

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/07/2021



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

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Hocini Manel

Intitulé

Effet du confinement quantique sur les propriétés électroniques et optiques des matériaux semiconducteurs nanostructurés II-VI

Soutenu le / /2021 devant le jury composé de:

Bouarissa Nadir

Université de M'sila

Président

Mezrag Fadila

Université de M'sila

Rapporteur

Fares Nour El-Houda

Université de Bordj Bou Arréridj

Examineur

Année universitaire : 2020/2021

Remerciements

Avant tout Je remercie Allah le tout puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

*Je tiens à exprimer ma grande gratitude envers mon encadreur **Pr MEZRAG Fadila** pour ses précieux conseils, son aide, sa compréhension, sa disponibilité et sa gentillesse.*

*Aussi je remercie les membres du jury, le président de jury, **Pr Bouarissa Nadir** et Mme l'examinatrice **Nour El-Houda Fares**, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail.*

Mes remerciements vont également à tous les professeurs du département de physique.

DÉDICACE

Je dédie ce travail :

*À celle qui s'est sacrifiée pour mon bonheur et ma
réussite , à ma chère mère.*

*À mon cher père, qui a veillé tout au long de ma vie à m'encourager, à
me donner l'aide et à me protéger.*

À mes frères

À ma sœur Fatima zohra

À ma cousine Abla Aib

À toute la famille HOCINI

À toute la famille LEMOUNES

À mes amies : Ouarda Mahroug , Mouna Mansouri

Table des matières

Remerciement	I
Dédicace	II
Tables des matières	III
Introduction générale	1
Chapitre 01 : Notions fondamentales sur les semiconducteurs	
1. Introduction.....	3
2. Définitions d'un semiconducteurs.....	3
3. Les différents types des semiconducteurs.....	3
3.1. Les semiconducteurs intrinsèques.....	3
3.2. Les semiconducteurs extrinsèques.....	3
4. Classification des semiconducteurs.....	4
. Les semiconducteurs composés.....	4
. Les semiconducteurs II-VI.....	5
5. Les Propriétés physiques des Semiconducteurs	6
5.1. Propriétés structurales	6
5.1.1. Structure Zinc-blende (Sphalérite).....	6
5-1-2 Paramètre de maille.....	7
5.2. Propriétés électroniques.....	8
5.2.1. Structure de bandes électronique.....	8
5.2.2. Notion de bandes d'énergie.....	10
5.2.3. Gap direct et indirect.....	10
5.3. Propriétés optiques.....	11
5.3.1 . Indice de réfraction.....	11
5.3.2 . Constante diélectrique.....	11
6. Applications.....	13
7. Conclusion.....	14
Références du chapitre 1.....	15
Chapitre 02 : Les semiconducteurs nanostructurés	
1. Introduction.....	17
2. Définitions.....	17
2.1 Nanostructures.....	17

2.2 Nanoscience.....	17
2.3. Nanotechnologie.....	17
2.4. Nanomatériaux.....	17
3. Classification des nanomatériaux.....	18
4. Types de nanomatériaux.....	19
5. Les nanomatériaux semi-conducteurs II-VI.....	20
6. L'effet du confinement sur propriétés électroniques et optiques	20
7. Les Applications des semiconducteurs nanostructurés.....	22
8. Conclusion.....	23
Références du chapitre 2	24
Chapitre 03 : Résultats et Discussion	
Introduction.....	26
Les propriétés électroniques des matériaux semiconducteurs nanostructurés II-VI	26
Les propriétés optiques des semiconducteurs nanostructurés II-VI	42
Conclusion	55
Références du chapitre 3	56
Conclusion générale	58
Liste des figures	60
Liste des tableaux	63
Résumé	64

Introduction générale

Introduction générale

Dans La science des 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 importante des matériaux et cela grâce à la richesse de leur propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectroniques. [1]

Les nanotechnologies constituent un champ de recherche et de développement multidisciplinaire qui reposent sur la connaissance et la maîtrise de l'infiniment petit. Le préfixe (nano) est devenu très à la mode, l'étude des propriétés optiques linéaires et non-linéaires des cristaux semiconducteurs de dimensions nanométriques est devenue depuis quelques années un important domaine de recherche, qui se justifie pour des raisons aussi bien fondamentales que technologiques. Dans ce contexte, une recherche vaste a été développée pour l'utilisation de semiconducteurs de taille nanométrique ; ce qui a permis d'exploiter leurs incroyables propriétés. Sous forme de couches minces, ces derniers ont permis l'intégration de milliers de composants conduisant ainsi à la miniaturisation des dispositifs utilisés dans des applications technologiques telles que: les diodes électroluminescentes, les dispositifs laser, et les cellules photovoltaïques[2].

La méthode utilisée dans ce travail est 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 propriétés physique.

Notre travail de mémoire est l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des semi-conducteurs binaires nanostructurés : MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe du type II-VI cristallisant dans la structure zinc-blende. Ce travail est l'investigation des paramètres de la structure de bandes électroniques, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence à l'échelle nanométrique et d'étudier l'effet du confinement sur les propriétés physiques des matériaux.

Ce mémoire est constitué de trois chapitres et une conclusion générale:

Dans le premier chapitre des notions fondamentales sur semi-conducteurs.

Le deuxième chapitre porte sur les semiconducteurs nanostructurés, et le confinement quantique.

Dans le dernier chapitre, les résultats de simulation vont être présentés d'une manière simple à comprendre, interprétés, comparés à des résultats théoriques et indiquant les performances des modèles optimisés.

Finalement, une conclusion générale.

Références

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

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

Chapitre 1

Notions fondamentales sur les Semiconducteurs

Chapitre 1: Notions fondamentales sur les semiconducteurs

1. Introduction

Les matériaux peuvent être classés en trois groupes: les conducteurs, les semiconducteurs et les isolants. Dans ce chapitre, Nous proposons de donner des rappels bibliographiques sur les propriétés physiques : structurales, électroniques et optiques des semiconducteurs. Nous nous intéressons plus en détail aux composés semi-conducteurs II-VI.

2. Définitions d'un semiconducteur :

Un semi-conducteur est un matériau dont la conductivité électrique intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sim 10^6 \Omega^{-1} \text{Cm}^{-1}$) et des isolants ($\sim 10^{-22}$ à $\sim 10^{-14} \Omega^{-1} \text{Cm}^{-1}$). Cette conductivité varie sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau) [1-2].

3. Les différents types des semiconducteurs

Il existe deux types de semiconducteurs, l'un pur dit intrinsèque et l'autre dopé appelé extrinsèque :

3.1 . Les semiconducteurs intrinsèques

Un semiconducteur est dit intrinsèque, si ces propriétés électriques sont entièrement dues à sa composition chimique et à sa structure cristalline et non pas à la présence d'impuretés. Ce comportement correspond à son état pur, donc parfait ; sans défaut structural ou impuretés. [3]

3.2. Les semiconducteurs extrinsèques

Le semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques, tout en gardant le degré de pureté initial nettement supérieur au taux du dopage [2].

il y a deux types de dopage:

- Semi-conducteur de type N

Les dopants de type N sont également connus comme donneurs, car ils sont des éléments ou des composés avec cinq électrons de valence ou plus qui donneront un électron après que les quatre autres forment des liaisons covalentes avec les matériaux intrinsèques dans lequel ils ont été placés. Dans les matériaux de type N les électrons sont des porteurs majoritaires et les trous des porteurs minoritaires.

- Semi-conducteur de type P

Les dopants de type P, ou accepteurs sont des éléments ou des composés ayant trois au moins d'électrons de valence et acceptent des électrons. Les matériaux de type P ont des trous comme porteurs majoritaires et des électrons comme porteurs minoritaires.

La figure 1-1 présente la structure de bandes des deux types N et P.

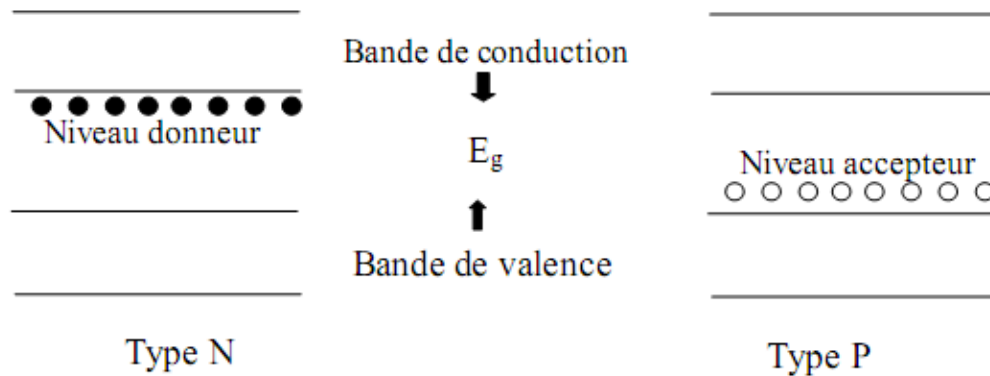


Figure 1-1 La structure de bandes des semiconducteurs type N et P [4].

4. Classification des semiconducteurs

Les matériaux semiconducteurs les plus connus sont des solides inorganiques Cristallins tels que [5]:

- **Semiconducteurs élémentaires** : il ya deux type:

simples: Si, Ge, (colonne IV).

complexes: Se (colonne VI).

- **Semiconducteurs composés** :

binaires: sont composés de deux atomes par exemple : MgSe ,CdTe ,ZnS , ZnSe ,ZnTe objet de notre étude.

Ternaires: s'il y a substitution de deux atomes sur l'un des sous réseaux.

Quaternaires 1+3: s'il y a substitution de trois atomes sur des sous réseaux.

Quaternaires 2+2: s'il y a substitutions de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux.

Tableau 1-1 Divers groupes de semiconducteurs [6].

Type	Groupe	Semi-conducteurs
Covalent	IV	<i>Si, Ge, C (diamant), SiC, SiGe...</i>
	III-V	<i>AlAs, GaAs_xInAs, AlSb, AlN, GaSb ...</i>
Polaire binaire	II-VI	<i>HgS, CdS, ZnTe, CdTe, ZnSe, CdSe, Cds, ZnS, ZnO...</i>
	I-VII	<i>CuCl</i>
Polaire ternaire	III-III-V	<i>AlInAs, AlGaP, AlGaAs, Al_xGa_{1-x}As, InGaP, Cd_{1-x}Mn_xAs ; Ga_{1-x}Al_xAs ...</i>
	III-V-V	<i>GaAsP, InAsSb</i>
	II-II-VI	<i>HgCdSTe</i>
Polaire quaternaire	III-III-III-V	<i>AlGaInP</i>
	III-III-V-V	<i>Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}</i>
	II-IV-V ₂	<i>ZnSiP₂</i>
	I-III-VI ₂	<i>AgGaS₂</i>

• Les semiconducteurs II-VI

Les semiconducteurs II-VI sont constitués par l'association d'un élément de la colonne II avec un élément de la colonne VI de la classification périodique de Mendeleïev (Tableau1-1).

IA-B	IIA-B	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B
<i>Li^{Z=3}</i>	<i>Be⁴</i>	<i>B⁵</i>	<i>C⁶</i>	<i>N⁷</i>	<i>O⁸</i>	<i>F⁹</i>
<i>Na¹¹</i>	<i>Mg¹²</i>	<i>Al¹³</i>	<i>Si¹⁴</i>	<i>P¹⁵</i>	<i>S¹⁶</i>	<i>Cl¹⁷</i>
<i>Cu²⁹</i>	<i>Zn³⁰</i>	<i>Ga³¹</i>	<i>Ge³²</i>	<i>As³³</i>	<i>Se³⁴</i>	<i>Br³⁵</i>
<i>Ag⁴⁷</i>	<i>Cd⁴⁸</i>	<i>In⁴⁹</i>	<i>Sn⁵⁰</i>	<i>Sb⁵¹</i>	<i>Te⁵²</i>	<i>I⁵³</i>
<i>Au⁷⁹</i>	<i>Hg⁸⁰</i>	<i>Tl⁸¹</i>	<i>Pb⁸²</i>	<i>Bi⁸³</i>	<i>Po⁸⁴</i>	<i>At⁸⁵</i>
I	II	III	IV	V	VI	VII
			Si ; Ge...			
			GaAs ; AlAs ; InP ...			
			CdS ; CdSe ; CdTe ; ZnS ; ZnSe....			
			CuCl....			

Figure 1-2 Extrait du tableau périodique des éléments chimiques et composition en SC binaires suivant leurs groupes [6].

La dernière orbitale (s) des atomes du groupe (II) ne possède que deux électrons, tandis que la couche électronique périphérique des atomes du groupe (VI)

renferme six électrons de valence dont deux sur l'orbitale (s) et quatre sur l'orbitale (p). Un matériau (II-VI) comportera donc des liaisons hybrides de type (sp_3) où chaque cation (élément II) se retrouve dans un environnement tétraédrique d'anions (élément VI) et inversement. Ces liaisons sont polaires, avec un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente [7].

5. Propriétés physique des semiconducteurs

5.1. Propriétés structurales des semiconducteurs II-VI

Les semiconducteurs II-VI peuvent avoir des structures cristallines de deux types : la structure cubique du type Sphalérite et la structure hexagonale du type Wurtzite, qui toutes les deux se caractérisent par une disposition tétraédrique des atomes. Dans ces composés on peut assister, sous certaines conditions, à des transitions d'une structure à l'autre ou bien à la coexistence des deux structures [8].

5.1.1. Structure Zinc-blende (Sphalérite)

C'est une structure cubique qui comporte deux réseaux cubiques à faces centrées décalées l'une par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale du cube, donc la structure Zinc-blende du groupe II-VI est obtenue en remplaçant les deux atomes identiques dans la maille unitaire d'une structure diamant par deux atomes différents, l'un appartenant au groupe II et l'autre au groupe VI [9]; comme indiqué dans la Figure 1-3.

Ces atomes occupent des positions bien déterminées, définies par les coordonnées suivantes: Quatre atomes du groupe II dans les positions: (0, 0, 0); (0, 1/2, 1/2); (1/2, 0, 1/2); (1/2, 1/2, 0). Quatre atomes du groupe VI dans les positions: (1/4, 1/4, 1/4); (1/4, 3/4, 3/4); (3/4, 1/4, 3/4); (3/4, 3/4, 1/4).

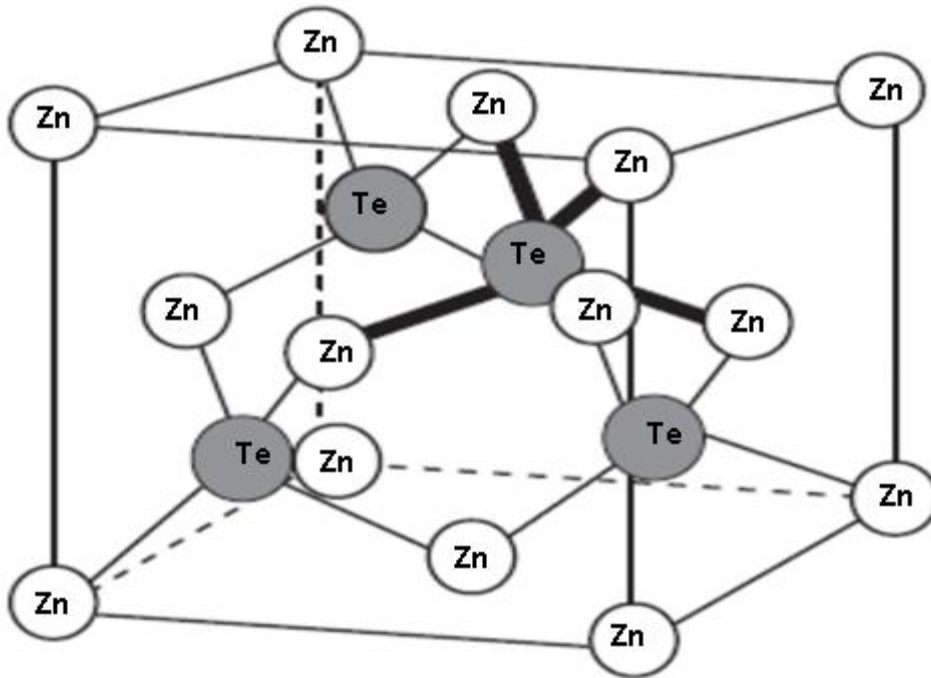


Figure 1-3 Exemple: Structure cubique Zinc blende (Sphalérite) de ZnTe.

5-1-2 Paramètre de maille

La maille cristalline est définie par trois paramètres a , b , c et par trois angles qu'ils font entre eux comme c'est présenté sur figure (1-4), suivant les valeurs relatives de six grandeurs on définit les différentes structures cristallines [10].

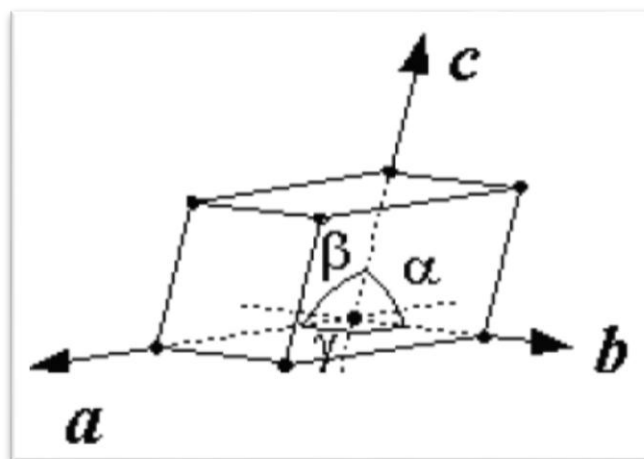


Figure 1-4 Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.

Tableau 1-2 Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs II-VI [11].

Matériau	a(Å)	Structure
MgSe	5.91	zb
CdTe	6.481	zb
ZnS	5.41	zb
ZnSe	5.668	zb
ZnTe	6.104	zb

5.2. Propriétés électroniques des semi-conducteurs II-VI

5.2.1. Structure de bande d'énergie

Les composés binaires II-VI sont des semi-conducteurs à bande interdite directe : le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se situent au centre de la zone de Brillouin (point Γ sur la figure (1-5) [12].

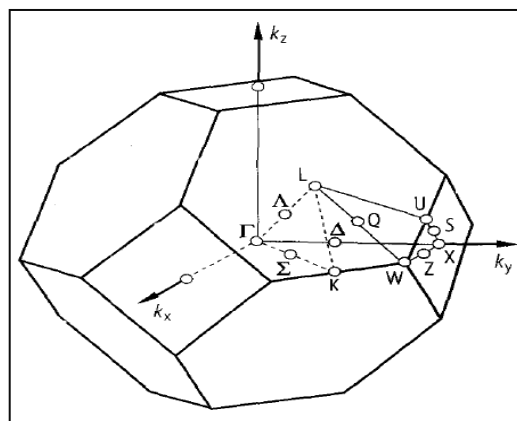


Figure 1-5 la zone de Brillouin pour une structure zinc-blende.

L'absorption et l'émission de la lumière peuvent alors se faire avec conservation du vecteur d'onde sans impliquer d'interaction avec d'autres quasi-particules comme les phonons.

La bande de conduction est deux fois dégénérée au point Γ et possède la symétrie Γ_6 . On attribue aux états de la bande de conduction un spin effectif $s = 1/2$. Le couplage spin-orbite décompose le maximum de la bande de valence en un quadruplet de symétrie Γ_8 (spin effectif $j = 3/2$) et un doublet Γ_7 (spin effectif $j = 1/2$). Leur différence d'énergie est Δ_{SO} . Dans les matériaux considérés, ces deux niveaux sont suffisamment séparés pour qu'on puisse les traiter comme complètement découplés.

Les composés II-VI se caractérisent par la transition directe avec un minimum au point $\vec{k}=0$. La raison à cela est que le rapport des intervalles $\Gamma_{1c} - \Gamma_{2'}$ et

$\Gamma_{2'} - \Gamma_{1v}$ dans les cristaux homopolaires est plus petit que les rapports correspondants aux frontières des zones, par exemple $(L_{2'} - L_{1c}) / (L_{1c} - L_{1v})$. Il en découle que le point $\Gamma_{2'}$ se trouve abaissé par rapport à L_1 et X_1 . La tendance générale, est telle que pour une formule donnée des composés II-VI par exemple, la largeur de bande interdite tend à diminuer lorsque le numéro atomique moyen augmente. Cette diminution de la largeur de la bande interdite est due au fait que les niveaux «s» cherchent à se situer au-dessous des autres niveaux électroniques, notamment les niveaux «p» des atomes les plus lourds.

Les informations concernant la bande de valence ont été obtenues par l'étude des propriétés électriques. Ces données ont permis de postuler l'existence d'un maximum en $\vec{k} = 0$, dans le cas où la masse effective moyenne des trous est $\sim 0.6 m_0$. Une étude de piézo-résistance confirme ces résultats. Ces études des propriétés optiques confirment également le modèle d'une bande interdite directe [12].

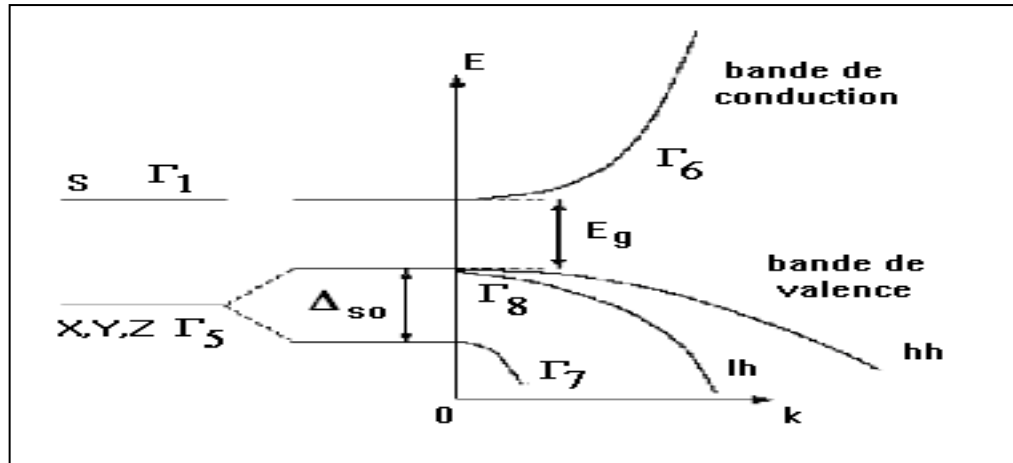


Figure 1-6 Schéma de bandes au centre de la zone de Brillouin [14].

5.2.2. Notion de bandes d'énergie

Dans un atome isolé, les électrons ne peuvent se trouver que dans certains états possibles caractérisés par des paramètres quantiques auxquels correspondent des niveaux énergétiques discrets. Quand des atomes identiques se rapprochent pour former un solide, l'interaction qui apparaît entre les électrons des atomes du cristal démultiplie chaque niveau discret en un ensemble d'états infiniment proches: une bande d'énergie électronique dans un cristal résulte donc de l'hybridation des niveaux individuels des atomes qui composent le cristal. Les énergies possibles pour un électron dans un solide forment ce qu'on appelle des bandes permises séparées par des bandes interdites. Les orbitales liantes forment la bande de valence (la dernière pleine) et les anti-liantes celle de conduction (la première vide), séparées par une bande interdite (gap) de largeur E_g (Figure 1-12) [15].

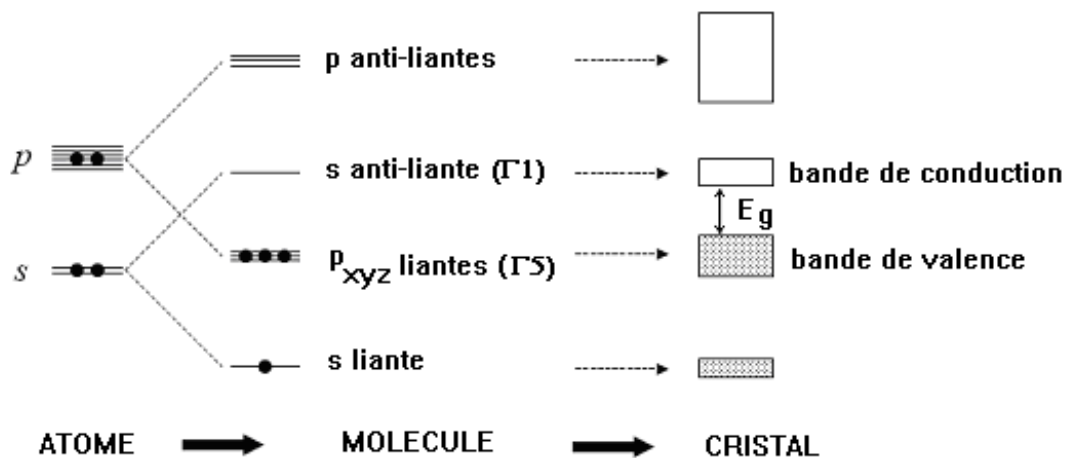


Figure 1-7 Niveaux électroniques dans un atome isolé et dans un cristal.

5.2.3. Gap direct et indirect :

En physique des semi-conducteurs, on appelle gap la largeur de la bande interdite, laquelle est l'intervalle d'énergies situé entre l'état de plus basse énergie de la bande de conduction et l'état de plus haute énergie de la bande de valence [16]. On parle de gap direct lorsque ces deux extremums correspondent au même quasimoment et de gap indirect lorsque la différence entre les vecteurs d'onde de ces deux extremums est non nulle [17].

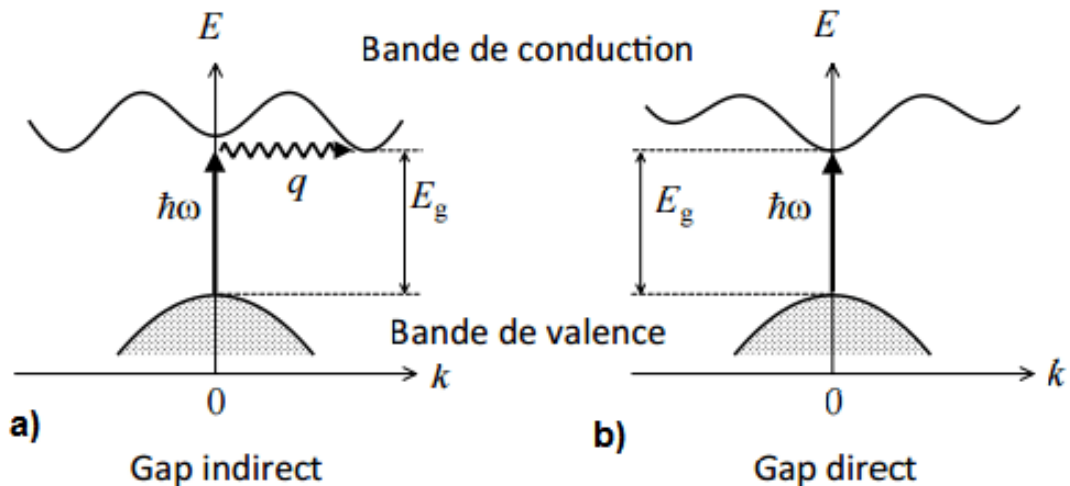


Figure 1-8 La structure des bandes d'énergie: gap direct et gap indirect [17].

5.3. Etude des propriétés optiques et diélectriques:

5.3.1. L'indice de réfraction:

La connaissance du gap d'énergie nous a permis de calculer l'indice de réfraction n et de voir sa dépendance en fonction de paramètre de maille suivant plusieurs modèles qui ont été envisagées pour apporter le gap énergétique du semi-conducteur à leur indice de réfraction.

Cet indice de réfraction (n) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ($C=299\,792\,458$ Km/s) et la vitesse de la lumière dans le matériau[18].

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoelectroniques comme les diodes lasers à hétérojonction, les amplificateurs optiques et les fibres optiques [19].

5.3.2. Les constantes diélectriques:

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.

Autrement dit, les excitations propres d'un matériau sont décrites par la fonction diélectrique $\varepsilon(\omega, \vec{k})$, cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur d'onde \vec{k} . Pour les petites valeurs de \vec{k} , cette fonction sera seulement fonction de la fréquence, on parlera ainsi de la constante diélectrique statique qui correspond à l'équilibre thermodynamique et la constante diélectrique $\varepsilon(\infty)$ 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. [3]

Le tableau 1-3 présente des valeurs expérimentales statique et optique de quelques matériaux Semiconducteurs.

Tableau 1-3 Les valeurs expérimentales de la constante diélectrique statique et de haute fréquence de quelques matériaux Semiconducteurs étudiés.

Matériau	Constante diélectrique statique $\varepsilon(0)$	Constante diélectrique optique $\varepsilon(\infty)$
MgSe		4.58 ^{a)}
CdTe	9.8 ^{b)}	8.49 ^{c)}
ZnS	8.9 ^{d)}	5.7 ^{d)}
ZnSe	9.1 ^{d)}	6.11 ^{d)}
ZnTe	10.3 ^{d)}	7.28 ^{d)}

^{a)} Ref [20].

^{b)} Ref [21].

^{c)} Ref [22].

^{d)} Ref [23].

6. Applications des matériaux II-VI :

Les applications des matériaux semiconducteurs II-VI se focalisent principalement sur les détecteurs des radiations dans la région proche infrarouge, ce qui est particulièrement intéressant, puisque la grande partie des émissions de radiation thermiques est dans cette région pour un large intervalle de température. Les semiconducteurs II-VI possèdent de bonnes propriétés photoélectriques. Les matériaux II-VI luminescent tous dans le visible. C'est en particulier dans l'infrarouge que les tellures ont trouvé leur principales applications. Quant au visible, les récentes diodes électroluminescentes LED vertes à base de ZnTe [24] et les diodes lasers jaune-vertes à base de ZnSe [25] conquièrent un marché encore vierge puisqu'au contraire du rouge et du bleu il n'existe pas encore de diodes lasers commercialisées dans la gamme des 550 - 590 nm. la figure ci-dessous montre les trois phénomènes et leurs domaines d'applications. [26]

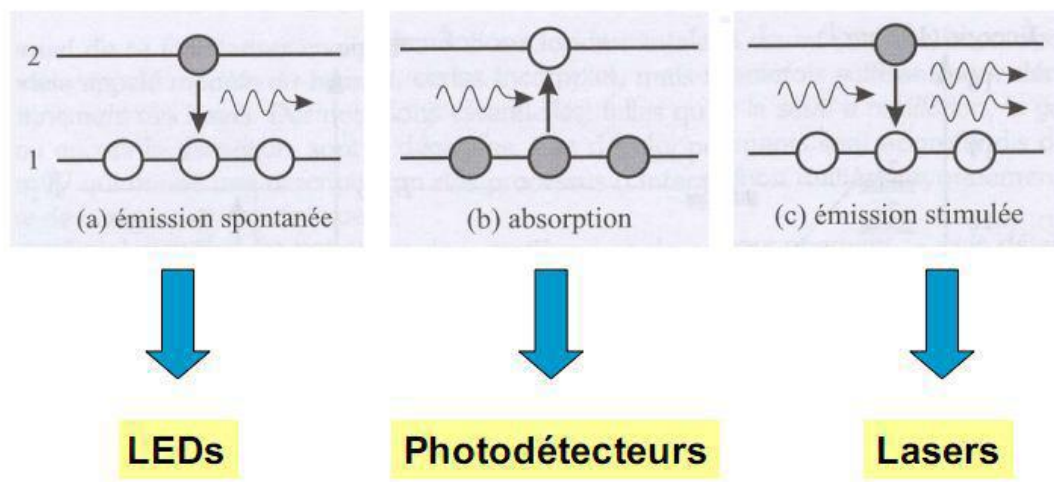


figure 1-9 les trois phénomènes des applications optoélectroniques

Les semiconducteurs II-VI sont aussi des matériaux très prometteurs pour la fabrication des cellules solaires tels que le CdS et le CdTe, à cause de la bonne adaptation de la bande interdite qui se situe au milieu du spectre solaire.

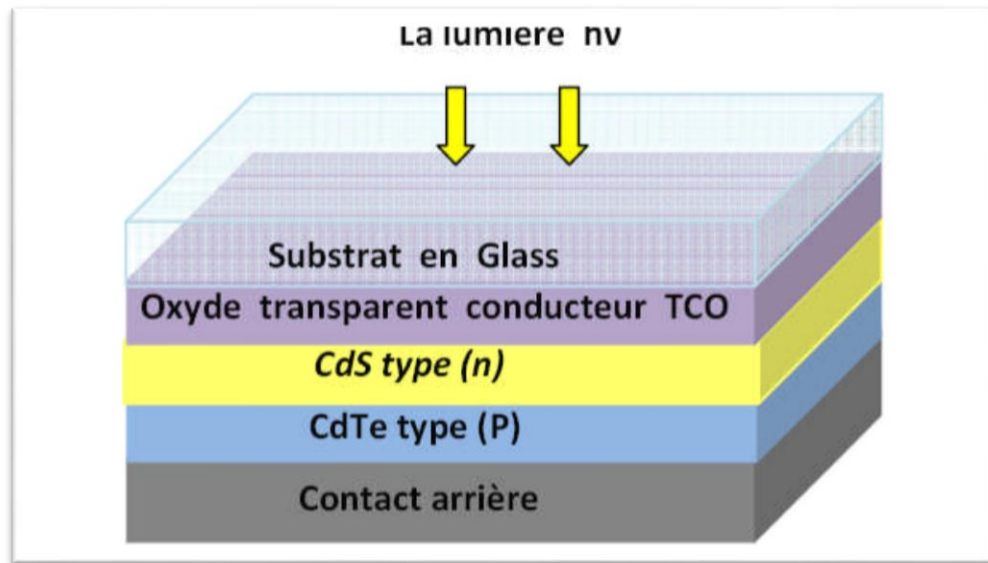


Figure 1-10 La structure de la cellule solaire CdS/CdTe [27]

7. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre des notions fondamentales et les propriétés générales des semiconducteurs de la famille II-VI et particulièrement le MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, et ZnTe, qui possèdent une multitude d'applications technologiques telles que: la fabrication des cellules solaires, des LEDs des détecteurs infrarouges, grâce à leurs propriétés variées (structurales, électriques, optiques....)

Références du chapitre 1

- [1] C. Kittel, physique de l'état solide, édition Dunod ,Paris (1998).
- [2] H. Mathieu, physique des semiconducteurs et des composant électroniques, édition Dunod .Paris (2009).
- [3] F. MEZRAG, Thèse doctorat, UNIVERSITE MOHAMED KHIDER ,BISKRA .
- [4] J. Pierre Colinge ,F.Van de Wiele ,physique des dispositive semiconducteurs ,De Boeck .wesmael , Département De Boeck Université Paris ,Bruxelles (1996).
- [5] M. Beaicha , mémoire de Magister ,Université de Colonel Hadj Lakhdar ,Batna(2007).
- [6] F. BENHADDOU, thèse Doctorat, Université Sidi Mohammed Ben Abdillah, (2017-2018)
- [7] A. Arnoult, Thèse de doctorat université Joseph Fourier, Grenoble I (1998).
- [8] O. Halimi, Thèse de doctorat, université Mentouri, Constantine (2005).
- [9] K. Zanion, Semiconductors and Semimetals, R. K. Willardson and C. Beer, AcademicPress.
- [10] E. Mooser, «Introduction à la physique du solide»,1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [11] S. Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur », Wiley, Chichester, (2009).
- [12] S. KHEDIM, Thèse doctorat, Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen .
- [13] Landolt-Börnstein. Semiconductors, volume III/17.B. Springer, Berlin,1999.
- [14] M. Kardos, Ber., 46 (1913) 2068.
- [15] N .TOUKA, Thèse Doctorat, Université Cosntantine 1.
- [16] G.Martel, documentation I.D.I.L, l'Université de Rouen, (2003).
- [17] J. Marc Frigerio Institut des NanoSciences de Paris. Ecole d'automne "MODELISATION" (2004).
- [18]https://fr.wikipedia.org/wiki/Configuration_%C3%A9lectronique_par_%C3%A9l%C3%A9ment_chimique.
- [19] R. R. Reddy, M. R. Kumar and T. V. R. Rao, Infrared Phys. 34 (1993) 95.
- [20] M. Rabah et al. / Materials Science and Engineering B100 (2003) 163-/171
- [21] I. Hernández-Calderón, Optical Properties and Electronic Structure of Wide Band Gap II-VI Semiconductors, Taylor and Francis, New York, 2002, pp. 113-170.
- [22] L. Hannachi, N. Bouarissa / Superlattices and Microstructures 44 (2008) 794_801

- [23] J. Baars and F. Sorger. « Reststrahlen spectra of HgTe and $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ». Solid State Commun., 10 :875, 1972.
- [24] Rolf Enderlein, NommJ. M. Horing, "Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices", World Scientific Publishing (1997) ISBN 981-02-2387-0.
- [25] M. Klude, G. Alexe, C. Kruse, T. Passow, H. Heinke, D. Hommel, Phys. Stat. Sol. (b) 229 (2002) 935-942.
- [26] Fisher, H.Kuhn and H.Richter. New approach in equilibrium theory for strained layer relaxation. Phys. Rev. Lett. 73, 2712–2715 (1994).
- [27] Alain Ricaud, « Module Photovoltaïques, Filières Technologiques », Techniques de l'ingénieur D 3940, 2005.

Chapitre 2

Semiconducteurs nanostructurés

Chapitre 2 : les semiconducteurs nanostructurés

1. Introduction

Les nanosciences, les nanotechnologies et les nanomatériaux sont actuellement en plein essor et constituent un domaine transversal entre la physique, la chimie et bien d'autres domaines. La nanostructuration des semi-conducteurs permet l'obtention des tailles réduites susceptibles de leur attribuer de nouvelles propriétés (physiques, électroniques, magnétiques, optiques...) par comparaison à celles du matériau massif [1].

2. Définitions

2.1. Nanostructures

Les matériaux nanostructurés peuvent exister sous forme de particules individuelles ou de clusters de nanoparticules de différentes formes et tailles [2, 3].

2.2. Nanoscience

La nanoscience est l'étude des phénomènes et du traitement des matériaux à l'échelle atomique, moléculaires et macromoléculaire où les propriétés diffèrent considérablement de celles à plus grande échelle [4, 5].

2.3. Nanotechnologie

Les nanotechnologies peuvent être définies comme l'ensemble des études et des procédés de fabrication et de manipulation de structures, de dispositifs et de systèmes matériels à l'échelle du nanomètre (nm). Elles se définissent aussi comme la préparation, la caractérisation, la manipulation et le contrôle d'atomes ou de petits groupes d'atomes ou de molécules en vue de construire de nouveaux matériaux dotés de nouvelles propriétés uniques [6].

2.4. Nanomatériaux

Le terme du mot nano est dérivée du mot grec < nanos >, qui est un mot grec signifiant nain, signifiant tout ce qui est petit et dans le domaine de la science signifie une partie d'un milliard, Une nanoparticule est définie comme étant une particule dont au moins une direction de l'espace a une dimension inférieure à 100 nm (un nano= 10^{-9} m). La particularité d'une nanoparticule réside dans le fait que la majorité des atomes qui la constituent se trouve en surface. Cela confère à la nanoparticule une surface d'échanges (surface spécifique) très importante résultant dans des propriétés

physiques et chimiques particulières. Ces propriétés peuvent entraîner des effets biologiques propres [7]. Par comparaison de taille, la Terre est à une pomme ce que cette pomme est à une nanoparticule de 1nm [8].

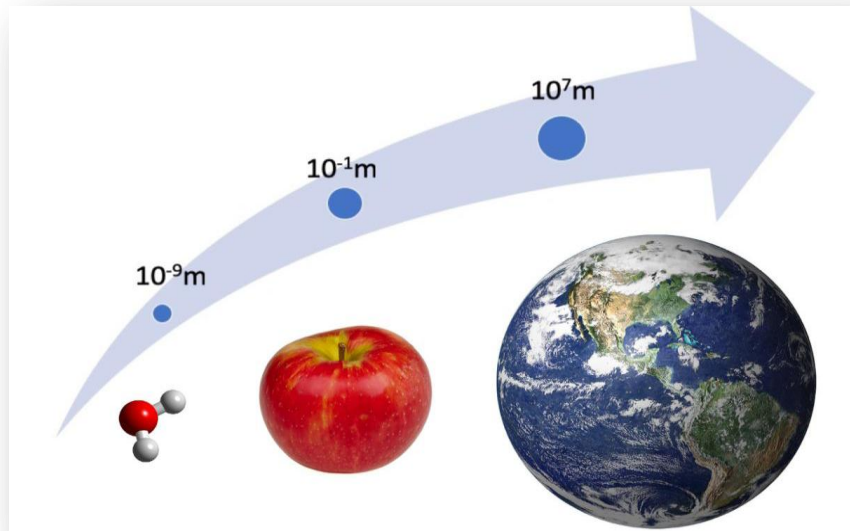


Figure 2-1 Représentation de l'échelle nanométrique [9].

3. Classification des nanomatériaux

Selon leur dimension, il est possible de reprendre la classification suivante des matériaux nanocristallins (figure 2-1) faite dans les références [10-11]:

Matériaux de dimension 0

Matériaux sous forme dispersée, aléatoire ou organisée (nanoparticules) comme dans les cristaux colloïdaux pour l'optique ou les fluides magnétique, ils peuvent être composés de quelques dizaines à quelques milliers d'atomes [12].

Matériaux de dimension 1 : Matériaux sous forme de nanofils ou de nanotubes [13].

Matériaux de dimension 2 : Matériaux sous forme de couche mince, comme dans les dépôts d'agrégats ou de revêtements épais obtenus par projection plasma ou voie électrochimique [13].

Matériaux de dimension 3

Les matériaux nano phases sont composés de grains polyédriques, mono ou polyphasés dont la taille caractéristique est de l'ordre de 1 à 100nm. La zone interfaciale, qui sépare les grains nanométriques, appelée joint de grains, a une forte influence sur les propriétés physiques macroscopiques des matériaux nanostructures. Leur obtention est réalisée grâce à une consolidation de nanoparticules, par dévitrification partielle d'une phase amorphe, par le broyage à haute énergie, par la déformation à froid ou l'extrusion à chaud [8].

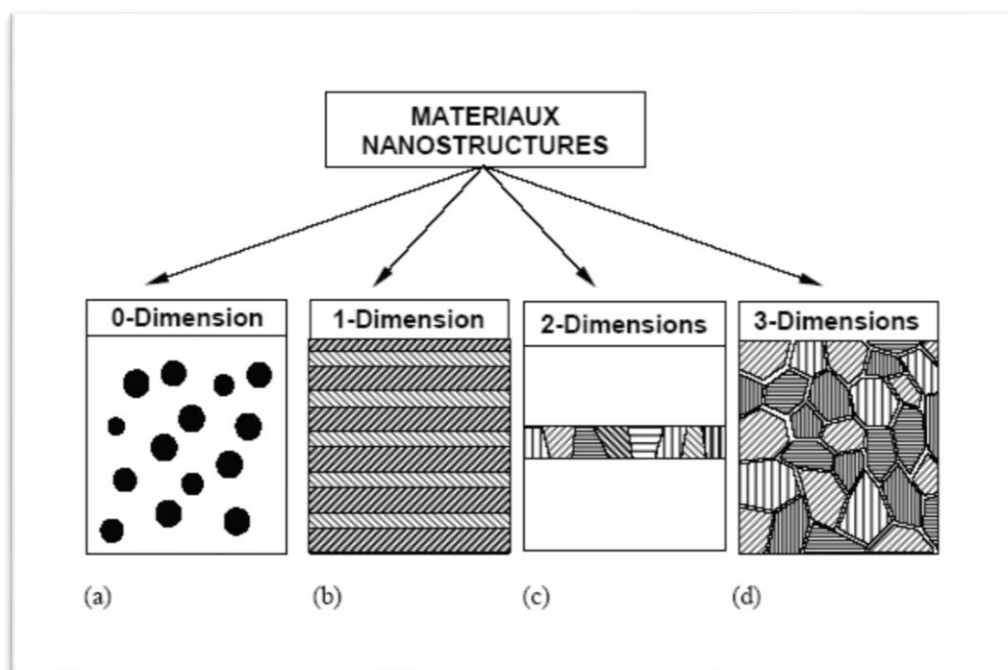


Figure 2-2 Classification des nanomatériaux selon leur dimension

4. Types de nanomatériaux

Un nanomatériau est composé ou constitué de nano-objets (dont la taille est comprise entre 1 et 100 nm) qui présente des propriétés spécifiques à l'échelle nanométrique.

- **Matériaux nanochargés ou nanorenforcés**

Ces matériaux sont élaborés par incorporation de nano-objets dans une matrice organique ou minérale afin d'apporter une nouvelle fonctionnalité ou de modifier des propriétés mécaniques, optiques, magnétiques ou thermiques. Les nano-composites en sont un exemple [14].

- **Matériaux nanostructurés en surface**

Ces matériaux sont recouverts soit d'une ou plusieurs nanocouches, soit de nanoparticules qui forment un revêtement bien défini, permettant de doter la surface de propriétés (résistance à l'érosion, résistance à l'abrasion, hydrophilie, etc.) ou de fonctionnalités nouvelles (adhérence, dureté, aspect, etc) [15].

- **Matériaux nanostructurés en volume**

Ces matériaux possèdent une structure intrinsèque nanométrique qui leur confère des propriétés physiques particulières. Les nano-objets sont, dans ce cas, les éléments constitutifs du matériau massif [6].

5. Les nanomatériaux semi-conducteurs II-VI :

Les semi-conducteurs II-VI sont utilisés sous différentes formes tels que les couches et films minces, des nanocristaux et nanocomposites, l'ensemble des propriétés physico-chimiques des nanomatériaux semiconducteurs sont généralement affectés par le confinement énergétique induit par la taille nanométrique des cristallites. Les nanocristaux des semi-conducteurs II-VI manifestent un changement important de leurs propriétés lorsque leur taille se rapproche de celle des molécules [16, 17].

6. L'effet du confinement sur les propriétés électroniques et optiques

6.1. Effet sur les propriétés électroniques

La distance entre l'électron et le trou est appelé le rayon de Bohr (r_B) de l'exciton. Si m_e^* et m_h^* sont les masses effectives de l'électron et de trou, respectivement, on peut exprimer le rayon de Bohr de l'exciton par l'équation suivante :

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

(ε , \hbar et e sont la constante diélectrique, constante de Planck réduite et la charge d'un électron, respectivement).

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

bi-exciton (l'énergie d'interaction exciton-exciton) est beaucoup plus grande que pour les matériaux à l'état massif [18].

Ce phénomène est une conséquence directe de la mécanique quantique : Les niveaux électroniques sont confinés dans un puits de potentiel dont la taille est proche des longueurs d'onde typiques des transitions électroniques. En diminuant suffisamment la taille des particules des semi-conducteurs, le seuil d'absorption est décalé vers les plus hautes énergies, la bande de gap devient plus large et la structure électronique est affectée [19].

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

Dans cette approximation, les fonctions d'onde des porteurs sont le produit d'une fonction de Bloch variant faiblement dans l'échelle des paramètres du réseau et d'une fonction enveloppe qui varie, elle aussi, faiblement. L'énergie cinétique de l'électron et du trou est quantifiée par un potentiel sphérique (pris comme une perturbation) d'un puits de potentiel de rayon R [20] et leur interaction est prise en compte par le potentiel coulombien.

Effet sur les propriétés optiques :

- **L'absorption optique :**

L'absorption optique est due à l'exciton (paire électron-trou liée). Mais, si le rayon de Bohr effectif de l'exciton est plus grand que la taille de la particule, l'exciton est confiné (confinement quantique) dans la particule, et son énergie se trouve augmentée.

La figure 2-3 montre, par exemple, la variation du gap d'absorption pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des nano cristaux.

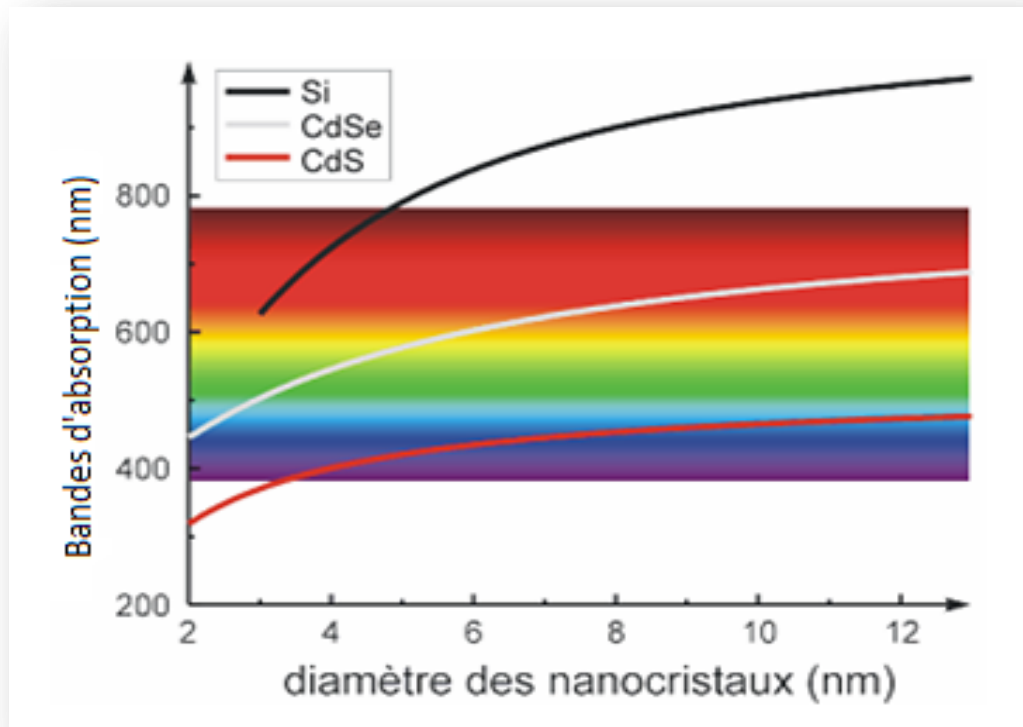


Figure 2-3 Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des nanocristaux [21].

7. Quelques applications des nanostructures [22]

- Revêtements (Vitrages intelligents : Fonction autonettoyante, anti reflet).

Améliorer le spectre des propriétés des matériaux existants (Nanocomposites polyoléfinés à base de nanoparticules d'argile).

- Revêtements (Films céramiques nanostructurés ou nanocomposites élaborés par PVD (Physical Vapor Deposition) et/ou CVD (Chemical Vapor Deposition) .
- Améliorer le spectre des propriétés des matériaux existants (Nanocomposites à matrice métallique et matrices polymères, renforcées par des nanotubes).
- Filtration-Détection-Capture de polluants (utilisation des matériaux nanoporeux).
- Filtration-Détection-Capture de polluants (utilisation des biocapteurs).

Catalyse (Nouveaux catalyseurs pour accroître le rendement, réduire les besoins énergétiques).

- Catalyse (Matériaux catalytiques récupérables et recyclables).
- Nouvelles sources d'énergie (Elaboration de cellules photovoltaïques par

sensibilisation de particules de semiconducteur nano-cristallines; Elaboration d'un nouveau type de cellule solaire solide).

- Electronique de spin appliquée aux semiconducteurs.
- Sources optiques (sources simples).
- Sources optiques (cryptographie).
- Optoélectronique (traitement de l'information tout optique).

Autres systèmes optiques (photonique et utilisation des plasmons de surface) [21].

8. Conclusion

Les propriétés structurales des matériaux peuvent changer lorsque leur taille diminue, les nanoparticules présentent de meilleures propriétés physique, optiques, électronique, mécaniques, magnétiques et d'autres propriétés.

Référence du chapitre 2

- [1] OU. Fellahi, THÈSE Doctorat, Université Sétif 1 (2014).
- [2] Kuchibhatla, S.V.N.T., et al. ‘ One dimensional nanostructured materials’, Prog. Mat.Sci. (in press) (2007).
- [3] D. Bera, S.C. Kuiry, and S. Seal, ‘Synthesis of nanostructured materials using templateassisted electrodeposition’, Jom .56(1) 49–53 (2004).
- [4] C.H. Butt, Nanoscience and – technology in Physics and Chemistry, (n.d.) 1–20
- [5] A. Dowling, R. Clift, N. Grobert, D. Hutton, R. Oliver, et al., Nanoscience and nanotechnologies, opportunities and uncertainties, London R. Soc. R. Acad. Eng.Rep. 46 (2004) 618–618.
- [6] W. Djeghboub, Mémoire de Magister en physique, Univ Univ Mentouri de Constantine (2010).
- [7] E. Gaffet, nanomatériaux: différentes voies de synthèse, propriétés, applications et marchés, (2008) 24–30.
- [8] N. Zerniz, Thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar Annaba (2016).
- [9] A. Dequesnes, Thèse de doctorat, Université Clermont Auvergne (2019).
- [10] C. Suryanarayana, Nanocrystalline materials, International Mater. Reviews, vol. 40, 41- 64 (1995) .
- [11] K. Lu, Nanocrystalline metals crystallized from amorphous solids: nanocrystallization, structure, and properties, Mater. Sci. Eng. R 16, 161-221 (1996)
- [12] W. BEKHTI, Thèse de doctorat, Université ORAN I Ahmed Ben Bella, (2015)
- [13] A.A. Ayachi, thèse de doctorat, Université Des Freres Mentouri Constantine (2015).
- [14] P. M. Ajayan, L. S. Schadler, P. V. Braun, “Nanocomposite Science and Technology”, Wiley – VCH (2003).
- [15] Les Nanomatériaux, “Effet sur la santé de l’homme et sur l’environnement”, AFSSET, France (2006).
- [16] Brito Ferreira, thèse de doctorat, Université de Bordeaux 1 (2002).
- [17] Frank Tinjoux dit Tinjod, thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble I (2003).
- [18] V.I. Klimov, ‘Mechanisms for photogeneration and recombination of multi excitons in semiconductor nanocrystals: Implications for lasing and solar energy conversion’, J. Phys. Chem. B 110 (34): 16827–45(2006).

[19] Harieche Barkahoum, Thèse de doctorat Es-Sciences en physique, Université Mentouri de Constantine (2012).

[20] H. Haug. Quantum theory of optical and electronic properties of semiconductors, Edit Singapore (1992).

[21] <http://pcml.univ-lyon1.fr/raman/petites.html>.

[22] D. Carlac'h, Y. Hemery, Synthèse, Etude Prospective sur les nanomatériaux (2004).

Chapitre 3

Résultats et discussion

Chapitre 3: Résultats et discussion

1. Introduction

Notre travail se concentre sur l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des matériaux semiconducteurs II-VI: MgSe , CdTe , ZnS , ZnSe et ZnTe à l'échelle nanométrique pour voir l'effet du confinement quantique sur les propriétés étudiés, en effet cette étude est une modélisation numérique de leurs propriétés en question, tout en considérant que ce type de semiconducteurs se cristallisent dans une structure Zinc Blende.

2. Etude des propriétés électroniques

Les calculs sont principalement basés sur la méthode empirique pseudopotentielle (EPM) 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 [1-2].

2.1. Méthode du pseudopotentiel

La nature empirique de la méthode du pseudopotentiel consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques [3].

les paramètres du pseudopotentiel empirique détermine par la méthode non linéaire des moindres carrées [4-5], dans laquelle tous les paramètres sont optimisés simultanément sous un critère bien défini de la minimisation de la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie calculés par la méthode des pseudopotentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement. Il est donné par [6-7]:

$$\delta = \left[\sum_{i,j} \frac{(\Delta E_{ij})^2}{(m-n)} \right]^{1/2} \quad (3-1)$$

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}} \quad (3-2)$$

E_{ij}^{exp} et E_{ij}^{cal} sont respectivement, les énergies observées et calculées entre l'état i avec $k = k_i$ et l'état j avec $k = k_j$, de la même paire (i, j) et N est le nombre de paramètres du pseudopotentiel empirique. Les valeurs des facteurs de forme sont modifiées par itération jusqu'à minimiser le δ [4-7].

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

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

Les facteurs de forme du pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques des composés binaires semiconducteurs II-VI, sont présentés dans le tableau 3-1, leurs paramètres de maille sont présentés dans le tableau 3-2.

Tableau 3-1 Les facteurs de forme pseudopotentiels des composés MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe.

Composé	Facteurs de forme (Ryd)					
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
MgSe^{a)}	-0.241454	0.026	0.05	0.15	0.089	-0.03
CdTe^{b)}	-0.3964	0.1983	0.4595	0.1311	0.2800	0.7081
ZnS^{a)}	-0.312939	0.021262	0.170554	0.030061	0.116	0.129269
ZnSe^{a)}	-0.207808	-0.008	0.036046	0.342762	0.099	0.022
ZnTe^{c)}	-0.22	0	0.05	0.13	0.1	0.01

a) Valeur théorique indiquée dans Ref [8].

b) Valeur théorique indiquée dans Ref [9].

c) Valeur théorique indiquée dans Ref [10].

Tbleau 3-2 Les paramètres de maille des composés binaires semi-conducteurs II-VI

	MgSe	CdTe	ZnS	ZnSe	ZnTe
Paramètres de maille a (Å)^{a)}	5.91	6.481	5.41	5.668	6.104

a) Valeur théorique indiquée dans Ref [11].

2.2. Structure de bande d'énergie

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin.

Les bandes d'énergie se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction. Ce sont la bande de valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute, et la bande interdite qui les sépare déterminant principalement les propriétés de transport du semi-conducteur [12].

Nos calculs des structures de bande $E(\vec{k})$ pour les semiconducteur composées nanostructurés (MgSe , CdTe , ZnS , ZnSe , ZnTe) en utilisant les facteurs de formes ainsi que les paramètres de maille cités dans les tableaux (3-1) et (3-2) sont représentées sur les figures ci-dessous :

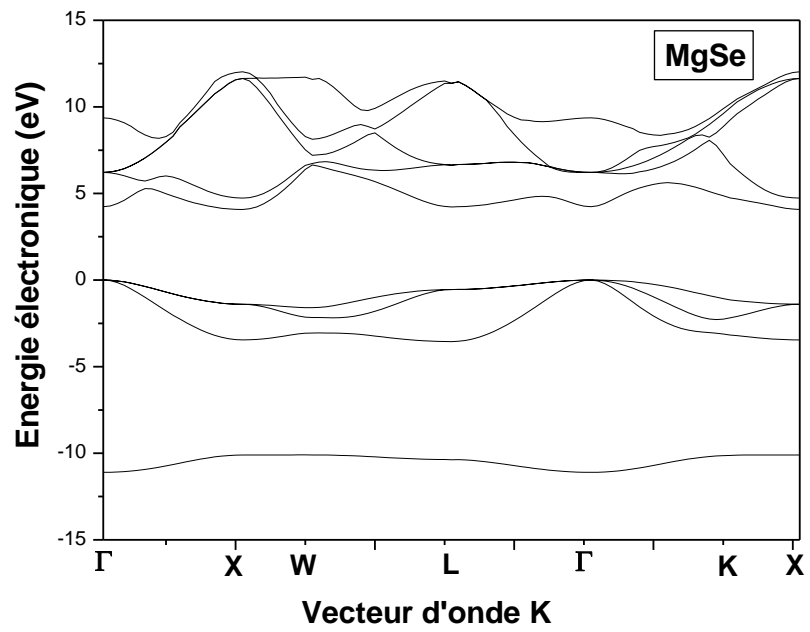


Figure 3-1 Structure de bande pour MgSe

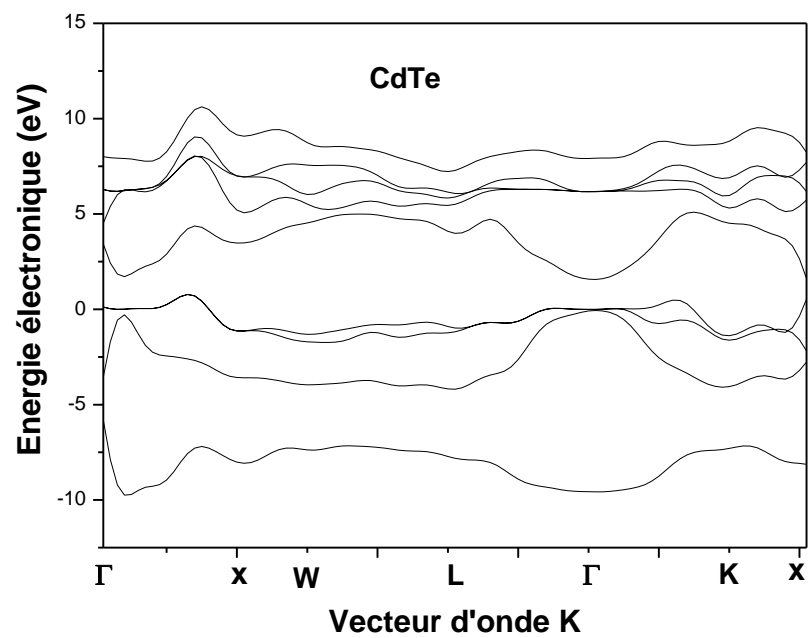


Figure 3-2 Structure de bande pour CdTe

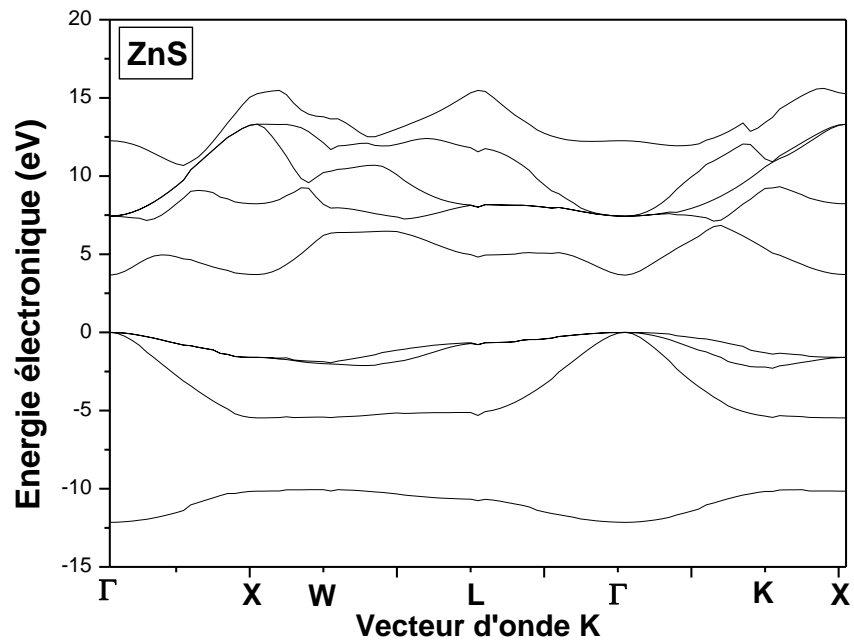


Figure 3-3 Structure de bande pour ZnS

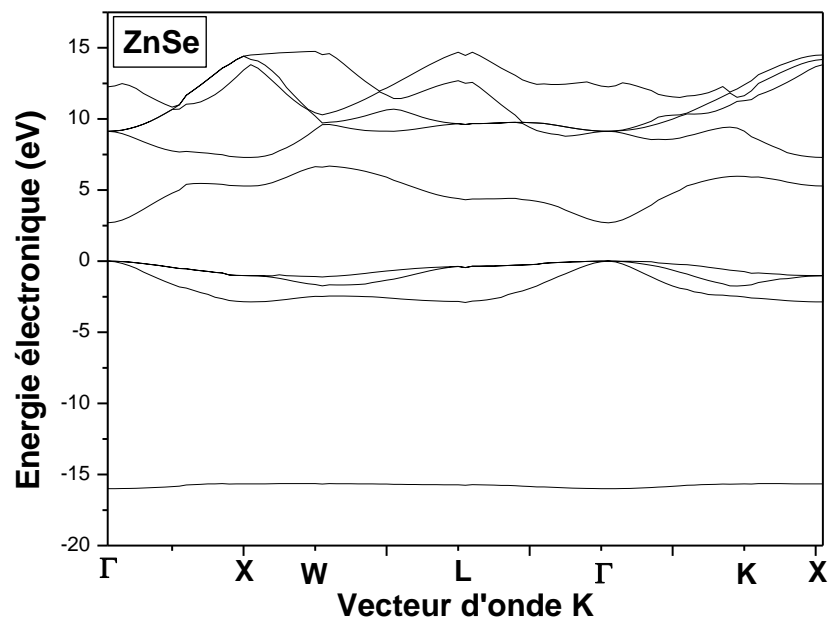


Figure 3-4 Structure de bande pour ZnSe

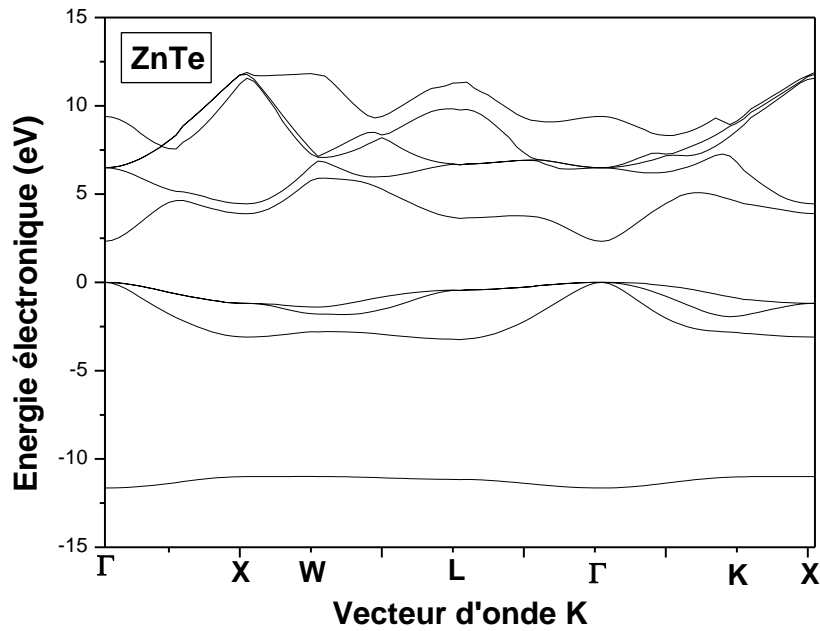


Figure 3-5 Structure de bande pour ZnTe

L'analyse de ces structures de bandes a montré que les composés semiconducteurs CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe présentent un gap direct E_F^Γ par contre le MgSe présente un gap indirect E_F^X .

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

Tableau 3-3 Les valeurs des gaps d'énergie en massif calculés et théoriques des composés semiconducteurs (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe).

Composés	Valeur des gaps d'énergie théorique (eV)			Valeur des gaps d'énergie calculés (eV)		
	E_G^f	E_G^x	E_G^l	E_G^f	E_G^x	E_G^l
MgSe	4 ^{a)}	3.2 ^{a)}	4.19 ^{b)}	4.24	4.08	4.22
CdTe	1.51 ^{a)}	3.48 ^{a)}	2.47 ^{c)}	1.5	3.48	2.47
ZnS	3.726 ^{a)}	5.14 ^{a)}	4.81 ^{b)}	3.66	3.70	4.82
ZnSe	2.721 ^{a)}	3.4 ^{a)}	3.8 ^{b)}	2.70	5.28	4.32
ZnTe	2.27 ^{a)}	3.05 ^{a)}	2.38 ^{d)}	3.32	3.89	3.62

a) Valeur théorique indiquée dans Ref [11].

b) Valeur théorique indiquée dans Ref [8].

c) Valeur théorique indiquée dans Ref [13].

d) Valeur théorique indiquée dans Ref [14].

2.2. Méthode de la masse effective

La masse effective est utilisé pour déterminer le gap énergétique et l'énergie d'excitation ,elle donnée par la formule suivante:

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

E_g : est le gap énergétique d'un semiconducteur massif, le point quantique est sphérique de rayon R.

m_e^* et m_h^* : sont les masses effectives respectives de l'électron et du trou.

Mais cette expression ne donne pas de résultats en accord avec l'expérience. Pour rendre compte des résultats expérimentaux et perfectionner ce modèle, les théoriciens ont rajouté un terme supplémentaire V_c qui représente l'énergie Coulombienne de l'interaction de l'électron et du trou [15] :

$$V_C = -\frac{Ce^2}{\epsilon R} \quad (3-4)$$

Avec : est la constante diélectrique du matériau massif

C'est une constante de l'ordre de 1,8 [11]

dans ce cas l'équation est :

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left[\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] - \frac{1.8e^2}{\epsilon a} \quad (3-5)$$

Avec :

E_g est le gap énergétique du semiconducteur nanostructuré.

E_g^0 est le gap énergétique du semiconducteur massif.

a est le rayon du point quantique.

m_e^* , m_h^* les masses effectives de l'électron et du trou du semiconducteur massif respectivement.

\hbar est la constante du Planck réduite.

Nous avons calculé le gap énergétique fondamental en fonction du rayon de point quantique pour les composés semiconducteurs II-VI (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) Pour voir l'effet de confinement quantique sur les propriétés électroniques. En utilisant les valeurs des gaps énergétiques théoriques (Tableau 3-3) avec les valeurs des masses effectives de l'électron et du trou (Tableau 3-4)

Tableau 3-4: Les masses effectives des électrons et des trous

Composé	Masses effectives des électrons m_e^*/m_0 ^{a)}	Masses effectives des trous m_h^*/m_0 ^{a)}
MgSe	0.20	0.88
CdTe	0.09	0.82
ZnS	0.20	1.42
ZnSe	0.137	0.82
ZnTe	0.117	0.67

^{a)} Ref [11].

Le calcul a été fait pour une large gamme de rayon de point quantiques de faible à grande valeur allant de $a = 1\text{nm}$ à $a = 100\text{nm}$, lorsqu'il atteint 100nm , il atteint le massif (Bulk).

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

Par manque de données théorique des valeurs des masse effectives au point X et L nous nous sommes limités au gap énergétique E_{Γ}^X .

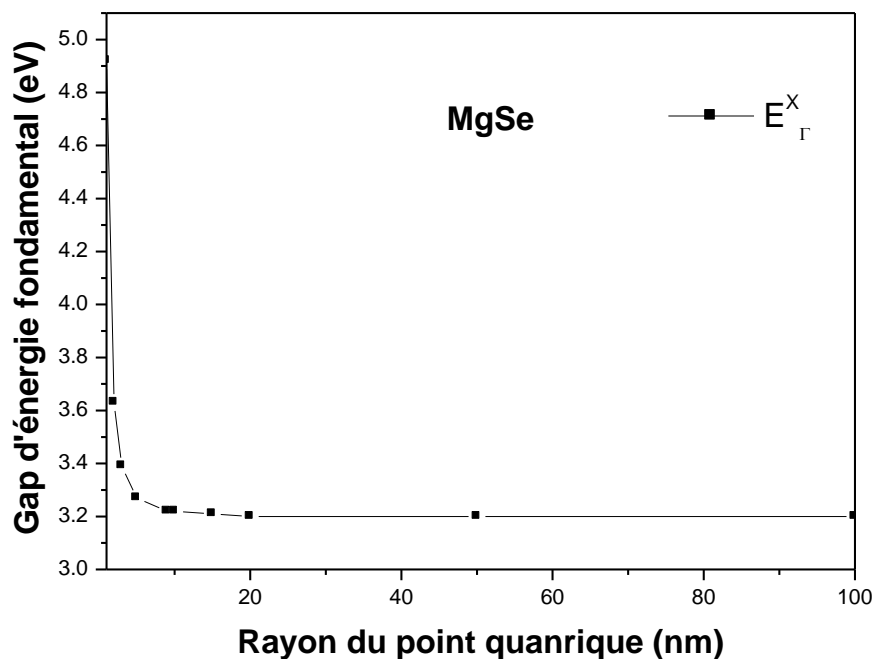


Figure 3-6 Variation du gap d'énergie E_{Γ}^X en fonction du rayon du point quantique pour le MgSe.

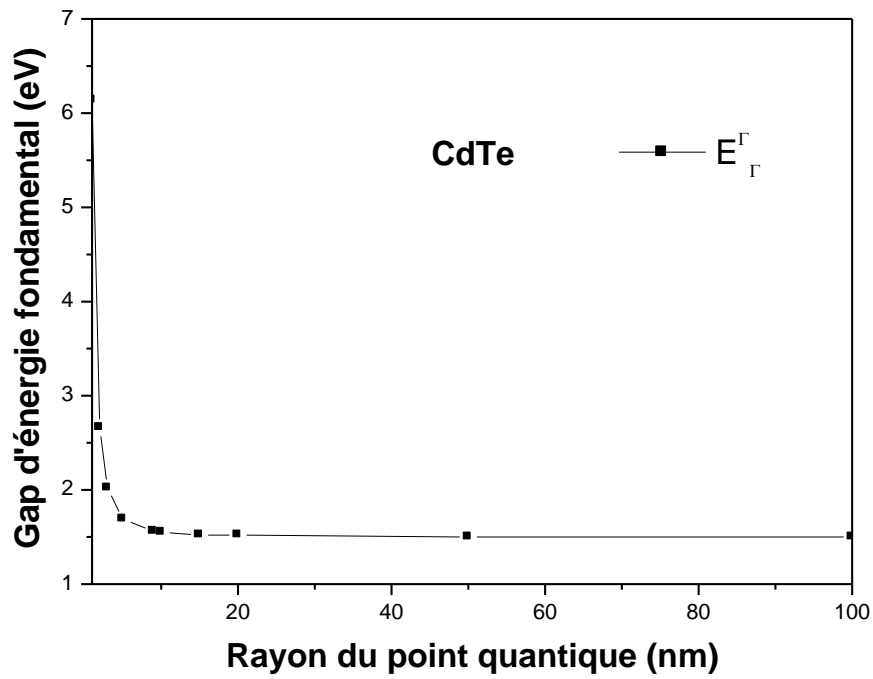


Figure 3-7 Variation du gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction du rayon du point quantique pour le CdTe.

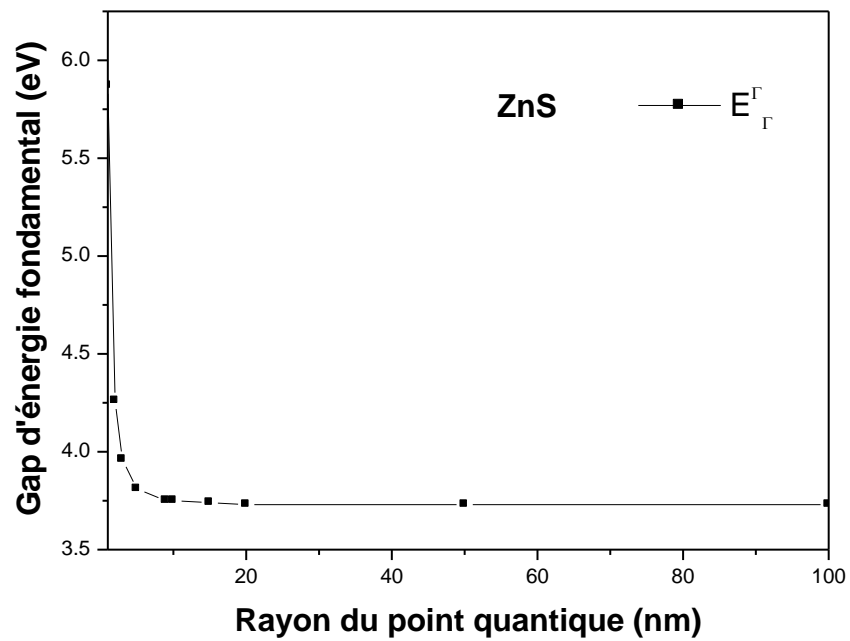


Figure 3-8 Variation du gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction du rayon du point quantique pour le ZnS.

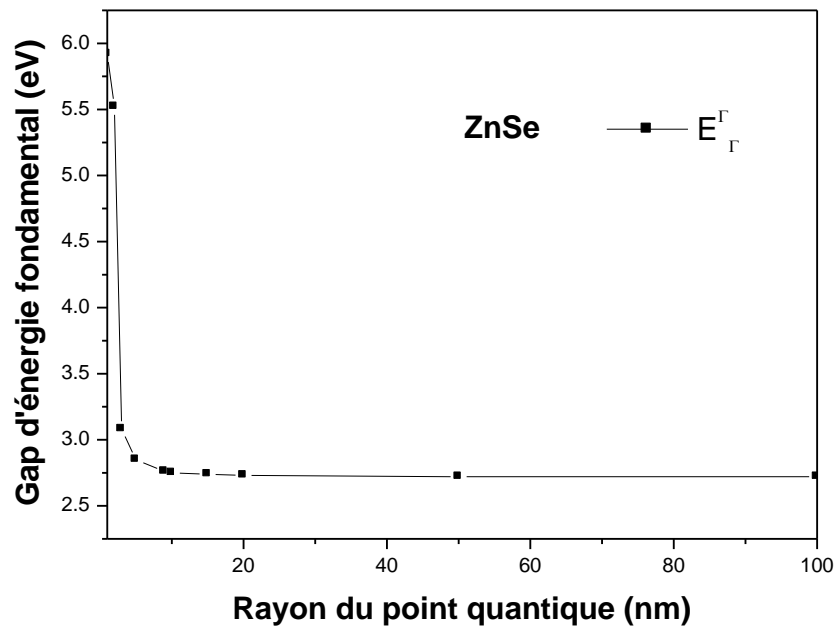


Figure 3-9 Variation du gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction du rayon du point quantique pour ZnSe.

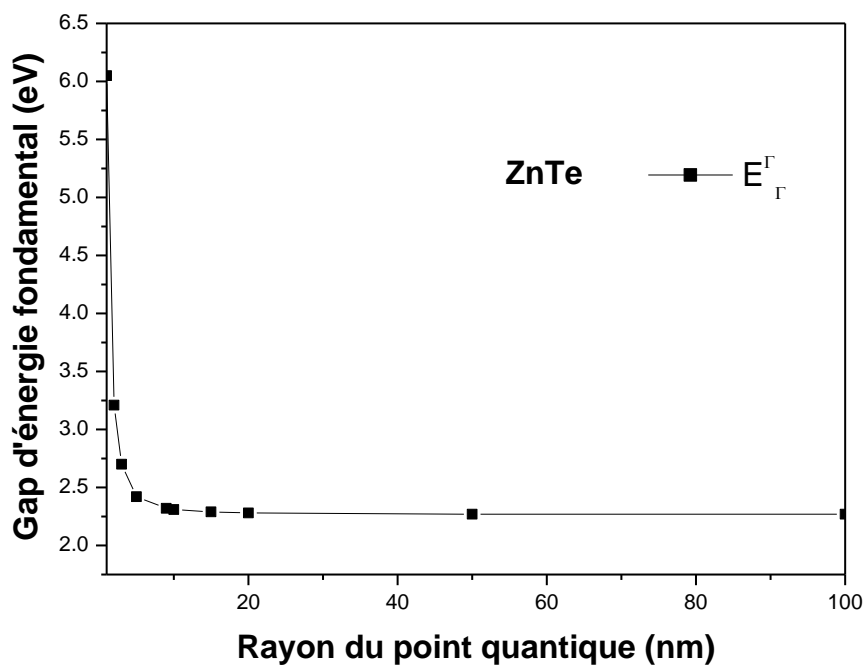


Figure 3-10 Variation du gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction du rayon du point quantique pour ZnTe.

Les équations des fits polynomiaux de deuxième ordre du gap fondamental pour chaque composé semiconducteur nanostructuré sont données comme suit :

$$\text{Pour le MgSe : } E_F^X(a) = 3.77 - 0.03a + 2.69 \times 10^{-4} a^2 \quad (3-6)$$

$$\text{Pour le CdTe : } E_F^F(a) = 3.04 - 0.09a + 7.24 \times 10^{-4} a^2 \quad (3-7)$$

$$\text{Pour le ZnS : } E_F^F(a) = 4.44 - 0.04a + 3.33 \times 10^{-4} a^2 \quad (3-8)$$

$$\text{Pour le ZnSe : } E_F^F(a) = 4.24 - 0.08a + 7.05 \times 10^{-4} a^2 \quad (3-9)$$

$$\text{Pour le ZnTe : } E_F^F(a) = 3.53 - 0.07a + 5.90 \times 10^{-4} a^2 \quad (3-10)$$

2.3. Transition du gap énergétique

Nous avons tracé les variations des gap énergétiques sur un intervalle de 1nm à 20nm pour le MgSe, ZnS, ZnSe et ZnTe , pour mieux voir les transitions des gaps énergétiques direct (E_F^F) et indirect(E_F^X) pour chaque matériau semiconducteur nanostructuré . Les résultats sont indiqués sur les figures ci-dessous :

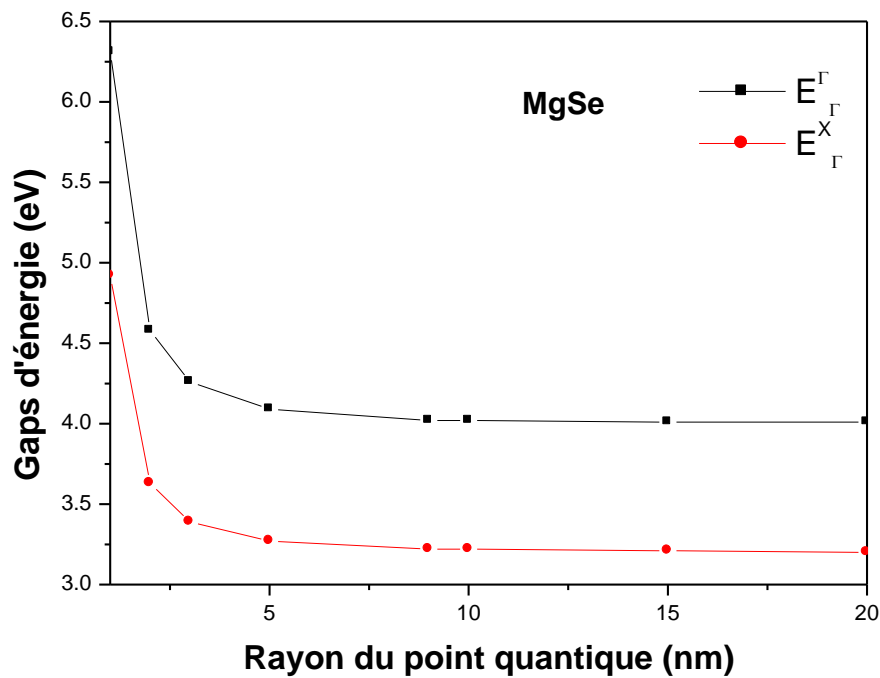


Figure 3-11 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour MgSe.

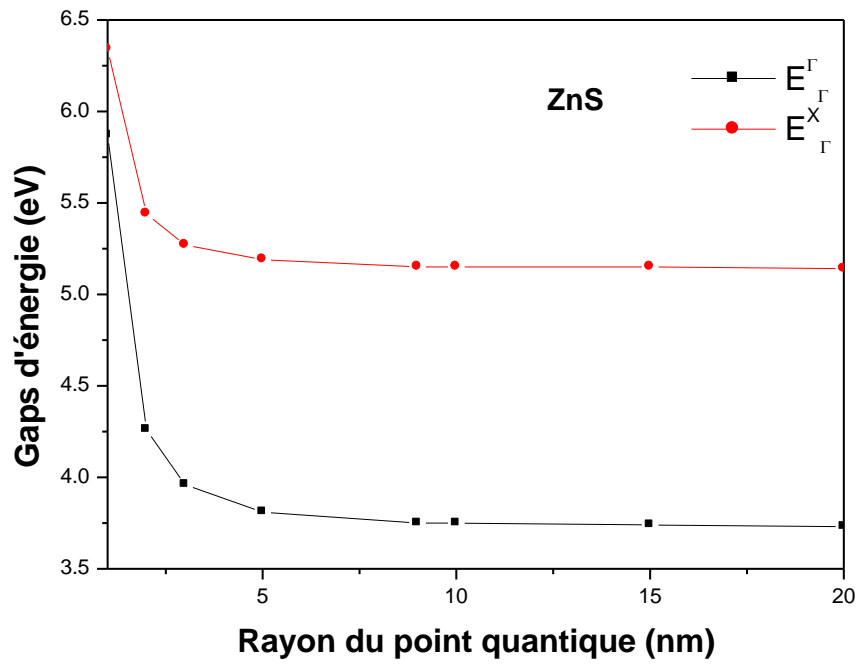


Figure 3-12 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour ZnS.

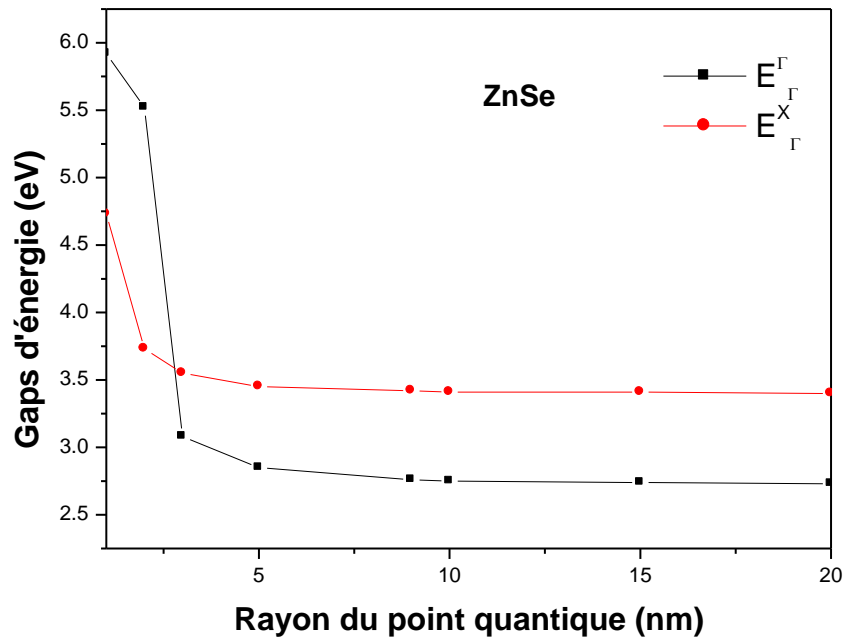


Figure 3-13 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour ZnSe.

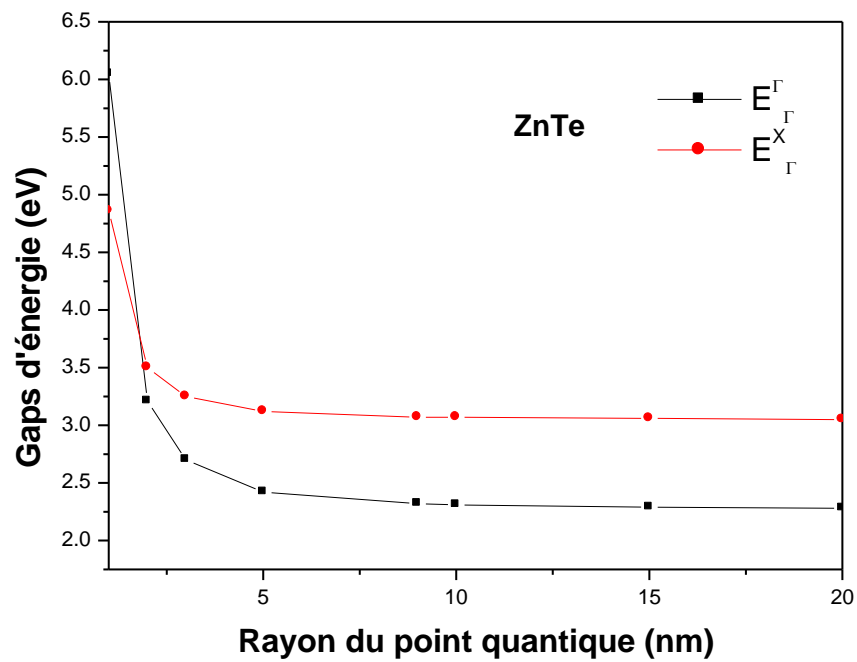


Figure 3-14 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour ZnTe.

Le tableau 5 résume les différentes transitions de gap.

Tableau 3-5 Tableau des transitions des gaps des composés binaires semi-conducteurs II-VI.

composés	Transition	Rayon de transition(nm)	Gap fondamental avant la transition	Gap fondamental après la transition
MgSe	Pas de transition	Aucune	E_{Γ}^X	E_{Γ}^X
CdTe	Pas de transition	Aucune	E_{Γ}^{Γ}	E_{Γ}^{Γ}
ZnS	Pas de transition	Aucune	E_{Γ}^{Γ}	E_{Γ}^{Γ}
ZnSe	Indirect-direct	3	E_{Γ}^X	E_{Γ}^{Γ}
ZnTe	Indirect-direct	2	E_{Γ}^X	E_{Γ}^{Γ}

Les résultats d'utilisation de la méthode de la masse effective pour le calcul des gaps énergétique des différents composés sont présentés dans le tableau 3-6. Notant que les valeurs des différents gaps étaient calculées pour un rayon $a = 100$ nm.

Tableau 3-6 Valeurs des gaps d'énergie des composés obtenues par la méthode de la masse effective et comparées aux données théoriques.

Composés	E_G^r	E_G^x
MgSe	4 ^{a)} , 4.24 ^{b)} , 4 ^{c)}	3.2 ^{a)} , 4.08 ^{b)} , 3.2 ^{c)}
CdTe	1.5 ^{a)} , 1.5 ^{b)} , 1.5 ^{c)}	3.48 ^{b)} , 3.48 ^{c)}
ZnS	3.73 ^{a)} , 3.66 ^{b)} , 3.73 ^{c)}	5.14 ^{a)} , 3.70 ^{b)} , 5.14 ^{c)}
ZnSe	2.72 ^{a)} , 2.70 ^{b)} , 2.72 ^{c)}	3.4 ^{a)} , 5.28 ^{b)} , 3.4 ^{c)}
ZnTe	2.27 ^{a)} , 2.32 ^{b)} , 2.27 ^{c)}	3.05 ^{a)} , 3.89 ^{b)} , 3.05 ^{c)}

^{a)} Nos calculs par la méthode de la masse effective

^{b)} Nos calculs par la méthode de pseudopotentiel

^{c)} Valeur théorique indiquée dans Ref [11].

Pour voir la variation du gap fondamental des composés binaires semi-conducteurs (MgSe , CdTe , ZnS , ZnSe , ZnTe) en fonction du paramètre de maille en $a=3$ nm et $a=100$ nm nous avons tracé les figures suivantes :

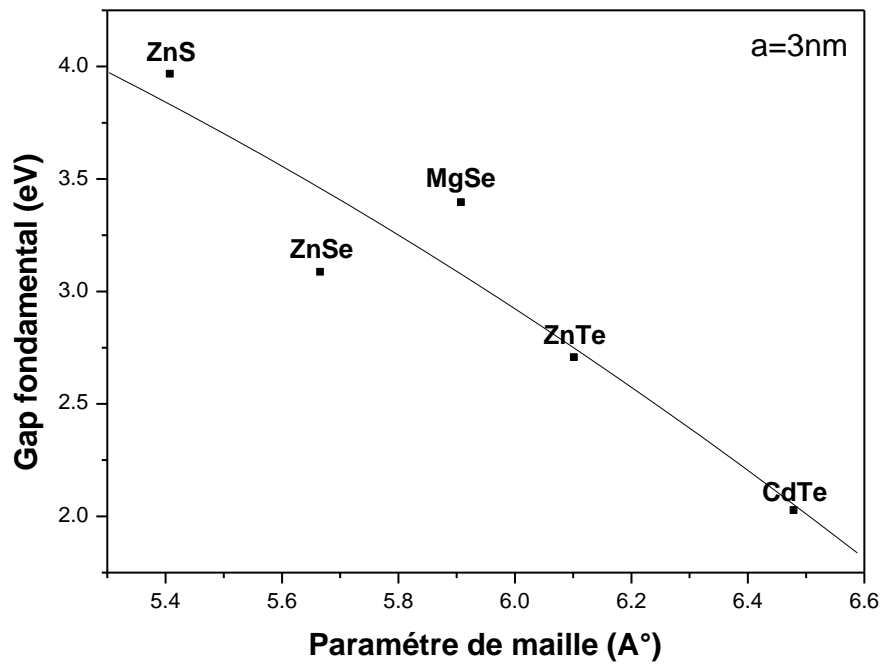


Figure 3-15 la variation de gap fondamental en fonction de paramètre de maille (a=3nm)

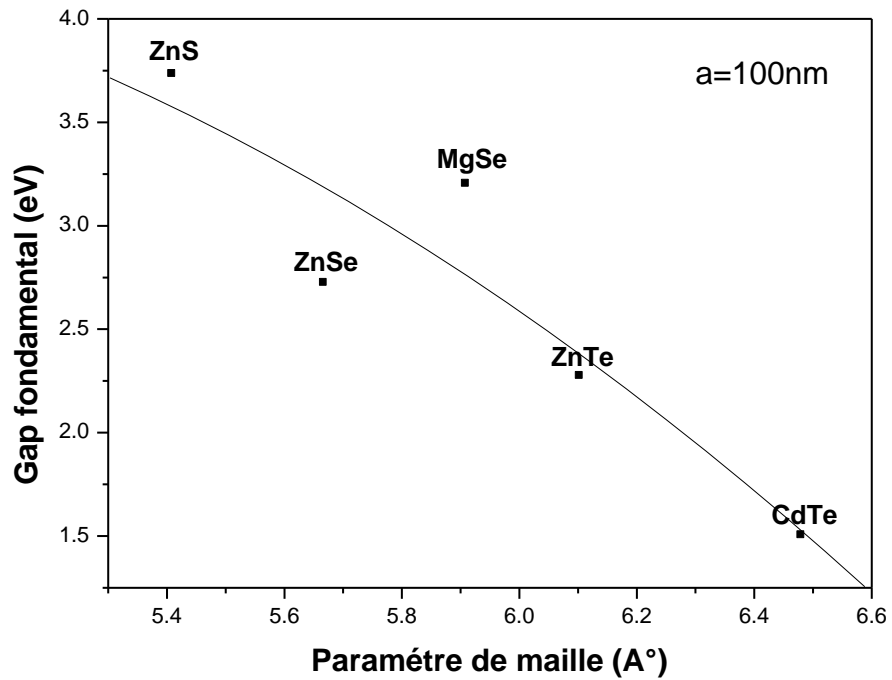


Figure 3-16 la variation de gap fondamental en fonction de paramètre de maille (a=100nm)

Nous remarquons que le gap du composé ZnS a un gap fondamental très large , par contre le CdTe un gap en nano inférieur par rapport au quatre gaps, nous pouvons conclure que le matériau qui a le paramètre de maille le plus grand a un gap inférieur . Les équations du fit quadratique du gap fondamental pour les composé semiconducteur nanostructuré (MgSe , CdTe , ZnS , ZnSe , ZnTe) en fonction de paramètre de maille pour un rayon de pont quantique (a=3nm) et (a=100nm) sont données comme suit :

$$\text{Pour } a=3\text{nm} : E_g(A) = 3.48237 + 1.5044 A - 0.26626 A^2 \quad (3-11)$$

$$\text{pour } a=100\text{nm} : E_g(A) = -3.68779 + 4.0602 A - 0.5024 A^2 \quad (3-12)$$

(A) le paramètre de maille

3. Etude des propriétés optiques

3.1. L'indice de réfraction

La connaissance de l'indice n des semi-conducteurs est essentielle pour les dispositifs électroniques tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs [16].

Dans ce travail, cet indice a été calculé en utilisant six modèles différents, qui sont tous directement liés au gap énergétique fondamental comme suit :

- **Moss** était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction n et le gap d'énergie E_g basé sur le modèle atomique, sa formule est donnée comme suit [15-17]:

$$E_g n^4 = k \quad (3-13)$$

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

- **Ravindra** donne une relation linéaire entre n et E_g donnée par [7, 19-20]:

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (3-14)$$

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

- **Gupta et Ravindra** donnent La relation suivante [21]:

$$n = \alpha + b E_g \quad (3-15)$$

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

- **Herve** et **Vandamme** donnent La relation empirique suivante [21-22]:

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \quad (3-16)$$

Où :

$$A = 13.6 \text{ eV.}$$

$$B = 3.4 \text{ eV.}$$

Les valeurs numériques de A et B sont utilisées pour calculer l'indice de réfraction des composés binaires.

- **Reddy** et **Anjaneyulu** donnent La relation suivante [16] :

$$E_g e^n = 36.3 \quad (3-17)$$

- **Reddy** et **Ahmed** donnent La relation empirique suivante [23] :

$$n^4(E_g - 0.365) = 154 \quad (3-18)$$

Ces relations empiriques ont été utilisés pour calculer et voir la variation de l'indice de réfraction des composés binaires MgSe ,CdTe ,ZnS ,ZnSe et ZnTe en fonction du rayon du point quantique (a) sur une large gamme, de 1nm à 100nm pour nous permettre de voir le comportement de ce paramètre physique important. Les résultats des calculs sont illustrés sur les figures suivantes:

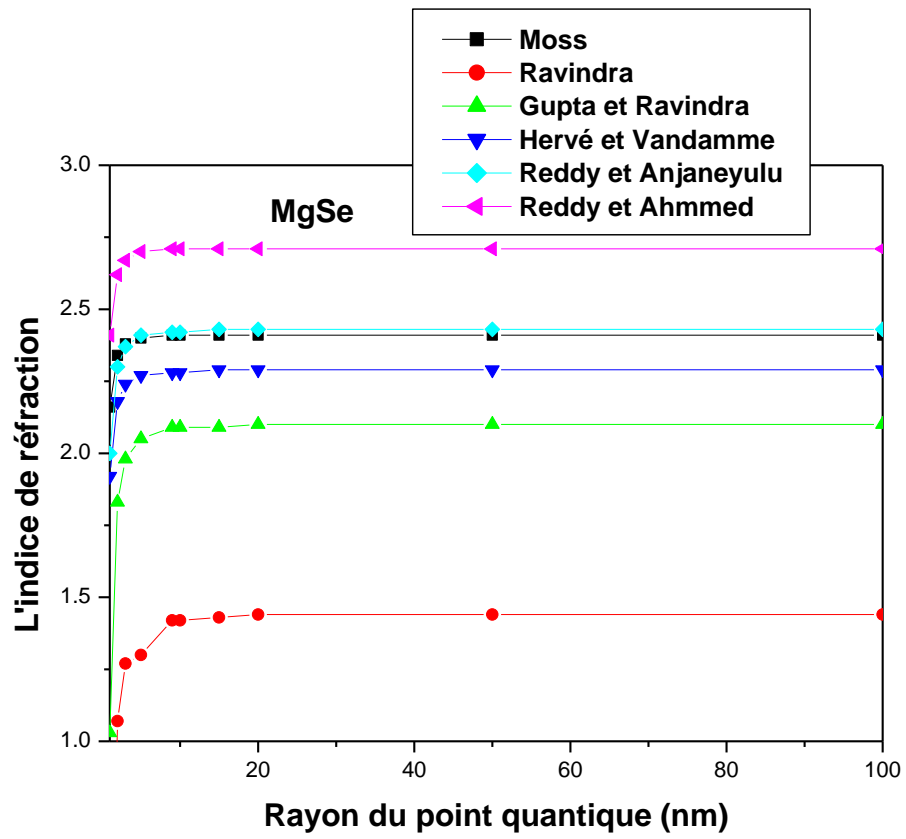


Figure 3-17 Variation de l'indice de réfraction du MgSe en fonction du rayon du point quantique.

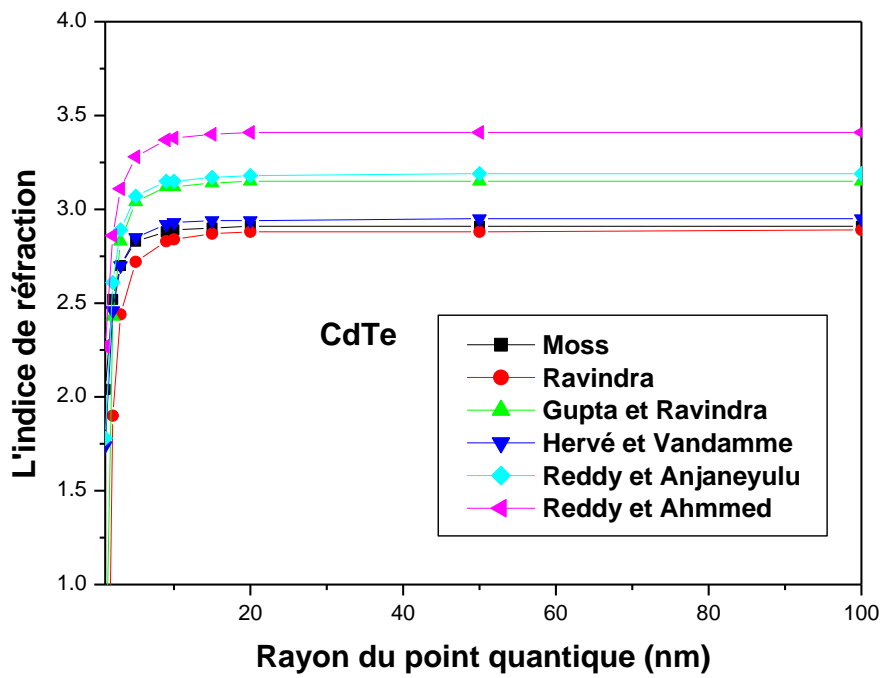


Figure 3-18 Variation de l'indice de réfraction du CdTe en fonction du rayon du point quantique.

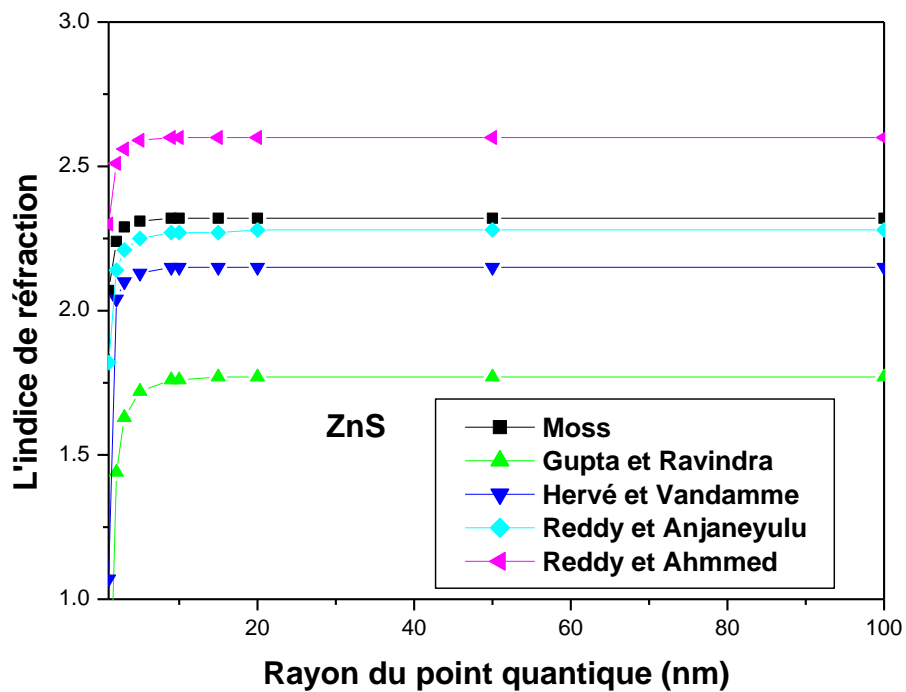


Figure 3-19 Variation de l'indice de réfraction du ZnS en fonction du rayon du point quantique.

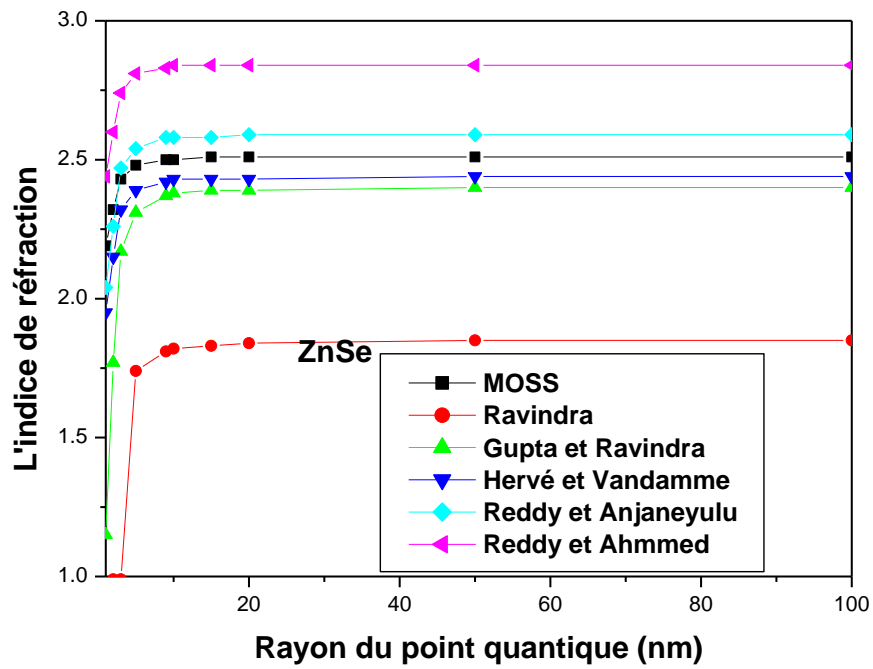


Figure 3-20 Variation de l'indice de réfraction du Znse en fonction du rayon du point quantique.

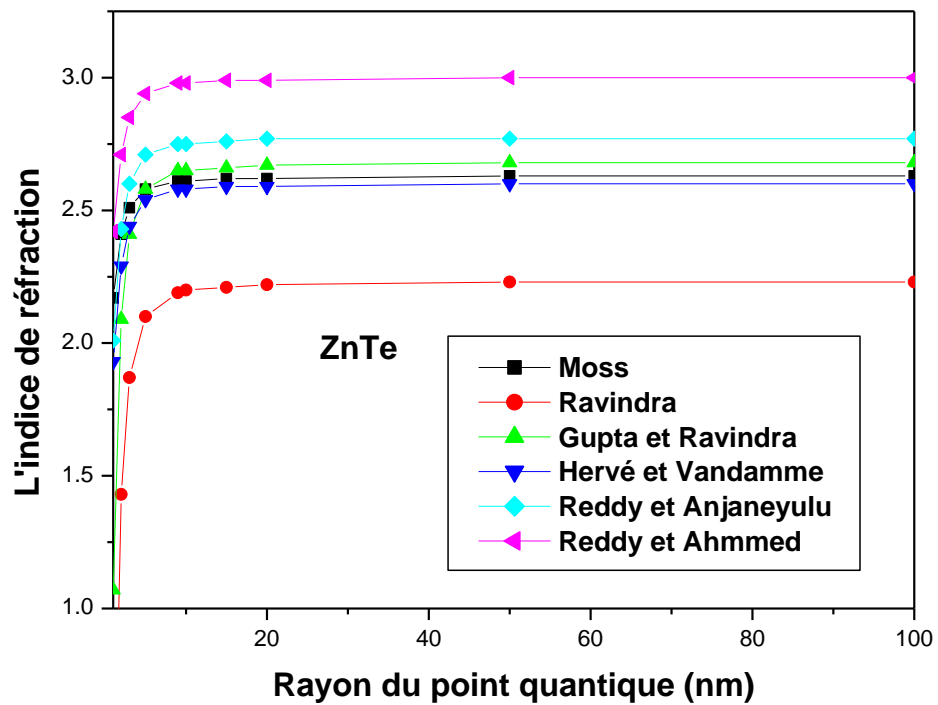


Figure 3-21 Variation de l'indice de réfraction du ZnTe en fonction du rayon du point quantique.

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

Cet indice diminue une fois le rayon du point quantique diminue alors qu'il augmente de manière non linéaire avec l'augmentation du rayon (a) et il commence à se stabiliser une fois que nous dépassons une valeur de rayon de point quantique $a=20\text{nm}$. Le tableau 3-7 donne les valeurs de l'indice de réfraction calculées et comparées à des valeurs théoriques pour une valeur de $a = 100\text{nm}$, cette valeur représente le cas massif.

Tableau 3-7 Calcul des indices de réfraction des semiconducteurs nanostructurés étudiés pour ($a=100\text{nm}$), comparés aux données théoriques.

Composés	n calculé à partir :						valeurs théoriques de l'indice de réfraction
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vadamme	Reddy et Anjneyulu	Reddy et Ahmmed	
MgSe	2.41	1.44	2.1	2.29	2.43	2.71	2.14 ^{a)}
CdTe	2.91	2.89	3.15	2.95	3.19	3.41	2.92 ^{b)}
ZnS	2.32	1	1.77	2.15	2.28	2.60	2.25 ^{a)}
ZnSe	2.51	1.85	2.40	2.44	2.59	2.84	2.5 ^{a)}
ZnTe	2.63	2.23	2.68	2.60	2.77	3	2.72 ^{c)}

a) Valeur théorique indiquée dans Ref [24].

b) Valeur théorique indiquée dans Ref [9].

c) Valeur théorique indiquée dans Ref [25].

Le calcul de la valeur de l'erreur relative $\Delta x/x$ des résultats obtenus et des données théoriques de l'indice de réfraction, permet de valider le modèle le plus proche qui permettra le calcul de l'indice de réfraction (n), ses valeurs sont présentées dans le tableau 3-8. La valeur de l'erreur relative la plus basse c'est celle la plus précise.

Tableau 3-8 Détermination de la précision pour les composés binaires semiconducteurs nanostructurés II-VI.

Composé	Modèle de calcul le plus proche	Valeur de l'erreur relative
MgSe	Gupta et Ravindra	1.8 %
CdTe	Moss	0.3 %
ZnS	Reddy et Anjaneyulu	1.3 %
ZnSe	Moss	0.4 %
ZnTe	Gupta et Ravindra	1.4 %

Un fit quadratique appliquée à tous les modèle d'indice de réfraction ce qui a donné les équations suivantes :

Mgse (Gupta et Ravindra) :

$$n(a) = 1.74253 + 0.01988a - 1.67767 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-19)$$

Cdte (Moss):

$$n(a) = 2.5456 + 0.01971a - 1.65203 \times 10^{-4}a^2 \quad (3-20)$$

Zns (Reddy et Anjaneyulu) :

$$n(a) = 2.34477 + 0.01331a - 1.11677 \times 10^{-4}a^2 \quad (3-21)$$

Znse (MoSS):

$$n(a) = 2.36475 + 0.00788a - 6.60828 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-22)$$

Znte (Gupta et Ravindra) :

$$n(a) = 2.07329 + 0.03311a - 2.78128 \times 10^{-5}a^2 \quad (3-23)$$

Nous avons tracé les figures suivantes pour voir la variation de l'indice de réfraction des composés binaires semi-conducteurs (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) en fonction du paramètre de maille en $a=3\text{nm}$ et $a=100\text{nm}$.

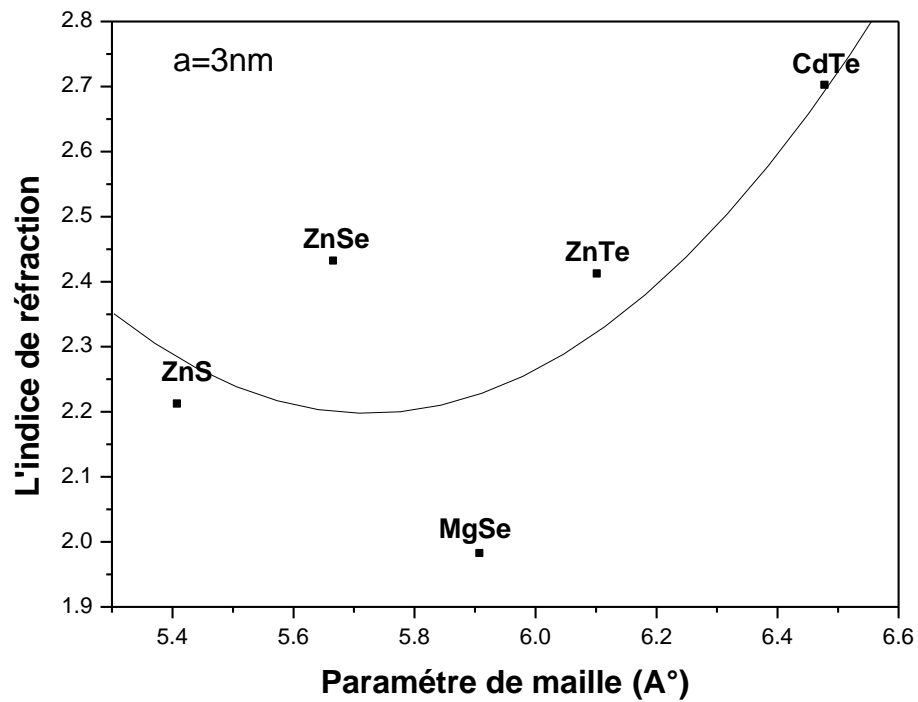


Figure 3-22 La variation de l'indice de réfraction en fonction de paramètre de maille ($a=3\text{nm}$)

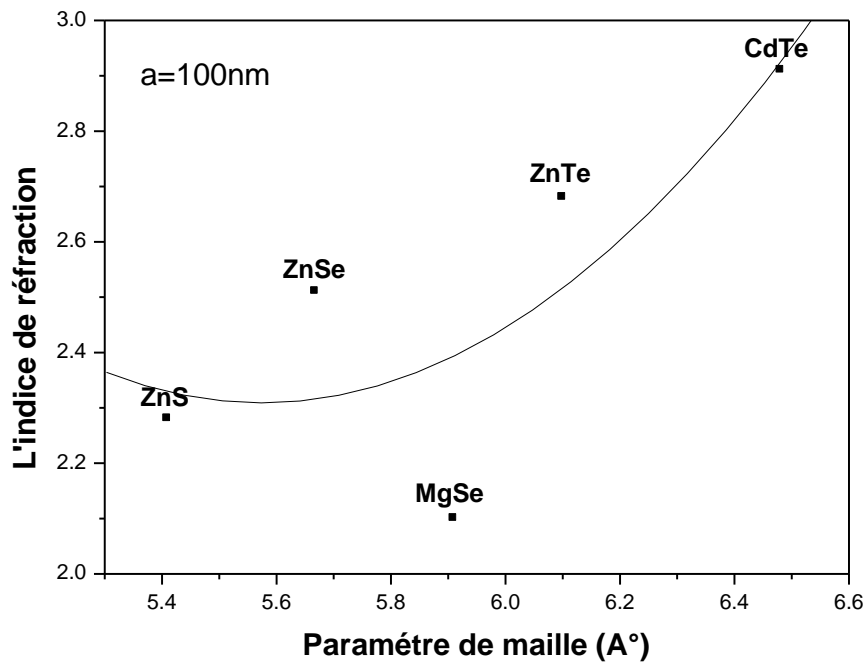


Figure 3-23 La variation de l'indice de réfraction en fonction de paramètre de maille ($a=100$ nm)

Notons que l'indice de réfraction du CdTe représente la plus grande valeur comparée à celle des autres composés binaire étudiés, c'est le comportement inverse présenté dans le cas du gap énergétique.

Les équations du fit quadratique de l'indice de réfraction pour les composés semiconducteur nanostructuré (MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe) en fonction du paramètre de maille pour ($a=3$ nm) et ($a=100$ nm) sont données comme suit :

$$\text{Pour } a=3\text{nm} : n(A) = 30.65543 - 9.94517A + 0.86888 A^2 \quad (3-24)$$

$$\text{Pour } a=100\text{nm} : n(A) = 25.59274 - 8.3541 A + 0.74936A^2 \quad (3-25)$$

(A) paramètre de maille.

Ces équations peuvent servir de modèle de calcul de l'indice de réfraction en nano.

4. Étude des propriétés diélectriques

4.1. La constante diélectrique de haute fréquence ϵ_∞

Basé sur les valeurs calculées de l'indice n obtenu à partir des relations utilisés, la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_∞ , a été estimée pour différentes valeur du rayon du point quantique (a) en utilisant l'expression suivante :

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (3-26)$$

Les tableaux 3-7 et 3-8 permettent de calculer la constante diélectrique haute fréquence et d'obtenir les figures suivantes :

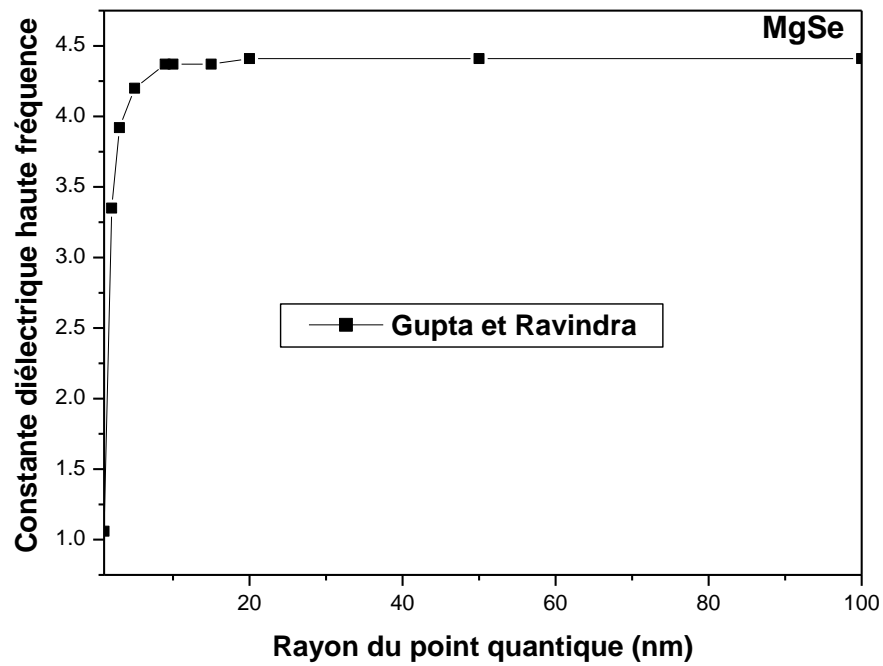


Figure 3-24 Constante diélectrique de haute fréquence de MgSe en fonction du rayon du point quantique.

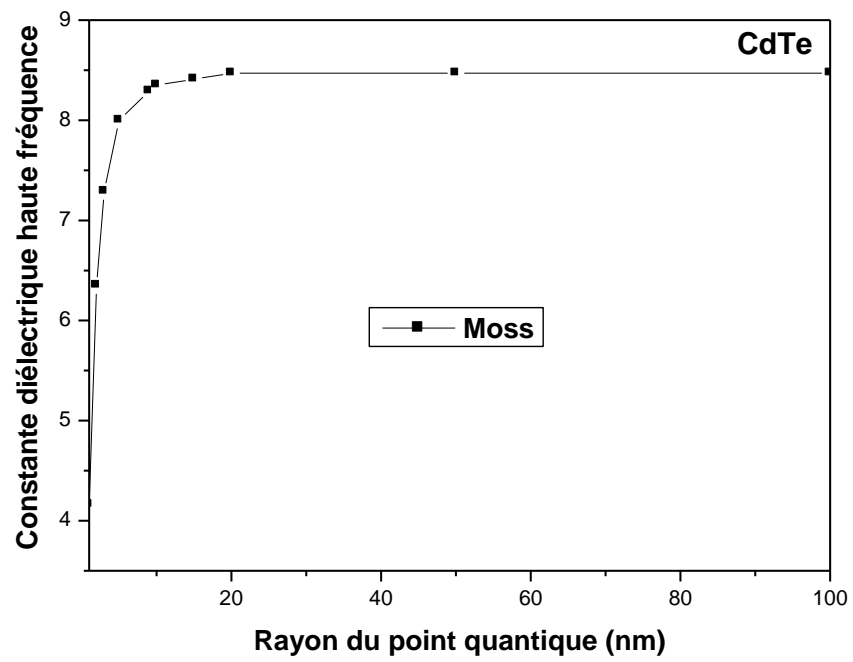


Figure 3-25 Constante diélectrique de haute fréquence de CdTe en fonction du rayon du point quantique.

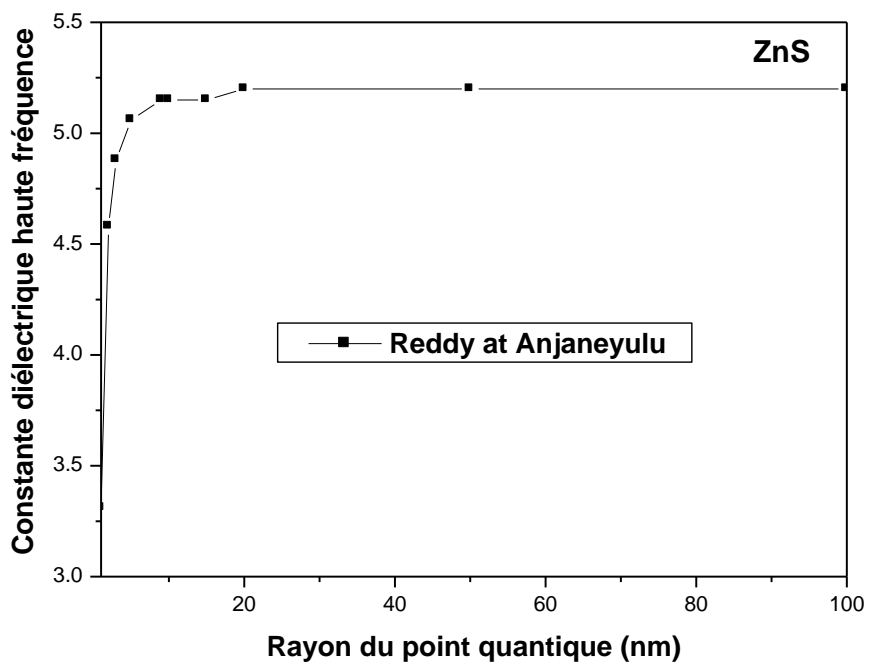


Figure 3-26 Constante diélectrique de haute fréquence de ZnS en fonction du rayon du point quantique.

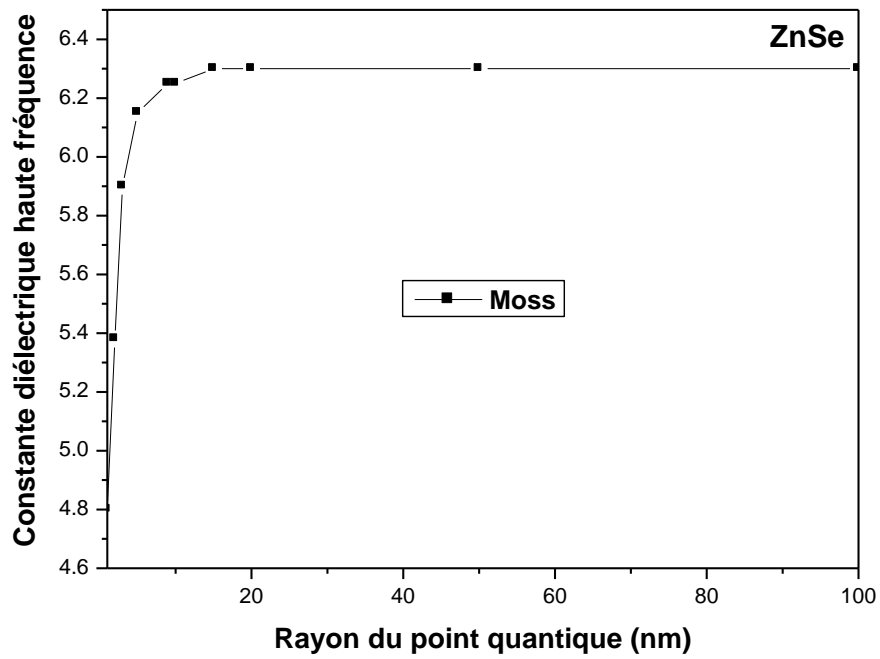


Figure 3-27 Constante diélectrique de haute fréquence de ZnSe en fonction du rayon du point quantique.

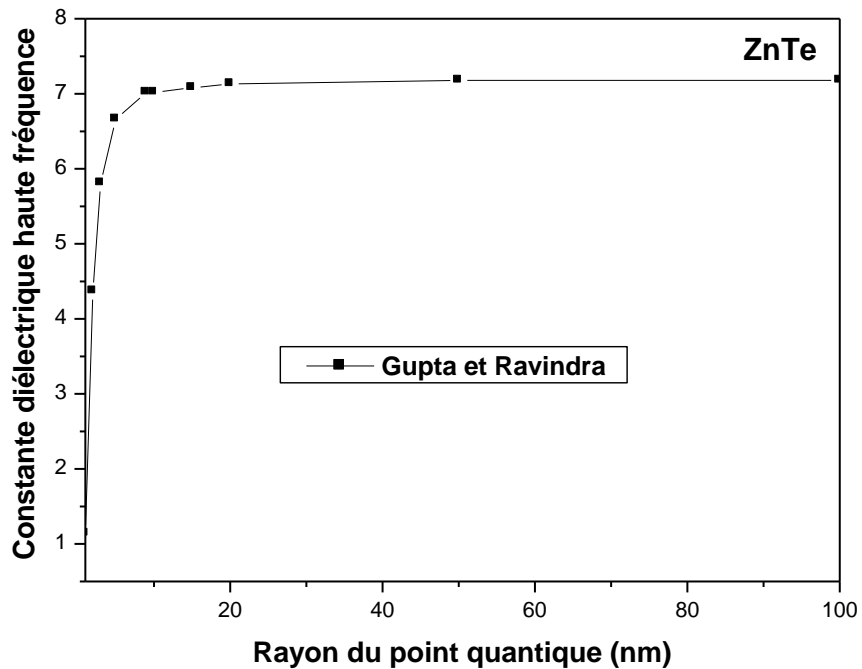


Figure 3-28 Constante diélectrique de haute fréquence de ZnTe en fonction du rayon du point quantique.

Les équations du fit quadratique pour chaque modèle sont données comme suit :

$$\text{CdTe} : \varepsilon_{\infty}(a) = 6.57239 + 0.1019a - 8.52238e^{-4}a^2 \quad (3-27)$$

$$\text{MgSe} : \varepsilon_{\infty}(a) = 3.20576 + 0.06639a - 5.59072e^{-4}a^2 \quad (3-28)$$

$$\text{ZnSe} : \varepsilon_{\infty}(a) = 5.60476 + 0.03763a - 3.15359e^{-4}a^2 \quad (3-29)$$

$$\text{ZnS} : \varepsilon_{\infty}(a) = 4.49454 + 0.03813a - 3.19534e^{-4}a^2 \quad (3-30)$$

$$\text{ZnTe} : \varepsilon_{\infty}(a) = 4.65433 + 0.13598a - 0.00114e^{-4}a^2 \quad (3-31)$$

Pour voir la variation de la constante diélectrique des composés binaires semi-conducteurs (MgSe , CdTe , ZnS , ZnSe , ZnTe) en fonction du paramètre de maille en $a=3\text{nm}$ et $a=100\text{nm}$ nous avons tracé les figures suivantes :

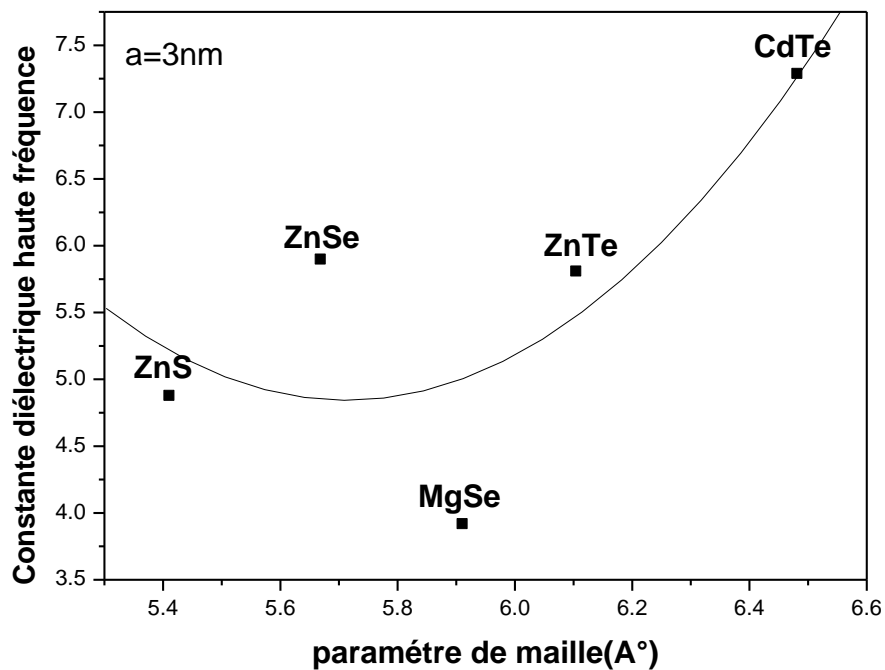


Figure 3-29 la variation de ε_{∞} en fonction de paramètre maille ($a=3\text{nm}$)

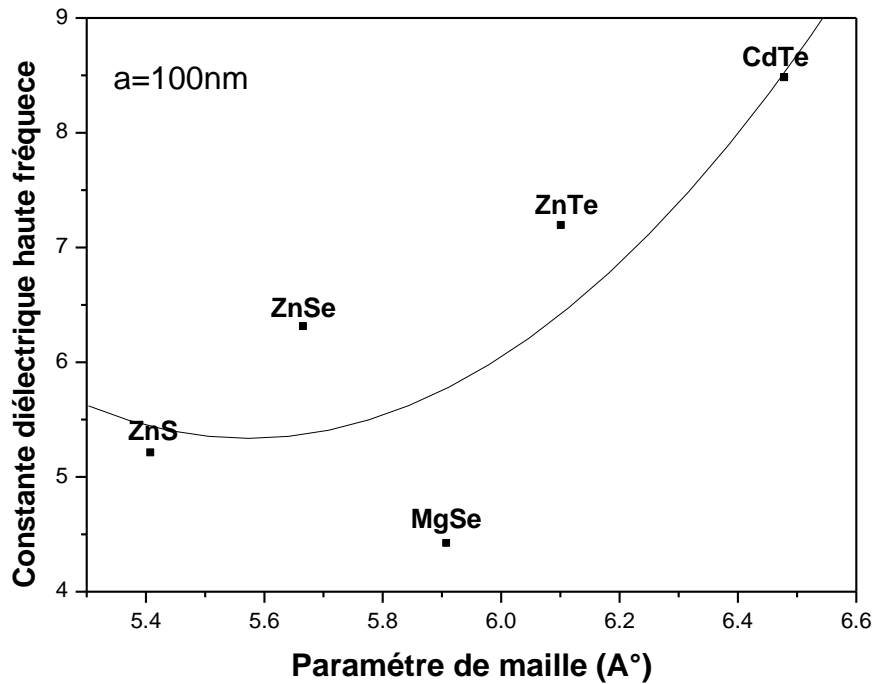


Figure 3-30 la variation de ϵ_{∞} en fonction de paramètre maille ($a=100\text{nm}$)

Nous remarquons que le constante diélectrique haute fréquence à le même comportement que l'indice de réfraction n .

Les équations du fit quadratique du constante diélectrique haute fréquence pour les composé semiconducteur nanostructuré (MgSe , CdTe , ZnS , ZnSe , ZnTe) en fonction de paramètre de maille ($a=3\text{nm}$) et ($n=100\text{nm}$) sont données comme suit :

$$\text{Pour } a=3\text{nm} : \epsilon_{\infty}(A) = 138.40059 - 46.75674 A + 4.09224 A^2 \quad (3-32)$$

$$\text{Pour } a=100\text{nm} : \epsilon_{\infty}(A) = 125.96611 - 43.29233 A + 3.88424 A^2 \quad (3-33)$$

(A) le paramètre de maille.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié l'effet du confinement quantique sur les propriétés physiques: électroniques, optiques et diélectriques des matériaux semiconducteurs nanostructurés II-VI binaires : MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe, dans la structure zinc-blende. Ces propriétés ont été examinées en fonction du rayon du point quantique en (nm).

Références du chapitre 3

- [1] W. Kara Mohamed, Les Structures de bandes électroniques et les propriétés relatives aux semiconducteurs quasi binaires $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$, thèse de Doctorat, Université, Biskra (2012).
- [2] Mezrag Fadila, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semiconducteur, thèse de Doctorat, Université, Biskra (2012).
- [3] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer, Berlin (1988).
- [4] T. Kobayasi and H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci, Tokyo University. 2 (1993) 7.
- [5] A. Mujica, A. Munoz, S. Radescu and R.J. Needs, Phys. Stat. Sol. B 211 (1999) 345.
- [6] J. M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287.
- [7] N.Bouarissa and M. Boucenna, Phys. Scr. 79 (2009) 15701.
- [8] Z. Charifi, N. Bouarissa / Materials Science and Engineering B 131 (2006) 162–168
- [9] L. Hannachi, N. Bouarissa / Superlattices and Microstructures 44 (2008) 794_801
- [10] A. Zoui, M. Fehat, B. Khelifa, TP.Dufour, and H.Aourag.
- [11] S. Adachi, Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors, John Wiley & Sons (2009).
- [12] N.Baghdadli, these de magister, Univ. Abou-Bakr Belkaid, Tlemcen (2010).
- [13] A Kobayashi, O.F. Sankey, J.D. Dow, Phys. Rev. B 25 (1982) 6367.
- [14] G.-D.Lee, M.H. Lee, J.Ihm, Phys. Rev. B 52 (1995) 1459.
- [15] W. Kara Mohamed, F. Mezrag,, N. Bouarissa, Energy gaps and carrier effective masses of quasi-binary $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$ crystals, Superlattices and Microstructures, 47 (2010) 341-348.
- [16] N. M. Ravindra, P. Ganapahy, J. Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21.
- [17] V. P. Gupta, N. M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [18] N. M. Ravindra, V. K. Srivastava, Infrared Phy. 19 (1979) 603.
- [19] Y. Al-Douri, N. M. Ahmed, N. Bouarissa and A. Bouhemadou, Materials and Design. 32 (2011) 4088.
- [20] N. M. Ravindra, S. Auluck, V. K. Srivastava, Phys. Stat. Sol. (b) 93 (1979) k 155.
- [21] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [22] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. (b) 174 (1992) K 91.
- [23] R. R. Reddy, Y. N. Ahmmed, Infrared Phys. Technol. 36 (1995) 825.

[24] M. Rabah et al. / Materials Science and Engineering B100 (2003) 163_171

[25] D.W.Palmer, /www.Semiconductors.CO.UKS, 2008.03.

Conclusion générale

Conclusion générale

Le présent travail est réalisé dans le cadre de l'étude l'effet du confinement quantique sur les propriétés physiques électroniques, optiques et diélectriques des matériaux semiconducteurs II-VI binaires nanostructurés : MgSe ,CdTe ,ZnS ,ZnSe ,ZnTe dans la phase zinc-blende. Toutes ces propriétés ont été examinées en fonction du rayon du point quantique. nous avons utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels .

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

Pour la transition du gap pour les matériaux en question, nous remarquons que les gaps du ZnSe et ZnTe présentent une transition du gap indirect E_F^X au gap direct E_F^I quand le rayon de point quantique dépasse une certaine valeur, cette valeur est propre à chaque composé semiconducteur nanostructuré, par contre, aucune transition n'a été observée pour les composés binaires MgSe , CdTe et ZnS .

L'indice de réfraction a été calculé selon six modèles empiriques. La variation de l'indice de réfraction en fonction de rayon du point quantique est d'une manière non linéaire pour $1\text{nm} \leq a \leq 100\text{nm}$, nous remarquons une croissance de l'indice de réfraction quand le rayon quantique augmente, puis il commence à se stabiliser quand le rayon dépassé 20 nm. Toutefois La diminution de taille réduit énormément l'indice de réfraction par rapport au volume et son comportement est l'inverse de celui du gap énergétique.

Le calcul de l'erreur relative de nos résultats par rapport aux valeurs théoriques nous a permis de connaître le modèle le plus précis des six modèles utilisés dans le calcul de l'indice de réfraction. Notant que pour les matériaux : MgSe, ZnTe le modèle de Gupta et Ravindra paraît le plus proche et pour le CdTe et ZnSe le modèle de Moss et pour ZnS le modèle Reddy et Anjaneyulu.

La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ est aussi calculée en utilisant le modèle prouvé dans le calcul de l'indice de réfraction et cela pour chaque composé

nanostructuré, elle varie en fonction de rayon du point quantique , la variation de cette constante est similaire à la variation de l'indice de réfraction. La réduction de sa valeur est remarquable avec la diminution de la taille.

Après l'étude de la variation du gap fondamental , l'indice de réfraction et la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction du paramètre de maille, nous pouvons conclure que : le matériau qui a le paramètre de maille le plus grand a un gap inférieur, l'indice de réfraction du CdTe représente la plus grande valeur comparée à celle des autres composés binaire étudiés, c'est le comportement inverse présenté dans le cas du gap énergétique, le constante diélectrique haute fréquence à le même comportement que l'indice de réfraction n .

Finalement, ce travail nous a permis de toucher de près à une partie très importante de matériaux qui sont les matériaux semi-conducteurs nanostructurés et voir l'effet du confinement sur leurs les propriétés physiques. Le contrôle de ces paramètres est d'importance capitale pour la conception des dispositifs optoélectroniques.

Liste des figures

Chapitre 1: Notions fondamentales sur les semiconducteurs

Figure 1-1 La structure de bandes des semiconducteurs type N et P	4
Figure 1-2 Extrait du tableau périodique des éléments chimiques et composition en SC binaires suivant leurs groupes.....	5
Figure 1-3 Exemple: Structure cubique Zinc blende (Sphalérite) de ZnTe.....	7
Figure 1-4 Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.....	7
Figure 1-5 La zone de Brillouin pour une structure zinc-blende.....	8
Figure 1-6 Schéma de bandes au centre de la zone de Brillouin.....	10
Figure 1-7 Niveaux électroniques dans un atome isolé et dans un cristal.....	10
Figure 1-8 La structure des bandes d'énergie: gap direct et gap indirect.....	11
figure 1-9 Les trois phénomènes des applications optoélectroniques.....	13
Figure 1-10 La structure de la cellule solaire CdS/CdTe	14

Chapitre 2 : Les semiconducteurs nanostructurés

Figure 2-1 Représentation de l'échelle nanométrique.....	18
Figure 2-2 Classification des nanomatériaux selon leur dimension.....	19
Figure 2-3 Variation du gap optique pour différents semiconducteurs en fonction de la taille des nanocristaux	22

Chapitre 3: Résultats et discussion

Figure 3-1 Structure de bande pour MgSe	29
Figure 3-2 Structure de bande pour CdTe	29
Figure 3-3 Structure de bande pour ZnS	30
Figure 3-4 Structure de bande pour ZnSe	30
Figure 3-5 Structure de bande pour ZnTe	31
Figure 3-6 Variation du gap d'énergie E_F^X en fonction du rayon du point quantique pour le MgSe.	34
Figure 3-7 Variation du gap d'énergie E_F^F en fonction du rayon du point quantique pour le CdTe.....	35
Figure 3-8 Variation du gap d'énergie E_F^F en fonction du rayon du point quantique pour le ZnS.	35

Figure 3-9 Variation du gap d'énergie E_F^T en fonction du rayon du point quantique pour ZnSe.....	36
Figure 3-10 Variation du gap d'énergie E_F^T en fonction du rayon du point quantique pour ZnTe.....	36
Figure 3-11 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour MgSe.	37
Figure 3-12 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour ZnS.	38
Figure 3-13 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour ZnSe.....	38
Figure 3-14 Variation des gaps d'énergie en fonction du rayon du point quantique pour ZnTe.....	39
Figure 3-15 la variation de gap fondamental en fonction de paramètre de maille (a=3nm)	41
Figure 3-16 la variation de gap fondamental en fonction de paramètre de maille(a=100nm)	41
Figure 3-17 Variation de l'indice de réfraction du MgSe en fonction du rayon du point quantique.	44
Figure 3-18 Variation de l'indice de réfraction du CdTe en fonction du rayon du point quantique.	45
Figure 3-19 Variation de l'indice de réfraction du ZnS en fonction du rayon du point quantique.	45
Figure 3-20 Variation de l'indice de réfraction du Znse en fonction du rayon du point quantique.	46
Figure 3-21 Variation de l'indice de réfraction du ZnTe en fonction du rayon du point quantique.	46
Figure 3-22 La variation de l'indice de réfraction en fonction de paramètre de maille (a=3nm)	49
Figure 3-23 La variation de l'indice de réfraction en fonction de paramètre de maille (a=100 nm)	50
Figure 3-24 Constante diélectrique de haute fréquence de MgSe en fonction du rayon du point quantique.	51

Figure 3-25 Constante diélectrique de haute fréquence de CdTe en fonction du rayon du point quantique.....	52
Figure 3-26 Constante diélectrique de haute fréquence de ZnS en fonction du rayon du point quantique.....	52
Figure 3-27 Constante diélectrique de haute fréquence de ZnSe en fonction du rayon du point quantique.....	53
Figure 3-28 Constante diélectrique de haute fréquence de ZnTe en fonction du rayon du point quantique.....	53
Figure 3-29 la variation de ϵ_{∞} en fonction de paramètre maille (a=3 nm).....	54
Figure 3-30 la variation de ϵ_{∞} en fonction de paramètre maille (a=100 nm).....	55

Liste des Tableaux

Chapitre 1: Notions fondamentales sur les semiconducteurs

Tableau 1-1 Divers groupes de semiconducteurs.....	5
Tableau 1-2 Le paramètre de maille et la structure cristalline des semiconducteurs II-VI.....	8
Tableau 1-3 Les valeurs expérimentales de la constante diélectrique statique et de haute fréquence de quelques matériaux Semiconducteurs étudiés.....	12

Chapitre 3: Résultats et discussion

Tableau 3-1 Les facteurs de forme pseudopotentiels des composés MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe et ZnTe.....	27
Tbleau 3-2 Les paramètres de maille des composés binaires semi-conducteurs II-VI ..	28
Tableau 3-3 Les valeurs des gaps d'énergie en massif calculés et théoriques des composés semiconducteurs (CdS, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe).....	32
Tableau 3-4: Les masses effectives des électrons et des trous.....	33
Tableau 3-5 Tableau des transitions des gaps des composés binaires semi-conducteurs II-VI.....	39
Tableau 3-6 Valeurs des gaps d'énergie des composés obtenues par la méthode de la masse effective et comparées aux données théoriques.....	40
Tableau 3-7 Calcul des indices de réfraction des semiconducteurs nanostructurés étudiés pour (a=100nm), comparés aux données théoriques.....	47
Tableau 3-8 Détermination de la précision pour les composés binaires semiconducteurs nanostructurés II-VI	48

Résumé

Notre travail consiste à l'étude de l'effet du confinement quantique sur les propriétés physiques des matériaux semiconducteurs II-VI binaires nanostructurés : MgSe ,CdTe ,ZnS ,ZnSe ,ZnTe dans la phase zinc-blende, en utilisant la méthode pseudo-potentiel empirique (EPM). La dépendance de la taille de tous les propriétés physiques : gap énergétiques direct et indirect, l'indice de réfraction et la constante diélectrique haute fréquence ont été examiné et discutés.

Nos résultats en raison de l'effet du confinement quantique, montre que le gap direct est considérablement augmenté par rapport aux valeurs du volume, tandis que l'indice de réfraction obtenu et les constantes diélectriques à haute fréquence sont réduites.

الملخص

يحتوي عملنا على دراسة تأثير الحبس الكمي على الخصائص الفيزيائية لمواد أشباه الموصلات الثنائية النانوية II-VI : MgSe ، CdTe ، ZnS ، ZnSe ، ZnTe في طور خليط الزنك ، باستخدام طريقة الاحتمال الزائف التجريبية (EPM) . تم فحص ومناقشة الاعتماد على الحجم لجميع الخواص الفيزيائية: فجوة الطاقة المباشرة وغير المباشرة ، معامل الانكسار وثابت العزل الكهربائي عالي التردد. نتأجنا بسبب تأثير الحبس الكمي ، تبين زيادة الفجوة المباشرة بشكل كبير بالنسبة لقيمة الحجم ، بينما يتم تقليل معامل الانكسار الذي تم الحصول عليه وثوابت العزل الكهربائي عالية التردد.

Abstract

Our work consists of the study of the effect of quantum confinement on the physical properties of nanostructured binary II-VI semiconductor materials: MgSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnTe in the zinc-blende phase, using the pseudo-potential empirical method (EPM). The size dependence of all physical properties: direct and indirect energy gap, refractive index and high frequency dielectric constant are examined and discussed.

Our results that due to the effect of quantum confinement, show that the direct gap is considerably increased relative to the volume value, while the obtained refractive index and the high frequency dielectric constants are reduced.