [9] S. Saib, N. Bouarissa, *Phys. Stat. Sol. B* 244 (2007) 1063
- [10] L. Hannachi, N. Bouarissa, *Phys. B* 404 (2009) 3650
- [11] M. Boucenna, N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 84 (2004) 375
- [12] N. Bouarissa, *Phys. B* 406 (2011) 2583
- [13] P. Kiréev, «*La Physique des semi-conducteurs*», Ed.Dound Université (2001).
- [14] A. Gueddim, S. Zerroug, N. Bouarissa, *J. Lumin.* 135 (2013) 243

**Chapitre 2      Effet de la pression sur les propriétés électroniques et optiques  
du composé semi-conducteur InSb**

[15] S. Saib, N. Bouarissa, Solid-State Electron. 50 (2006) 763

[16] S. Zerroug, F. Ali Sahraoui, N. Bouarissa, J. Appl. Phys. 103 (2008) 063510

[17] F. Mezrag, N. Bouarissa, Phys. B 405 (2010) 2272

[18] F. D. Murnaghan, (1944), the compressibility of media under extreme pressures. Proceedings of the national academy of sciences of the United States of America, 30 (9), 244.

[19] N. Bouarissa, Solid-State Electron. 44 (2000) 2193.

[20] N. Bouarissa, F. Annane, Mater. Sci. Eng. B 95 (2002) 100

# **Chapitre 3 :**

---

## **Résultats et discussion**

---

### 3.1- Introduction

Récemment, des chercheurs ont remarqué qu'il existe un lien entre le développement scientifique et le développement de la physique des semi-conducteurs en profitant de leurs propriétés électroniques pour réaliser certains dispositifs électroniques. C'est la raison pour laquelle ils se concentrent sur l'amélioration de la compréhension de ces propriétés électroniques.

Les propriétés des composés binaires sont les plus connues néanmoins elles sont fixes, tel que le gap énergétique, le paramètre du réseau...etc. Alors que certaines applications exigent des propriétés intermédiaires à celles des composés binaires qu'on peut obtenir soit par croissance de deux composés binaires, soit par l'utilisation des alliages quaternaires ou ternaires, ouvrant la possibilité d'ajuster les propriétés (gap, indice de réfraction ...) [1].

### 3.2- Étude des propriétés électroniques

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

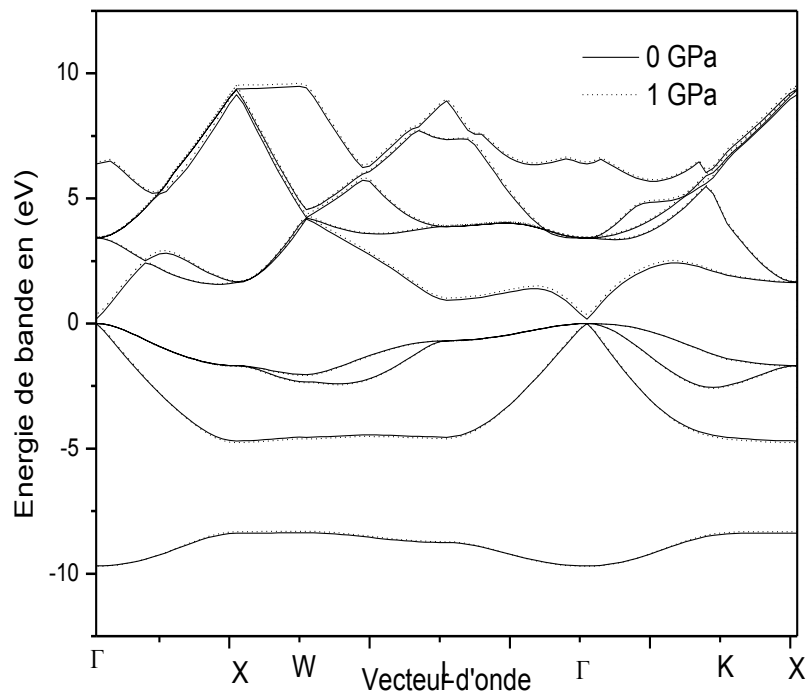
La nature empirique de la méthode du pseudopotentiel consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques [2].

#### 3.2.1- Structure de bandes électroniques

L'effet de la pression sur la structure de bande électronique du InSb calculée aux points de hautes symétries de la zone de Brillouin en utilisant l'EPM est représenté sur les figures (3-1,3-2,3-3) à pression nulle et à pression de 1, 1.5, 2 GPa, respectivement.

**Tableau 3-1** Les facteurs de forme pseudopotentiels du composé InSb pour différentes pressions

InSb	Paramètres (Å°)	Vs (3)	Vs (8)	Vs (11)	V <sub>A</sub> (3)	V <sub>A</sub> (4)	V <sub>A</sub> (11)
P=0 GPa	6.49	-0.201294	0.01	0.028338	0.064495	0.03	0.015
P=0.5GPa	6.47	-0.201109	0.01	0.030451	0.063882	0.03	0.015
P=1GPa	6.45	-0.201006	0.01	0.032549	0.063314	0.03	0.015
P=1.5GPa	6.42	-0.200878	0.01	0.034612	0.062763	0.03	0.015
P=2GPa	6.40	-0.200727	0.01	0.036643	0.062233	0.03	0.015



**Figure 3-1** La structure de bande électronique du composé binaire InSb à pression nulle est à pression de 1GPa.

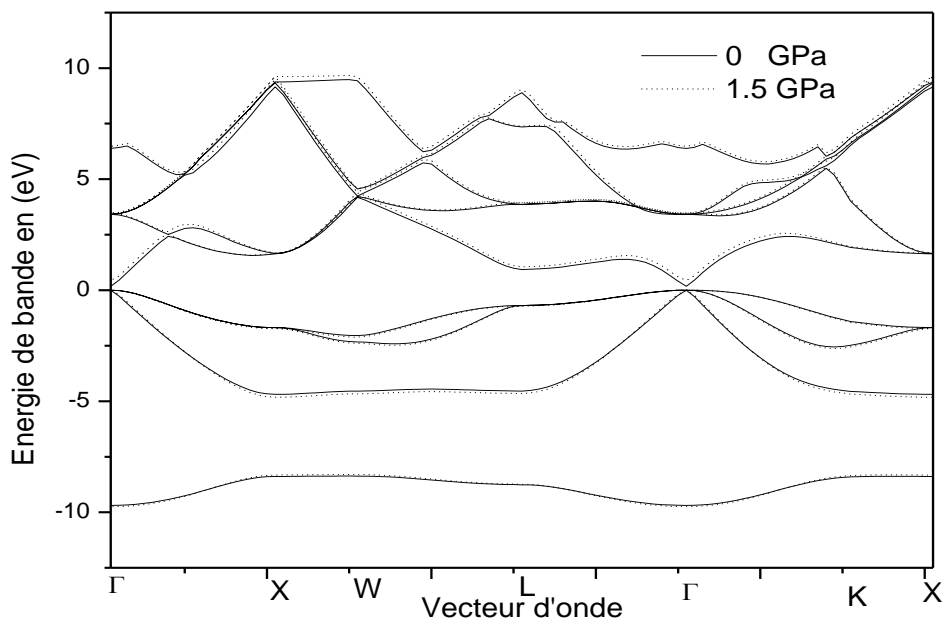


Figure 3-2 La structure de bande électronique du composé binaire InSb à pression nulle est à pression 1.5GPa

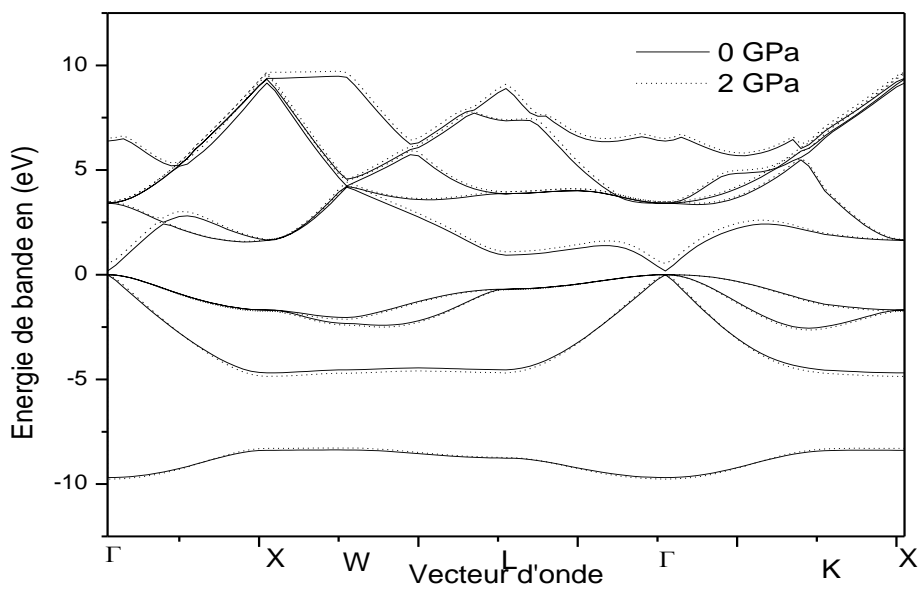


Figure 3-3 La structure de bande électronique du composé binaire InAs à pression GPa est à pression de 2 GPa.

La situation est similaire a celle de ZnS et de MgO sous pression hydrostatique

### 3.2.2- Le gap d'énergie

Les gaps d'énergie direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  du composé binaire InSb ont été calculés pour différentes pression .Nos résultats sont présentés dans tableau (3-2).

Ces gaps d'énergies obtenues par une interpolation quadratique aux points de haute système  $\Gamma$  , X et L sont présentés dans les figures (3-4), (3-5) et (3-6).

**Tableau 3-2** Gap d'énergie pour le composé binaire InSb avec des comparaisons théoriques.

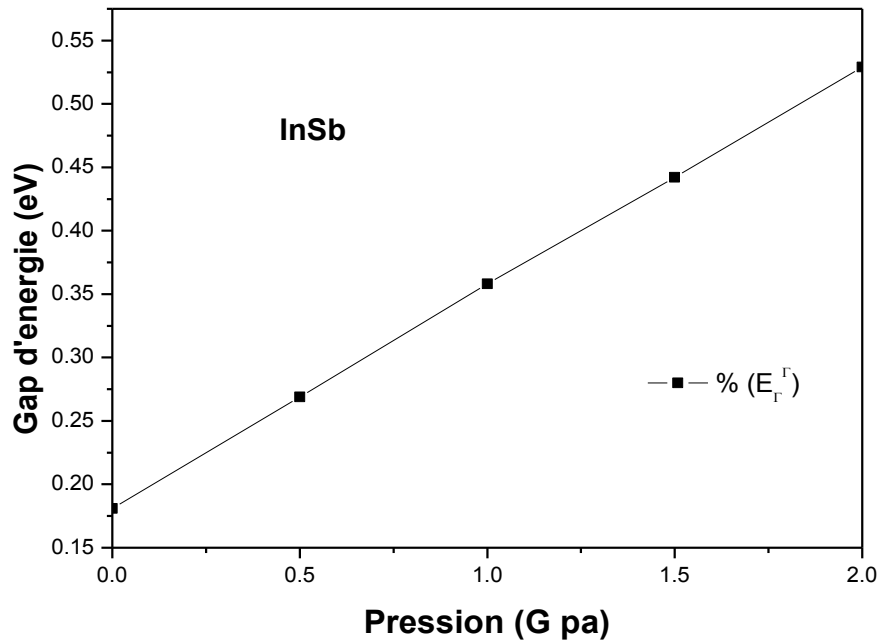
InSb	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$ (eV)	$E_{\Gamma}^X$ (eV)	$E_{\Gamma}^L$ (eV)	Valeur théorique $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ (eV)
P=0 GPa	0.18	1.63	0.93	0.2357 <sup>a</sup> 0.17 <sup>a</sup> 0.175 <sup>b</sup> 0.18 <sup>k</sup> 1.63 <sup>k</sup> 0.93 <sup>k</sup> 0.18 <sup>g</sup>
P=0.5GPa	0.27	1.65	0.97	
P=1GPa	0.36	1.66	1.02	
P=1.5GPa	0.44	1.67	1.05	
P=2 GPa	0.53	1.68	1.09	

<sup>a</sup>) Données théoriques indiquées dans Ref. [5].

<sup>b</sup>) Données théoriques indiquées dans Ref. [6].

<sup>k</sup>) Données théoriques indiquées dans Ref. [7].

<sup>g</sup>) Données théoriques indiquées dans Ref. [8].



**Figure 3-4** La variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction de la pression du composé binaire semi-conducteur InSb

Nous observons que le gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  suit une interpolation quadratique de la forme :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 0,181 + 0,1778P - 0,002P^2 \quad (3-1)$$

Nous remarquons que, le paramètre de courbure de cette équation tend vers zéro ce qui confirme la variation linéaire et monotone du gap  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction de la pression et que le gap augmente chaque fois que la pression augmente de 0 à 2 GPa. Cette dernière représente la pression de transition de phase du composé, chose qui peut être expliqué physiquement par : lors de l'application d'une pression sur un matériau le paramètre de maille diminue, ce qui provoque l'augmentation des interactions et par la suite l'augmentation du gap énergétique

Le gap direct  $E_{\Gamma}^X$  suit une interpolation quadratique de la forme:

$$E_{\Gamma}^X = 1,63337 + 0,03071P - 0,00486 P^2 \quad (3-2)$$

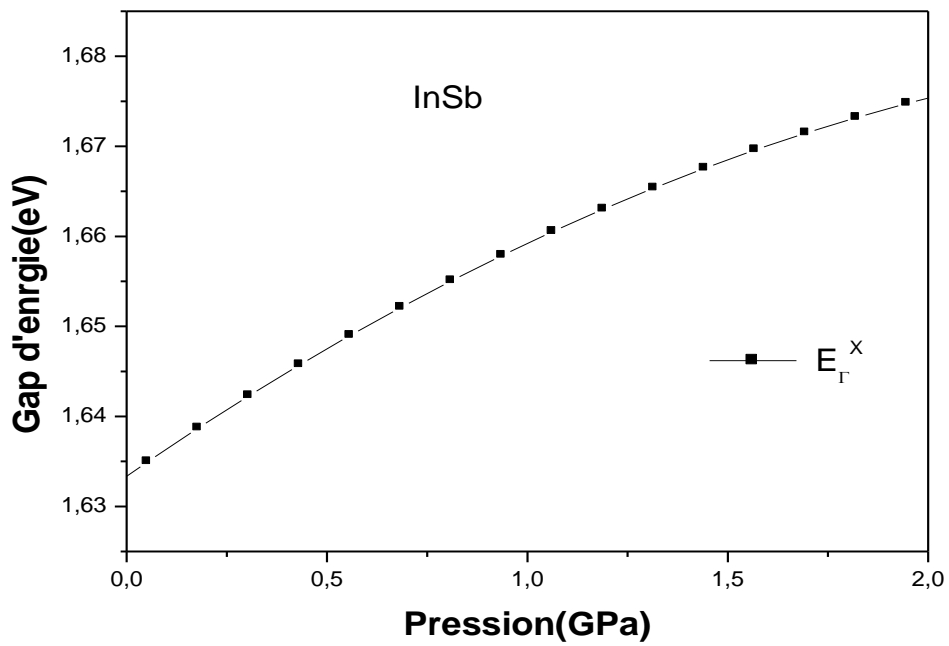


Figure 3-5 La variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^X$  en fonction de la pression du composé binaire semi-conducteur InSb.

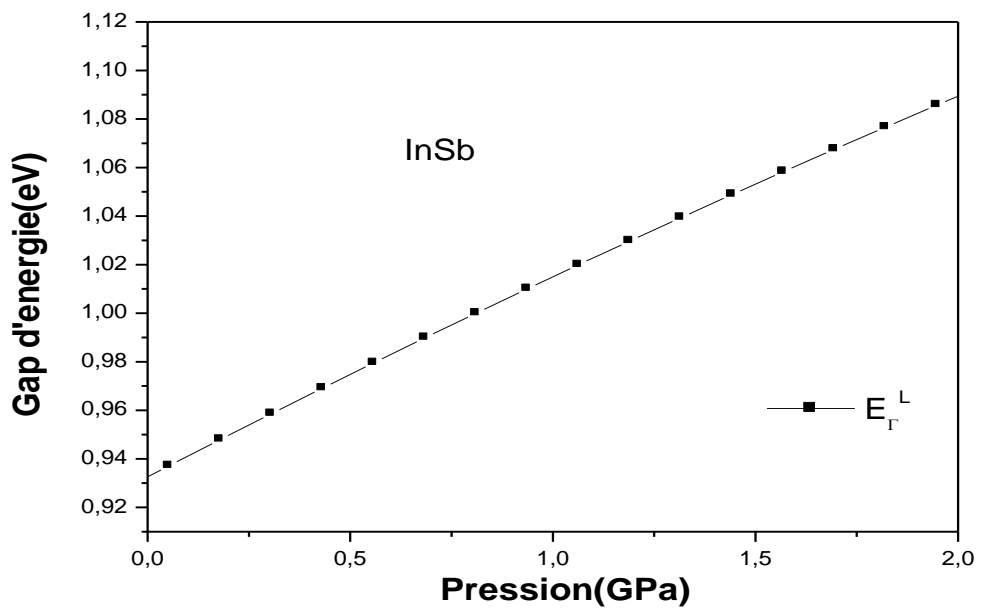
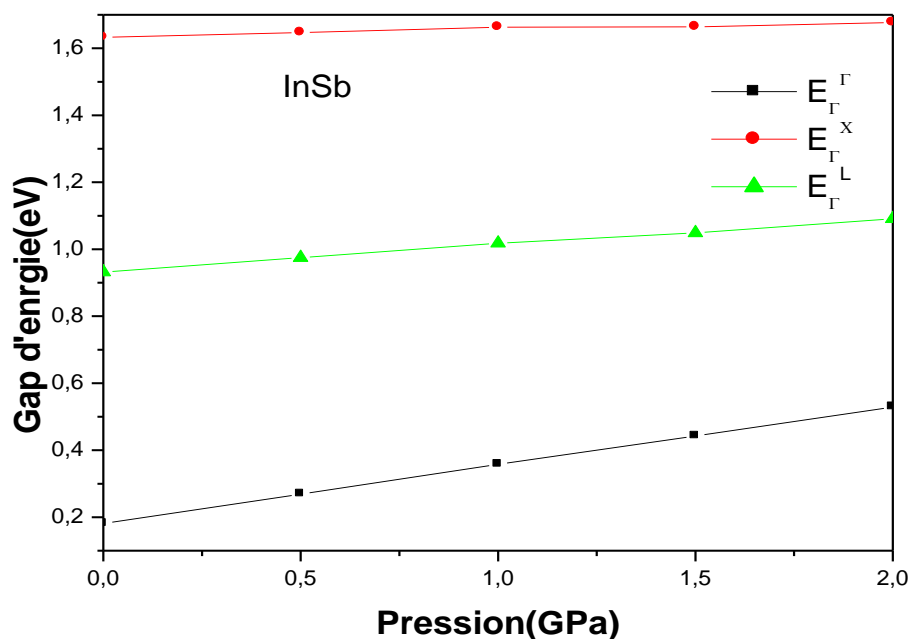


Figure 3-6 La variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma}^L$  en fonction de la pression du composé binaire semi-conducteur InSb.

Le gap direct  $E_{\Gamma}^L$  suit une interpolation quadratique de la forme :

$$E_{\Gamma}^L = 0,9326 + 0,0864P - 0,004P^2 \quad (3-3)$$

Pour voir une éventuelle transition des gaps direct et indirect, la figure (III-7) a été tracée, on remarque l'absence de transition de gap et que le gap direct est le gap fondamental ce qui permet de conclure que le InSb est un semi-conducteur à gap direct pour toute les pressions inférieures à la pression de transition de phase.



**Figure 3-7** Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la pression  $p$  du composé binaire semi-conducteur In Sb.

afin de voir s'il y'a une transition de gap pour l'InSb sous pression dans l'intervalle 0-2 GPa .nous avons tracez les trois gap énergétiques en fonction de la pression sur la même figure , figure 12 on note que lorsque on augmente la pression les trois gaps d'énergies augmentant sans interaction indiquant qu'il y'a pas de transition de gap(il n'y'a pas de croisement entre les gaps énergétiques direct et indirecte) . cela veut dire que le semi-conducteur d'intérêt reste toujours un semi-conducteur a gap direct dans l'intervalle de pression [0,2] GPa

### 3.3- Étude des propriétés optiques

#### 3.3.1- L'indice de réfraction du composé binaire InSb

L'indice de réfraction ( $n$ ) des semi-conducteurs est d'un intérêt important pour des considérations à la fois fondamentales et appliquée. En outre, les dispositifs tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs, nécessitent une connaissance préalable de l'indice de réfraction [9-13].

Une corrélation entre  $n$  et  $E_g$  a des répercussions importantes sur la structure de bande des semi-conducteurs, il serait utile de trouver une valeur acceptable de  $n$  d'un matériau quelconque à partir de cette relation. Dans le présent travail, l'indice  $n$  a été calculé en utilisant cinq modèles différents, qui sont tous directement liés à  $E_g$ .

1-La relation Moss basée sur le modèle atomique [14].

$$E_g n^4 = K \quad (3-4)$$

Où  $K$  est une constante de valeur de 108 eV.

2- La relation de Gupta-Ravidra [15].

$$n = 4.16 - 0.85E_g \quad (3-5)$$

3-La relation de Ravindra et ses collaborateurs [16],

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (3-6)$$

Avec

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

4-L'expression empirique de Herve et Vandamme [17].

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \quad (3-7)$$

Avec  $A$  et  $B$  constantes numériques de valeur 13.6 et 3.4eV, respectivement.

5-La relation de Reddy et Aujaneyulu. [18]

$$E_g e^n = 36.3 \quad (3-8)$$

Nos résultats de calcul de l'indice pour chaque modèle sont présentés le tableau (3-3).

**Tableau 3- 3** Calcul des indices de réfraction du InSb en fonction de la pression.

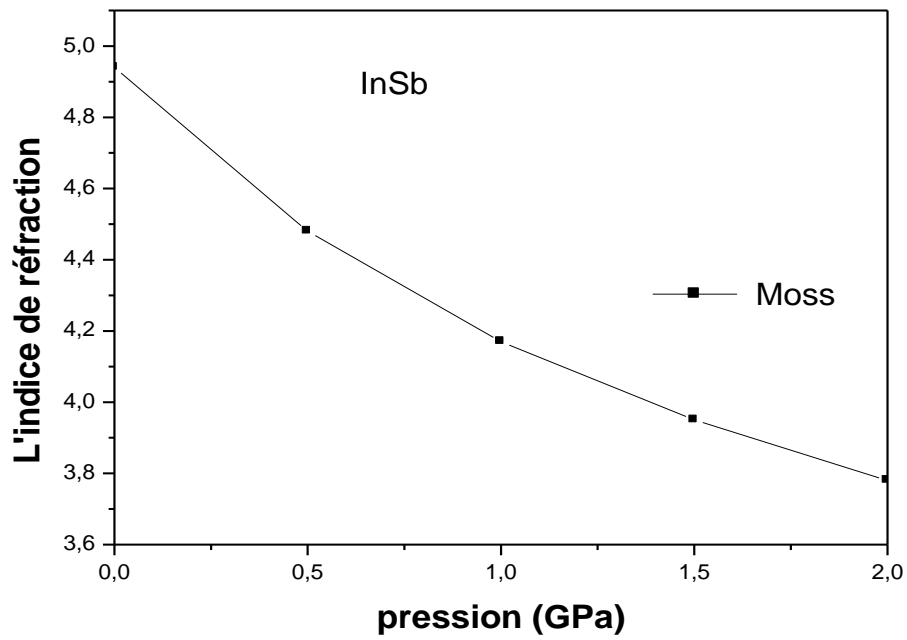
InSb	n calculé à partir de :				
	La relation Moss	La relation Ravindra	Relation de Gupta Ravidra	La relation Hervé vandamme	La relation Reddy et Anjaneyulu
P =0 GPa	4.95	4.01	3.97	3.93	5.30
P=0.5 GPa	4.48	3.93	3.92	3.84	4.91
P=1 GPa	4.17	3.85	3.86	3.75	4.62
P=1.5 GPa	3.96	3.79	3.81	3.68	4.41
P=2 GPa	3.78	3.71	3.75	3.60	4.23

### 3.3.1.1- Modèle de Moss

La figure (III-8) donne la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composé InSb. La relation qui relie les deux grandeurs (p et n) est présentée par le fit polynomial d'ordre deux donné par l'équation suivante:

$$n = 4,93714 - 0,96057 P + 0,19429 P^2 \quad (3-9)$$

On peut conclure que qualitativement pour ce modèle la variation est non linéaire et monotone et que l'indice diminue chaque fois que la pression augmente

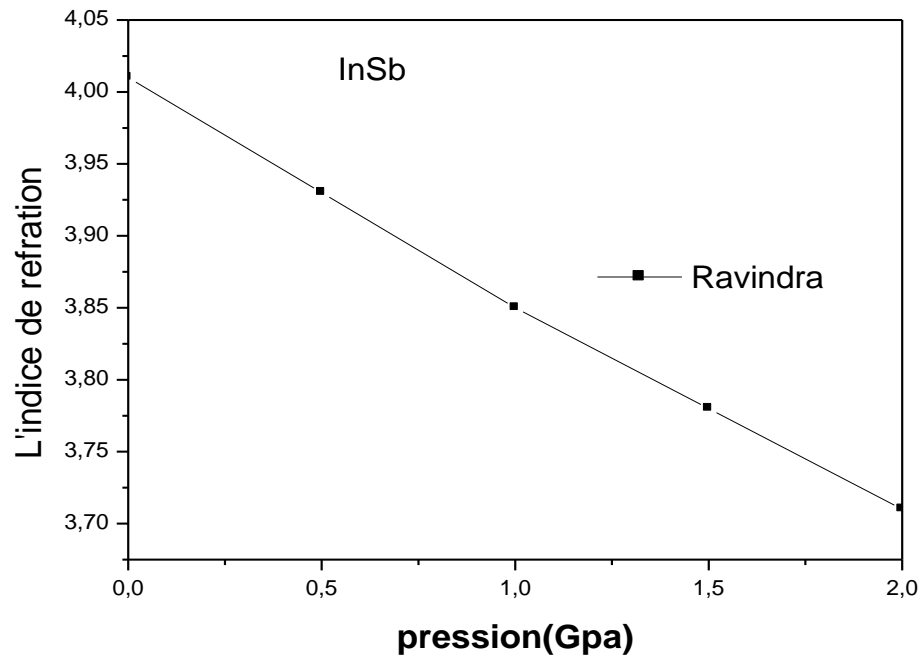


**Figure 3-8.** La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le  
Modèle de Moss

### 3.3.1.2- Modèle de Ravindra

Pour le modèle de Ravindra, la Figure (III-9) est l'indice de réfraction suit une interpolation de la forme :

$$n = 4,01029 - 0,16714P + 0,00857P^2 \quad (3-10)$$

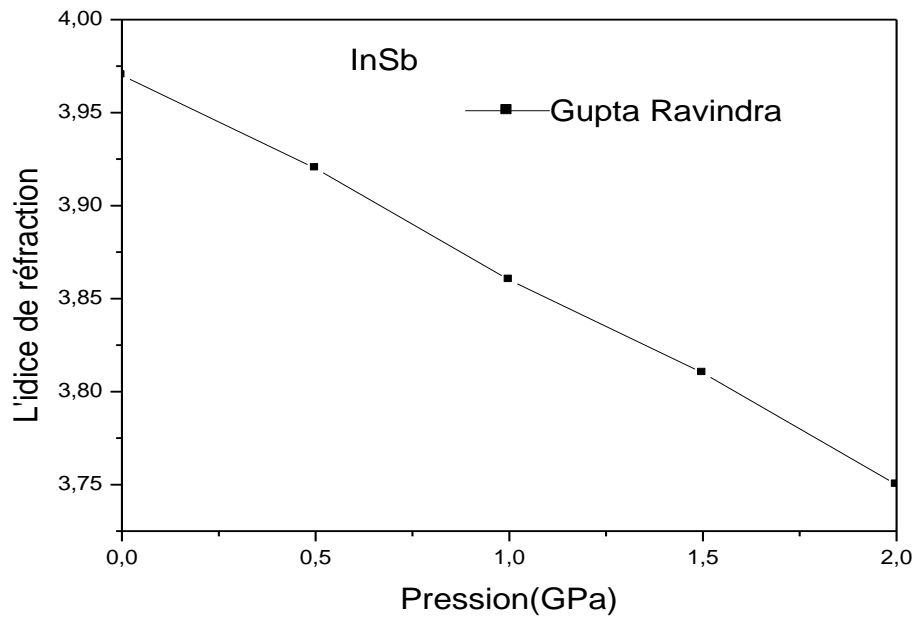


**Figure 3-9** La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le Modèle de Ravindra.

### 3.3.1.3- Modèle de Gupta Ravindra

Pour le modèle de Ravindra et Gupta Figure (III-10) l'indice de réfraction suit une interpolation de la forme :

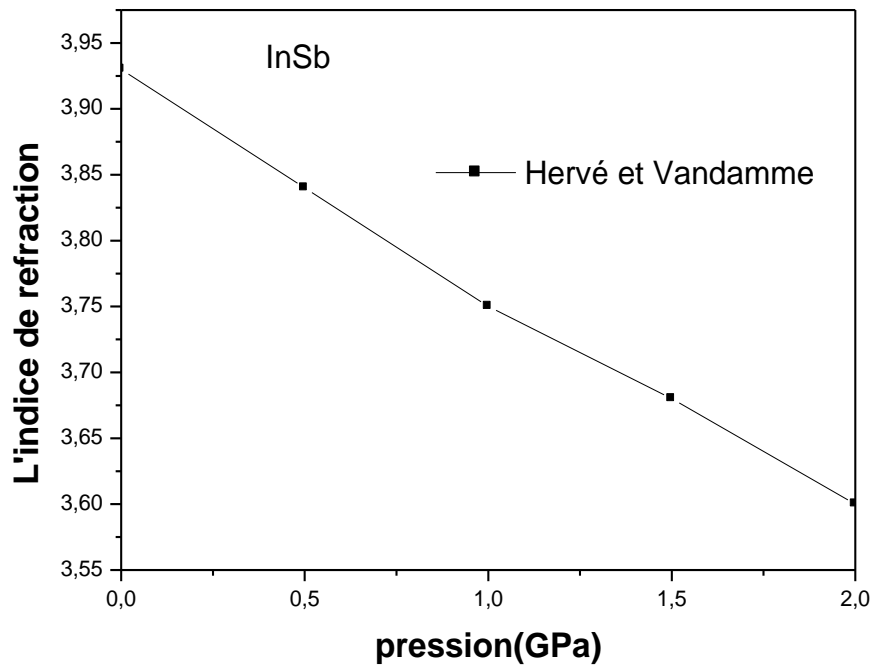
$$n = 3,97057 - 0,10429P - 0,00286P^2 \quad (3-11)$$



**Figure 3-10** La variation de l' indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Ravindra et Gupta

### 3.3.1.4- Modèle de Hervé et Vandamme

Pour le modèle de Hervé et Vandamme Figure (3-11) l'indice de réfraction suit une interpolation de la forme :



**Figure 3-11** La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Hervé et Vandamme.

### 3.3.1.5- Modèle de Reddy et Anjaneyulu

Pour le modèle de Reddy et Anjaneyulu Figure (3-12) l'indice de réfraction suit une interpolation de la forme :

$$n = 5,29343 - 0,81371P + 0,14286P^2 \quad (3-12)$$

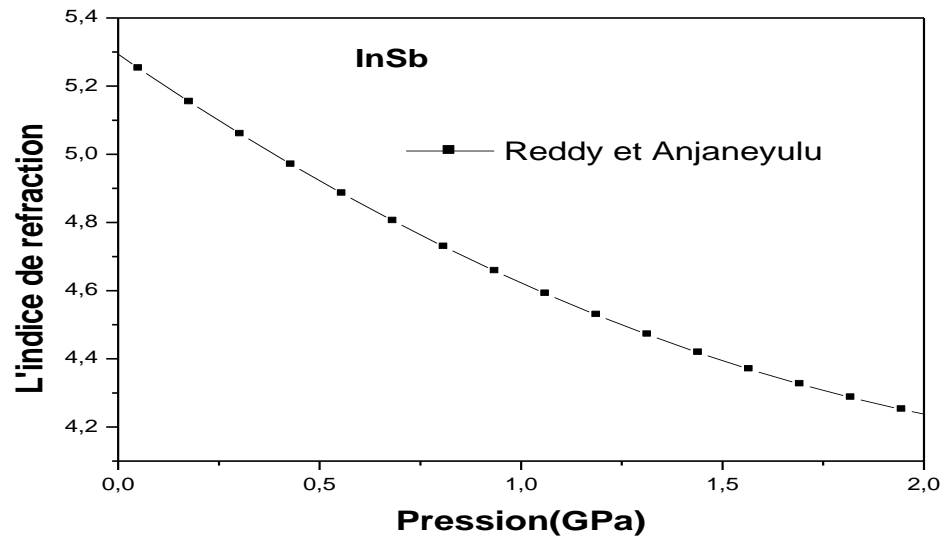


Figure 3-12 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Reddy et Anjaneyulu .

Pour l'étude quantitative de la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression nous avons vu nécessaire de présenter les cinq modèles d'indice sur la même courbe Figure (3-13), le comportement est non linéaire et non monotone.

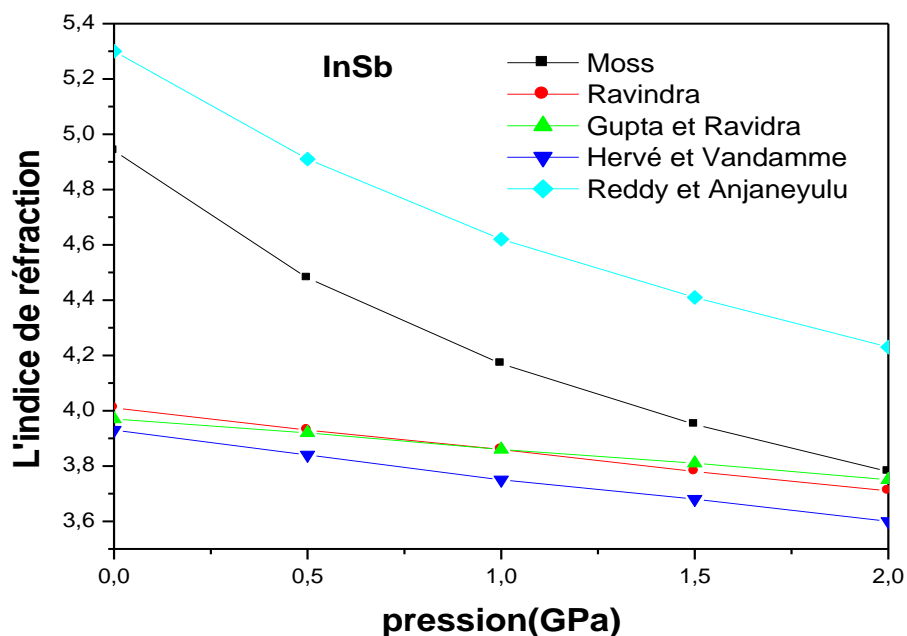


Figure 3-13 La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la pression p du InSb les cinq modèles.

Les valeurs d'indice de réfraction du InSb pour tous les modèles à pression nulle sont présentées dans le tableau (3-4) comparés aux valeurs théoriques, nous pouvons conclure que le modèle de Hervé et Vandamme donne des valeurs qui sont proches des valeurs théoriques.

**Tableau 3- 4** Calcul des indices de réfraction du InSb à pression nulle pour les cinq modèles comparés aux données théoriques.

Composé	n calculé à partir :					
InSb	MOSS	Ravindra	Gupta Ravidra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Valeur théorique de l'indice de réfraction
P=0GPa	4.95	4.01	3.97	3.93	5.30	$3.96^b : 4^a$

<sup>a)</sup> Données théoriques indiquées dans Ref. [5]

<sup>b)</sup> Données théoriques indiquées dans Ref. [6]

**Tableau 3-5** Validation du modèle empirique et détermination de la précision pour les composés binaires semi-conducteurs

Composé	Modèle de calcul le plus proche	Valeur de l'erreur relative
InSb	Ravindra et autres	0.25%

### 3.4- Étude des propriétés diélectriques

#### 3.4.1- Constante diélectrique de haute fréquence $\epsilon_\infty$

Basé sur les valeurs calculées de l'indice de réfraction n obtenu à partir des différents Modèles utilisés, la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_\infty$  a été estimée en utilisant l'expression suivante [1],

$$\epsilon_\infty = n^2 \tag{3-13}$$

Nos résultats le calcul de cette constante pour différents modèles sont présentés dans le tableau (3-6).

La variation de la constante  $\epsilon_\infty$  pour l' InSb en fonction de la pression p, calculée à partir des différents modèles , est présentée dans la figure ( 3-14):

Nous observons que  $\epsilon_{\infty}$  varie de façon monotone et non linéaire, elle diminue en allant de la pression 0 à 2 GPa. Ce comportement est qualitativement semblable à celui de l'indice de réfraction en fonction de la pression p. Cela n'est pas surprenant, étant donné que  $\epsilon_{\infty}$  est obtenu à partir de la relation (3-13). La diminution de la constante diélectrique de haute fréquence lorsque on augmente la pression indique que le InSb est un bon isolant pour les hautes pressions, autrement dit, la capacité du stockage de l'énergie électrique potentiel sous l'influence d'un champ électrique diminue.

**Tableau 3-6)** Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence pour InSb en fonction de la pression p comparées aux données théoriques.

	$\epsilon_{\infty}$ calculer à partir de :					
	Relation de Moss	Relation de Ravindra	Relation de Gupta Ravindr	Relation de Hervé et vandame	Relation Reddy et Anjaneyulu	Valeur théorique
P=0 GPa	24,40	16,08	15,76	15.44	28.09	15.68 <sup>β</sup> 15,6
P=0.5GPa	20,07	15,44	15,37	14.75	24.11	
P=1 GPa	17,39	14,82	14,89	14.06	21.34	
P=1.5GPa	15,60	14,29	14,52	13.54	19.45	
P =2GPa	14,29	13,76	14,06	12.96	17.89	

β) Données théoriques indiquées dans Ref .[6].

On remarque une diminution de Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence pour InSb en augmentant la pression des cinq Modèles

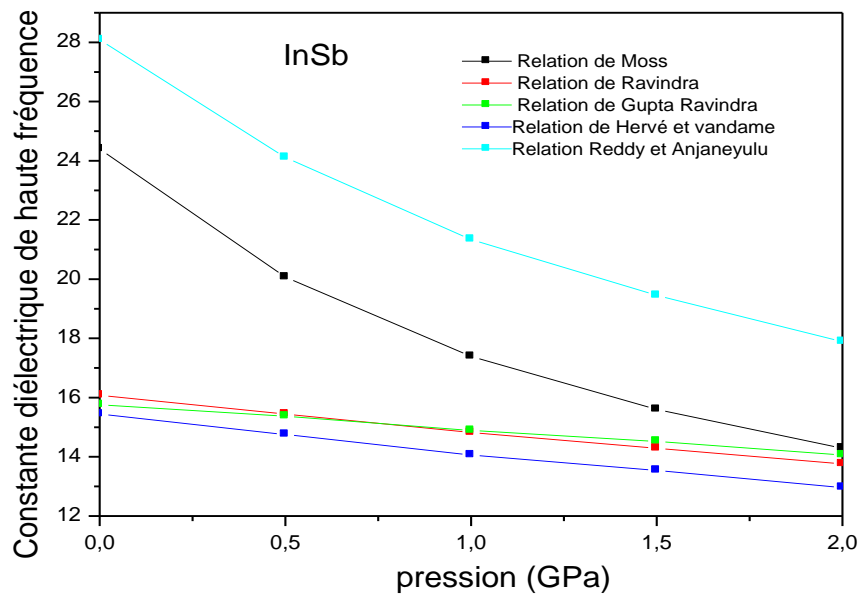


Figure 3-14 La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression p du InSb pour les cinq modèles.

### 3.4.2- Constante diélectrique statique $\epsilon_0$

Nous avons également calculé la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  en utilisant le modèle de Harisson relation suivant [19],

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + \vartheta \tag{3-14}$$

Ou  $\vartheta$  est donnée par la formule

$$\vartheta = \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \tag{315}$$

Avec  $\alpha_p$  est la polarité qui a été estime a partir de la définition de Vogl comme suit:

[20]

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \tag{3-16}$$

Ou  $V_S(3)$  et  $V_A(3)$  représentent les facteurs de formes pseudopotentiel symétriques et antisymétriques respectivement. Ce calcul de la constante statique a été appliqué pour les différents modèles proposés. Nos résultats sont donnés dans le tableau

$\alpha_c$  est la covalence définie comme,

$$\alpha_c = \sqrt{1 - \alpha_p^2} \tag{3-17}$$

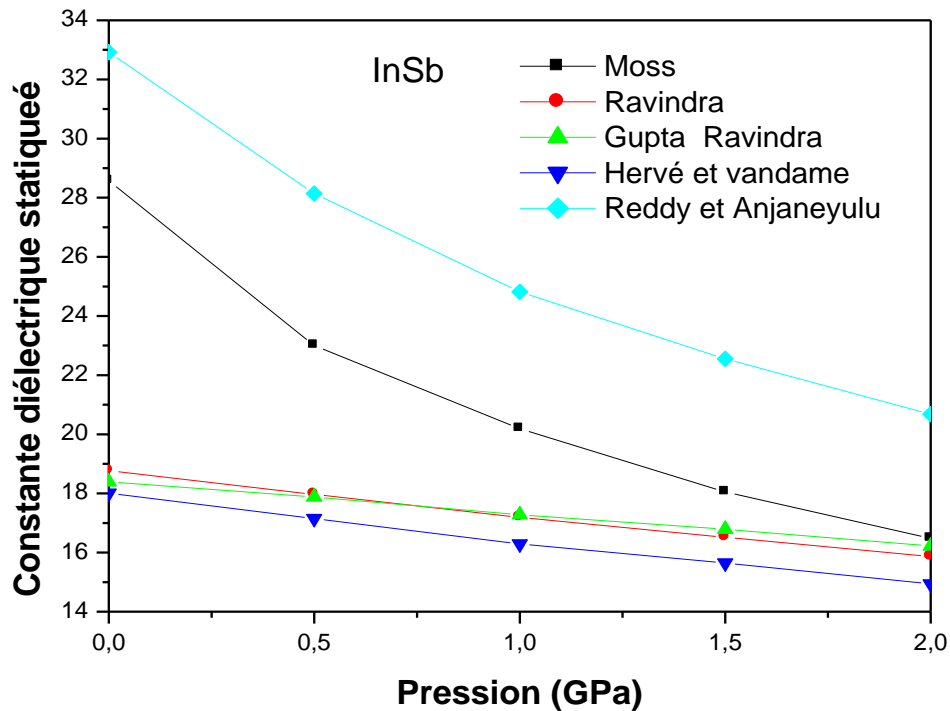
**Tableau 3-7** Valeurs de la constante diélectrique statique pour InSb en fonction de la pression comparées aux données théoriques

In Sb	$\epsilon_0$ calculer à partir de :					
	Relation de Moss	Relation de Ravindra	Relation de Gupta Ravindra	Relation de Hervé et vandame	Relation Reddy et Anjaneyulu	Valeur théorique
P=0 GPa	28,57	18,77	18.39	18.01	32.92	17.76 <sup>β</sup> 17,7
P=0.5 GPa	23.00	17,97	17,88	17,15	28,14	
P=1 GPa	20,19	17,19	17,28	16,29	24.82	
P=1.5 GPa	18.05	16.52	16,79	15,65	22.55	
P =2 GPa	16.48	15.87	16.22	14.94	20.68	

β) Données théoriques indiquées dans Ref. [6].

La variation de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  en fonction de la pression p utilisant les différents modèles est montré sur la figure (3-15).

On note que la valeur de  $\epsilon_0$  dépend du modèle utilisé, quoiqu'il existe une différence quantitative entre les différents modèles



**Figure 3-15** La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression  $p$  du In Sb pour les cinq modèles.

### 3.5- Conclusions

Enfin la dépendance de la pression  $p$  des propriétés électroniques, optique et diélectriques telles que, le gap énergétique, l'indice réfraction et les constantes diélectriques statique et de haute fréquence, du composé binaire InSb ont été étudiés. Les calculs sont principalement effectués par l'emploi de la méthode du pseudopotentiel empirique EPM. L'In Sb est trouvé qu'il est un semi-conducteur à gap direct pour toutes les pressions et que les valeurs des gaps dépendent vraiment de la pression. L'indice de réfraction  $n$  calculé à partir des différentes relations empiriques utilisées varie d'une manière monotone et non linéaire en fonction de la pression, Ce comportement est similaire pour la variation de la constante diélectrique statique et de haute fréquence en fonction de la pression.

## Références bibliographiques

- [1] W. Kara Mohamed, Les structures de bandes électroniques et les propriétés relatives aux semi-conducteurs quasi binaires ((Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider-Biskra), (2012).
- [2] F. Mezrag, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider-Biskra), (2012).
- [3] F. Benmakhlouf, R. Bechiri, N. Bouarissa, *Solid State Electron.* 47 (2003) 1335.
- [4] A. Gueddim, N. Bouarissa, A Villesuzanne, *Phys. Scr.* 80 (2009) 055702
- [5] S. Daoud, F. , N. Bouarissa, *Mater. Sci. Semicond. Process.* 31 (2015) 124
- [6] P. P. Paskov, Refractive indices of InSb, InAs, GaSb, InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub>, and In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Sb: effects of free carriers, *Journal of Applied Physics* 81 (1997) 1890
- [7] H. Algarni, O. A. Al-Hagan, N. Bouarissa, M. A. Khan, T. Alhuwaymel, Dependence on pressure of the elastic parameters and microhardness of InSb, *Infrared Physics & Technology*, 86 (2017) 176
- [8] A. Bechiri, N. Bouarissa, *Superlattices Microstruct.* 39 (2006) 478
- [9] K. Kassali, N. Bouarissa, *Microelectron. Eng.* 54 (2000) 277
- [10] N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 124 (2010) 336
- [11] N. Bouarissa, *Infrared Phys. Technol.* 40 (1999) 343
- [12] N. Bouarissa, S. Saib, *J. Appl. Phys.* 108 (2010) 113710
- [13] N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 65 (2000) 107
- [14] T. S. Moss, A relationship between the refractive index and the infra-red threshold of sensitivity for photoconductors. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 63 (1950) 167.
- [15] N. M. Ravindra, S. Auluck, V. K. Srivastava On the Penn gap in semiconductors. *Physica status solidi (b)*, 93 (1979) K155
- [16] V. P. Gupta, N. M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715

- [17] P. Herve, L. K. J. Vandamme, General relation between refractive index and energy gap in semiconductors. *Infrared physics & technology*, 35 (1994) 609.
- [18] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu, Analysis of the Moss and Ravindra relations. *Physica status solidi. B. Basic research*, 174 (1992) K91.
- [19] S. Y. Davydov, S. K. Tikhonov, Pressure dependence of the dielectric and optical properties of wide-gap semiconductors. *Semiconductors*, 32 (1998) 947.
- [20] P. Vogl, Dynamical effective charges in semiconductors: A pseudopotential approach. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 11(1978) 251

---

# **Conclusion générale**

---

## Conclusion générale

A la fin, dans ce travail nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques telles que, le gap énergétique, l'indice de réfraction  $n$  et la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$ , du semi-conducteur InSb dans la phase zinc-blende. Ces propriétés ont été examinées en fonction de la pression  $p$  pour ce faire, nous avons utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels. Nos résultats ont montré que la bande interdite énergétique direct du composé binaire semi-conducteur sous investigation augmente d'une façon linéaire et monotone avec l'augmentation de la pression, par contre les gaps indirects varient d'une façon non linéaire et non monotone avec l'augmentation de pression. L'indice de réfraction a aussi montré un comportement linier et monotone par rapport à la pression. Contrairement au comportement de la bande interdite énergétique, l'indice de réfraction diminue avec la pression. Cela est vrai pour tous les modèles optiques utilisés. Donc, qualitativement, le même comportement de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composés binaire semi-conducteur. Quantitativement, le modèle de Ravindra et autres a donné les plus proches valeurs pour l'indice de réfraction comparées aux valeurs théoriques. La constante diélectrique de haute fréquence du InSb diminue lorsqu' on augmente la pression ce qui indique que le InSb est bon isolant pour les hautes pressions. Le même comportement est remarqué pour la variation de La constante diélectrique. Finalement, L'effet de la pression  $p$  sur le composé binaire InSb influe sur les propriétés électroniques optiques et diélectriques tels que le gap énergétique qui augmente quand la pression augmente cela peut-être justifier par la diminution du paramètre de maille sous l'effet de la pression qui permettant l'augmentation des interactions électroniques, nous pouvons remarquer que le gap énergétique du InSb reste à gap direct pour toute les pressions inférieur a la pression de transition de phase.

## Liste des figures

Figure 1-1 Matériaux semi-conducteurs InSb.....	5
Figure 1-2 différent matériaux .....	6
Figure 1-3 L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium) .....	7
Figure 1-4 Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux.....	8
Figure 1-5 La transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction.	10
Figure 1-6 Apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente.....	10
Figure.1.7 La dualité de la conductivité électrique dans les semi-conducteurs.....	11
Figure.1.8. Le bilan électronique pour un semi-conducteur intrinsèque. a. Diagramme des bandes d'énergie b. Densités d'états énergétiques c. Distributions de Fermi-Dirac d. Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p) b.....	12
Figure 1.9 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N.....	13
Figure 1.10 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P.....	14
Figure.1.11 Le bilan électronique pour un semi-conducteur extrinsèque.....	15
Figure 1.12 Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs .....	17
Figure 1.13 Structure de bande d'énergie du : A-gap indirect et B-gap direct.....	18
Figure 1.14 Représentation schématique de la substitution d'un atome de bore à un atome de silicium ( exemple du dopage P)avec la structure de bande énergétique relative.....	22

Figure 1.15 Représentation schématique de la substitution d'un atome d'Arsenic à un atome de silicium ( exemple du dopage N)avec la structure de bande énergétique relative.....	23
Figure 2.1 La relation entre la structure cristalline et la structure de bandes des matériaux semi-conducteurs.....	28
Figure. 2 .2 La structure zinc blende des matériaux semi-conducteurs.....	29
Figure 2.3 Schéma montrant les structures atomiques des semi-conducteurs.....	30
Figure 2.4 Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.....	31
Figure 2.5 L'effet d'un champ électrique à l'échelle microscopique.....	33
Figure 2.6 Les structures des bandes énergétiques : Métal, semi-conducteur, isolant.....	34
Figure 2.7 Les transitions optique directes et indirectes.....	35
Figure 2.8 Conductivité électrique à température ambiante de quelque corps solides.....	36
Figure. 2.9 La réponse d'un diélectrique à une excitation alternative.....	40
Figure 2.10 La variation de la constante diélectrique en fonction de la fréquence.....	41
Figure 2.11 La relation entre l'optique et le diélectrique.....	41
Figure. 2.12 Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.....	45
Figure 3.1 La structure de bande électronique du composé binaire InSb à pression 0 GPa est à pression 1GPa.....	55
Figure 3.2 La structure de bande électronique du composé binaire InSb à pression0GPa est à pression 1.5GPa.....	56
Figure 3.3 La structure de bande électronique du composé binaire InSb à pression 0 GPa est à pression 2 GPa.....	56
Figure 3.4 La variation du gap d'énergie $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ en fonction de la pression du composé binaire semi-conducteur InSb.....	58

Figure 3.5 La variation du gap d'énergie $E_{\Gamma^X}$ en fonction de la pression du composé binaire semi-conducteur InSb.....	59
Figure 3.6 La variation du gap d'énergie $E_{\Gamma^L}$ en fonction de la pression du composé binaire semi-conducteur InSb.....	59
Figure 3.7 Gaps d'énergies direct et indirect fonction de la pression p du composé binaire semi-conducteur InSb.....	60
Figure 3.8 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le Modèle de Moss.....	63
Figure 3.9 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression p pour le Modèle de Ravindra.....	64
Figure 3.10 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Ravindra et Gupta.....	65
Figure 3.11 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Hervé et Vandamme.....	66
Figure 3.12 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Reddy et Anjaneyulu.....	67
Figure 3.13 La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la pression p du InSb les cinq modèles.....	67
Figure 3.14 La variation de la constante diélectrique de haute fréquence fonction de la pression p du InSb pour les cinq modèles.....	70
Figure 3.15 La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la pression p du InSb pour les cinq modèles.....	72

## Liste des tableaux

Tableau 1.1 Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs III-V.....	21
Tableau 1.2 Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs II-VI.....	21
Tableau 2.1 Morceaux choisis du tableau périodique (en gras : éléments III et V).....	30
Tableau 2.2 Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs IIIV.....	32
Tableau 2.3 Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique.....	35
Tableau 2.4 Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique.....	42
Tableau 2.5 Constantes diélectriques statique et optique de quelques matériaux semi-conducteurs à 300 K.....	43
Tableau 3.1 les facteurs de forme pseudopotentiels des composé InSb pour différentes pression.....	55
Tableau 3.2 Gap d'énergie pour le composé binaire InSb comparés théoriques .....	57
Tableau 3.3 Calcul des indices de réfraction du InSb en fonction de la pression.....	62
Tableau 3.4 Calcul des indices de réfraction du InSb à pression nulle pour les cinq modèles comparés aux données théoriques.....	68
Tableau 3.5 Validation du modèle empirique et détermination de la précision pour les composés binaires semi-conducteurs.....	68
Tableau 3.6 Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence pour InSb en fonction de la pression p comparées aux données théoriques.....	69
Tableau 3.7 Valeurs de la constante diélectrique statique pour InSb en fonction de la pression comparées aux données théoriques.....	71

## Abstract

In this work, we have studied the optical, electronic and dielectric properties of the binary semiconductor compound InSb, and the main objective of this work is to study the effect of a pressure ranging from 0 GPa to 2 GPa on the semiconductor compound. This has shown us that the compound InSb is mechanically stable in the pressure range st

## Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés optiques, électroniques et diélectriques du composé semi-conducteur binaire InSb, et l'objectif principal de ce travail est d'étudier l'effet d'une pression allant de 0 GPa à 2 GPa sur le composé semi-conducteur binaire InSb. Cela nous a montré que le composé InSb est mécaniquement stable dans la gamme de pression étudiée.

## الملخص:

قمنا في هذا العمل بدراسة الخواص البصرية والالكترونية والعازلة للمركب نصف الناقل الثنائي InSb والهدف الاساسي في هذا العمل دراسة تأثير الضغط الذي يتراوح من 0 GPa الى 2 GPa على المركب نصف الناقل الثنائي ذلك باستعمال طريقة شبه الكمون EPM وظهرت لنا نتائجنا مقارنة بشكل عام مع النتائج النظرية في المقالات علمية مما تبين لنا ان المركب InSb مستقر ميكانيكيا في نطاق الضغط المدروس