



N° d'ordre : ...../2016

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et**  
**De la Recherche Scientifique**

**Université Mohamed Boudiaf - M'sila**

**Faculté des Sciences**

**Département de Physique**

**MEMOIRE**

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

**MASTER**

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique Appliquée : Physique des matériaux intelligents**

Par

**BELABBAS Hanane**

**THEME**

---

**Investigation théorique des propriétés élastiques des semi-conducteurs III-V**

---

Soutenu le : 04/06/2016

Devant le jury composé de :

F. MEZRAG	MCB Univ. de M'sila	Président
N. BOUARISSA	Prof Univ. de M'sila	Rapporteur
S. SAIB	Prof Univ. de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2016

## Remerciements

La description de tout travail réalisé débute par des remerciements. Toutefois, il paraît difficile de remercier en seulement quelques lignes et comme je le voudrais toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce mémoire.

Je tiens à remercier **ALLAH** qui m'a donné la force de faire ce modeste travail. Je suis très heureuse de témoigner de ma profonde estime à mon encadreur Monsieur **N.Bouarissa**, je lui suis très reconnaissante de m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et d'avoir proposé et dirigé ce travail. Il a été très disponible malgré ses charges, il a toujours pris le temps de répondre très clairement à mes questions. Qu'il trouve ici toute ma gratitude.

Un grand merci à **Madame F. MEZRAG**, pour ses aides techniques, son savoir scientifique de qualité, sa gentillesse, sa disponibilité et sa patience.

Je remercie très sincèrement Madame **F. MEZRAG** Maître de conférences à l'université de M'sila, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury de ce mémoire.

Je suis très reconnaissante au Madame **S. aib** avoir accepté d'examiner ce travail et de me faire l'honneur de participer au jury.

Je tiens à exprimer toute mes respects a mes parent, sœurs et mon frères qui m'ont toujours encouragé.

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

Je ne saurais aussi oublier de citer mes amis et mes collègues, ainsi que tous ceux qui ont participé de loin ou de près pour l'élaboration de ce mémoire.

# *Dédicace*

Je dédie ce modeste travail :

A mon père pour tous ce qu'il ma donné.

A ma mère pour tous son sacrifice.

A mes sœurs et mon frères.

A tous ceux qui me sont chères et proches.

A la famille Belabbas.

A toutes mes amies.

A tous qui m'ont aidé de près ou de loin  
dans la réalisation de ce modeste travail.

*Hanane Belabbas*

## Sommaire

Remerciements .....	i
Dédicaces .....	ii
Sommaire .....	iii
Introduction Générale .....	1

### Chapitre I : Généralités sur Les semi-conducteurs

I.1. Introduction .....	3
I.2. Définition d'un semi-conducteur .....	3
I.2.1. La Conductivité électrique des semi-conducteurs .....	4
I.2.2. La notion de bandes d'énergie dans un semi-conducteur.....	4
I.2.3. Bande interdite (gap énergétique).....	5
I.2.4. La conduction électrique des électrons et des trous.....	6
I.2.5. Les différents types de semi-conducteurs .....	7
I.2.5.1. Semi-conducteur intrinsèque .....	7
I.2.5.2. Semi-conducteur extrinsèque .....	8
I.2.5.3. Le dopage des semi-conducteurs .....	8
I.2.5.3.1. Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N.....	8
I.2.5.3.2. Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P.....	9
I.3. La classification des semi-conducteurs .....	10
<b>Références .....</b>	<b>14</b>

### Chapitre II : propriétés élastique des semi-conducteurs

II-1 Introduction.....	15
II.2. Energie et tenseur des constantes élastiques.....	15
II.3. Tenseur des déformations.....	15

II.4. Tenseur des contraintes.....	16
II.5. Relation contrainte-déformation.....	17
II.6. Loi de Hooke.....	19
II.7. Densité d'énergie élastique.....	21
II.8. Module de compression et compressibilité.....	21
II.9. Méthode calcul.....	21
II.10. Formules des modules d'élasticité pour des solides polycristallins.....	23
II.10.1 Les conditions de stabilité mécanique.....	24
II.10.2 Les factor anisotropies.....	25
II.11 La température de Debye.....	25
<b>Références.....</b>	<b>26</b>

### **Chapitre III : Résultats et discussions**

III.1. constantes élastiques.....	28
III.2. Facteur anisotropies.....	30
III.3. Le paramètre de Kleinman.....	32
III.4. Module de cisaillement.....	33
III.5. Module de compression et compressibilité.....	34
III.6. Les conditions de stabilité mécanique.....	37
<b>Références .....</b>	<b>39</b>
<b>Conclusion général.....</b>	<b>40</b>
<b>Liste des figures et tableaux</b>	



**Introduction générales**

## Introduction générales

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le silicium. Ce dernier a été l'un des premiers matériaux utilisés (avec le germanium) pour fabriquer des composants électroniques.

L'usage et la connaissance de matériaux aux propriétés particulière a favorisé l'innovation technologique, qui a introduit dans notre environnement d'innombrables instruments et outils renfermant des mystères électroniques. Parmi ceux-ci, les semi-conducteurs qui sont des matériaux clés des techniques actuelles, vu la richesse de leur comportement vis-à-vis des sollicitations auxquelles ils sont soumis [1].

Parmi ceux-ci, les composés formés des éléments III-V de la classification de Mendeleïev, qui ont un champ d'application très élargi.

Dans ce présent travail, nous avons calculé les constantes élastiques à savoir  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  aussi que le facteur d'anisotropie, le paramètre, le paramètre de Kleinman, module de cisaillement, et module de compression.

Le but de ce travail est de valider notre modèle utilisé pour le calcul des constantes élastiques des semi-conducteurs, et de calculer des paramètres mécaniques importants qui sont liés aux constantes élastiques et de vérifier les critères de stabilité mécanique Nous avons aussi tenter de trouver des relations qui donnent la variation des paramétrés calculés en fonction du paramètre de maille pour les composés semi-conducteurs étudiés. Cela pouvant aider à calculer les paramètres mécaniques des matériaux d'intérêt à partir de leur constante de maille.

-Dans le premier chapitre, nous tenterons d'exposer quelques notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs et nous décrirons les classes des semi-conducteurs à savoir les composés binaires III-V.

-Dans le second chapitre, nous essayerons de donner quelques généralités sur les propriétés physiques des semi-conducteurs, notamment, les propriétés élastiques des matériaux semi-conducteurs III-V.

-Enfin, nous exposons dans le troisième chapitre nos résultats et les discussions relatives de ce travail. Finalement nous terminerons par une conclusion générale.



## **Chapitre I :**

**Généralités sur les semi-conducteurs**

## I.1 Introduction

Les technologies semi-conducteur ont connues la plus forte progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement des économies modernes et cela, grâce à leur propriétés physiques curieuses qui sont connues depuis longtemps.

Parmi ceux -ci, les matériaux semi-conducteurs des groupes III-V de la classification de Mendeleïev, qui ont un champ d'application très élargi.

Ces matériaux sont actuellement utilisés dans plusieurs composants électroniques très importants, ils jouent un rôle majeur dans les applications hyperfréquences, l'électronique de puissance mais surtout dans le domaine de l'optoélectronique [I.1].

Les alliages semi-conducteurs sont aussi considérés comme une classe importante des matériaux, grâce à la richesse de leurs structures électroniques et leurs propriétés physiques qui peuvent être ajustées et contrôlées, pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré [I.2].

Ils ont trouvé une large application dans les dispositifs optiques et électroniques. Ces dernières années, la littérature sur les propriétés fondamentales de ces matériaux a rapidement augmenté, beaucoup de progrès et de découvertes majeurs ont été réalisés.

Pour une bonne maîtrise de ces composants optoélectroniques, il est évidemment nécessaire, d'avoir une connaissance des propriétés élastiques de ces matériaux semi-conducteurs [I.3].

Ils sont similaires aux isolants, à la différence près de leur bande interdite qui n'est pas plus grande, c'est de ce fait, que découle la propriété la plus caractéristique d'un semi-conducteur.

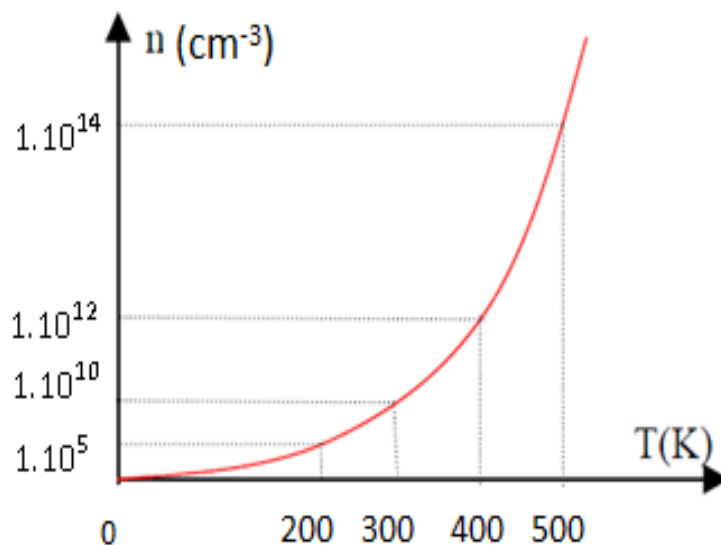
## I.2 Définition d'un semi-conducteur

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

- ❖ La température,
- ❖ L'éclairement,
- ❖ La présence d'impuretés (dopage) [I.4].

### I.2.1 La Conductivité électrique dans les semi-conducteurs

La conductivité des semi-conducteurs est entre celle des métaux et celle des isolants se comportant comme des isolants 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 [I.5].



**Figure I-1 :** 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 permet, 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 où une excitation leur permet de devenir libres et participent à la conduction.

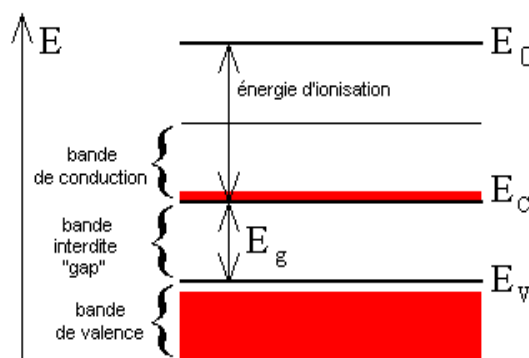
### I.2.2 La notion de bandes d'énergie dans un semi-conducteur

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes ; modèle quantique en physique des solides, qui détermine les énergies permises des électrons dans un solide et permet de comprendre la notion de conductivité électrique, elle est issue de la théorie des orbitales moléculaires.

Ce modèle stipule qu'un électron peut prendre des valeurs d'énergie qu'on les nomme bande permises, séparées par d'autres bandes appelées bandes d'énergies interdites.

Les bandes de faible énergie pleines, correspondant à des électrons participant au maintien de la structure cristalline ; ce sont des bandes dites de valence.

Les bandes de haute énergie vides, correspondant à des électrons participant à la conduction électrique, sont appelées bandes de conduction [I.6].



**Figure I-2 :** Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs

### I.2.3 Bande interdite (gap énergétique)

Dans un semiconducteur comme dans un isolant, l'écart énergétique entre la bande de conduction et la bande de valence est appelé largeur de bande interdite (Energy band gap), ou tout simplement gap noté  $E_g$ , dans lequel, un porteur de charge ne peut se retrouver.

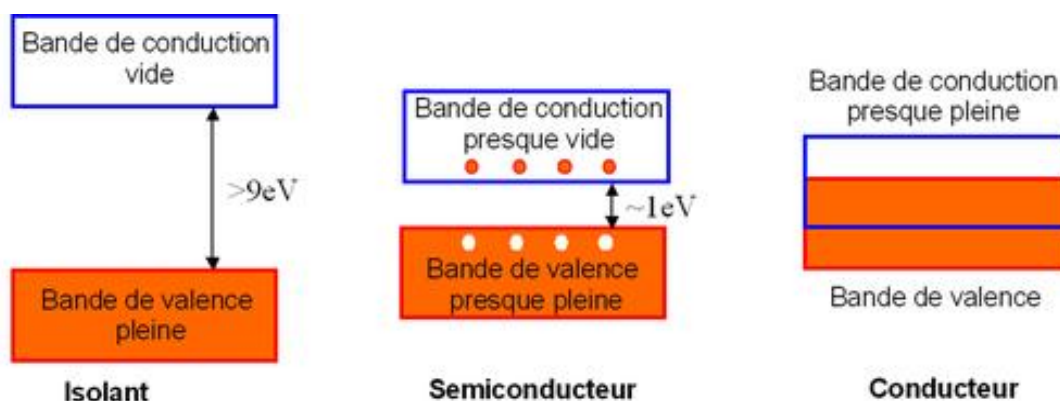
C'est un paramètre fondamental, déterminant les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs et évaluant ainsi, leur domaine d'application.

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction.

Alors que pour les semi-conducteurs, cette bande est suffisamment petite pour qu'une excitation adéquate, permette aux électrons de la bande de valence de rejoindre la bande de conduction, ainsi le 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 [I.7].

Une structure de bandes comparative des trois types de matériaux métal, semi-conducteur et isolant est représentée sur la figure (1-3).



**Figure I-3 :** Les structures des bandes énergétiques : Métal, semi-conducteur, isolant.

### I.2.4 La conduction électrique des électrons et des trous

Le fait de fournir aux électrons de valence d'un semi-conducteur, une énergie suffisante, capable de briser une liaison de valence et de créer ainsi des électrons mobiles, ces derniers peuvent avoir par la suite une transition vers la bande de conduction, les états vacants ainsi créés dans cette bande de valence, sont appelés trous, ils sont dus alors à l'interaction des électrons avec le réseau cristallin [I.4].

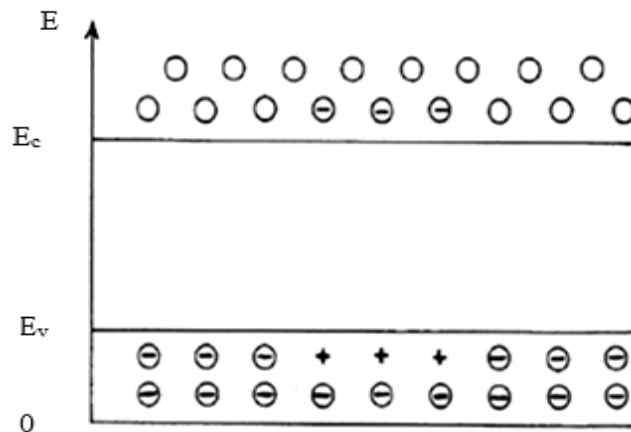
Sous l'action d'un champ électrique ou magnétique, tous les électrons meurent dans une direction faisant en sorte que les trous bougent dans la direction opposée. La neutralité du matériau impose que les trous et les électrons soient identiques [I.3].

Les physiciens supposent donc, que cette particule imaginaire (quasiparticule) doit avoir une charge positive, le rôle important joué par ces particules et dû au fait, qu'elles réagissent comme des porteurs de charges mobiles.

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.

La répartition de ces porteurs est donnée sur le schéma si dessous [I.6] :



**Figure 1-4 : Répartition** des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence à la température  $T$ . (Le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre des trous dans la bande de valence).

Afin de comprendre le phénomène de conduction dans un semi-conducteur, nous devons définir quelques termes importants pour la description des semi-conducteurs.

## I.2.5 Les différents types de semi-conducteurs

### I.2.5.1 Semi-conducteur intrinsèque

Ce sont des semi-conducteurs très purs et très cristallisés présentant un réseau cristallin parfaitement périodique tout en ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour  $10^{13}$  atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température [I.8].

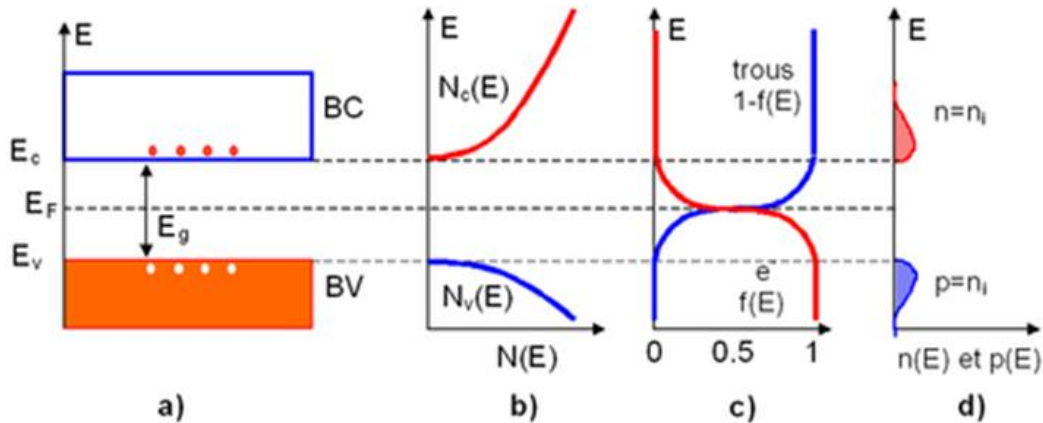


Figure I-5 : Le bilan électronique pour semi-conducteur intrinsèque.

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 net p).

### I.2.5.2 Semi-conducteur extrinsèque

Ces semi-conducteurs sont d'un grand intérêt technique, car leur conductivité électrique peut être fortement modifiée par l'adjonction dans leurs structures cristallines d'impuretés spécifiques. Les propriétés électriques étant ainsi déterminées par la présence des impuretés, on parle de conductivité extrinsèque. L'adjonction délibérée d'impuretés à l'intérieur d'un semi-conducteur intrinsèque est appelée dopage [I.3,4].

### I.2.5.3 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 [I.4].

La technique du dopage augmente la densité des porteurs, par la suite la conductivité électrique augmente. Deux types de dopage sont envisagés [I.9] :

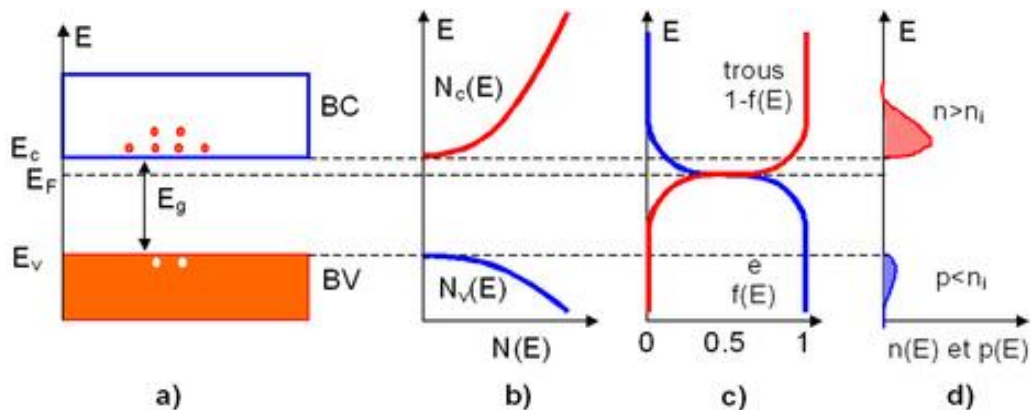
- ❖ Dopage du type P.
- ❖ Dopage du type N.

### I.2.5.3.1 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N

En introduisant des atomes pentavalents tels que le phosphore P, L'arsenic As (dopage N) dans un cristal, certaines liaisons se casent laissant en laissant place à ces extra atomes qui ont cinq électrons de valence, ce qui comble les 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 [I.10].

Ceci qui augmente considérablement la conductivité du matériau dopé. Les charges négatives (électrons) sont dits majoritaires.



**Figure 1-6** : Le bilan électronique pour un semi-conducteur extrinsèque de type N.

- a.** Diagramme des bandes d'énergie **b.** densités d'états énergétiques  
**c.** distributions de fermi-dirac **d.** densités énergétiques de porteurs (les densité de porteurs  $n$  et  $p$ ).

### I.2.5.3.2 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P

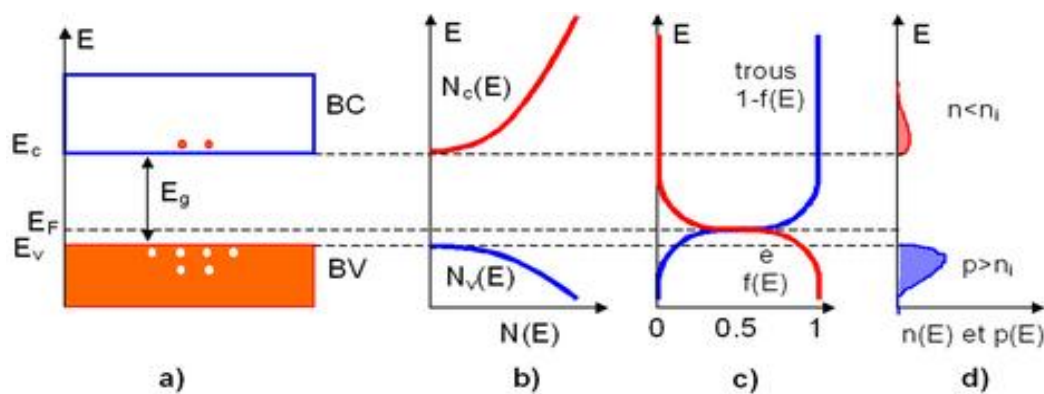
Dans ce cas on introduit des atomes trivalents tels que gallium Ga, l'indium In, le bore B, l'aluminium AL, il manque, alors, à l'impureté un électron de valence pour assurer les 4 liaisons avec les atomes de silicium voisins.

Un faible apport d'énergie ( $0.05\text{eV}$ ) suffit pour qu'un électron d'un silicium voisin soit capté par l'impureté : il y a formation d'un trou peu lié et donc mobile.

Les atomes trivalents (accepteurs) deviennent des ions négatifs par capture d'un électron. Compte tenu des taux de dopage, ces trous sont beaucoup plus nombreux que les porteurs intrinsèques du cristal pur.

La conduction extrinsèque de type P (positives) augmente et est assurée trous, les trous deviennent majoritaires.

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 1-6 :** Le bilan électronique pour un semi-conducteur extrinsèque de type P.

- 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  $p$ ).

### I.3 La classification des semi-conducteurs

Les semi-conducteurs sont principalement les éléments de la colonne IV du tableau de classification des éléments (Si, Ge) mais aussi des composés III-V (GaAs, GaN) ou II-VI (ZnS, CdTe).

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III<sup>ème</sup> colonne et d'un élément de la V<sup>ème</sup> colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau I-1 regroupe une liste de certains semi-conducteurs.

Plus récemment, certain solide organique (notamment utilisé pour des écrans d'affichage souples).

On peut les classer suivant les groupes des atomes qui les composent comme l'explique la figure ci-dessous. On trouve une très grande variété des matériaux "semi-conducteurs",

construits avec des liaisons covalentes (éléments du groupe IV), ou des liaisons qui deviennent de plus ioniques quand on s'éloigne du groupe IV. [I.11]

Colonne	Semi-conducteur
IV	Ge, Si
III- V    binaire	GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb
Ternaire	$Al_x Ga_{1-x}As, GaAs_yP_{1-y}$
quaternaire	$Al_x Ga_{1-x}As_yP_{1-y}$
II- VI    binaire	CdS, HgTe, CdTe, ZnSe, ZnS
ternaire	$Cd_xHg_{1-x}Te$
III-V / II-VI    quasi	$(GaP)_{1-x}(ZnSe)_x$
III-V / III-V    binaires	$(GaAs)_{1-x}(InSe)_x$

**Tableau I-1** : La liste de certains semi-conducteurs.

D'autres semi-conducteurs existent ou ont été réalisés à partir des éléments des illustre les éléments mis colonnes III et V, un morceau du tableau de **Mendeleïev** en cause pour former ces semi-conducteurs selon la figure ci-dessous.

III-V				
Groupe	Groupe	Groupe	Groupe	Groupe
II	III	VI	V	VI
	B	C	N	O
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te
Hg	Ti			
II-VI				

**Tableau I-2** Les groupes de semi-conducteurs.

Les semi-conducteurs de type II-VI sont constitués d'un élément de la colonne II de la classification périodique de Mendeleïev et d'un élément de la colonne VI.

Certaines semi-conducteurs II-IV sont à petit gap alors que d'autres, comme Zn S, Zn Se sont à grand gap. La majorité à gap direct et sont donc utilisés dans des dispositifs optoélectronique. [I.12]

Quant aux matériaux semi-conducteurs III-V sont fabriqués à partir d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, gallium ...), et d'un ou plusieurs éléments de colonne V (azote, phosphore, arsenic, antimoine ...) tel que le phosphore de gallium (GaP).

Les semi-conducteurs III-V ont prouvé leur efficacité dans les dispositifs lasers dans les domaines du rouge et de l'infrarouge par contre les matériaux II-IV constituent de bons candidats pour la réalisation de dispositifs à courte longueur d'onde dans le domaine du bleu et de l'ultraviolet.

L'intérêt pratique de ces semi-conducteurs est considérablement renforcé par la possibilité de la réaliser des alliages ternaire, quaternaire ou même quasi binaires plus rigides et d'améliorer la qualité de l'interface II-VI/III-V, tout en évitant de dégrader les propriétés des composés parents, ou l'on peut ajuster les caractéristique en jouant sur la composition  $x$  dans l'alliage et cette liberté ouvre grand la porte à de nouveaux matériaux aux propriétés sélectives selon l'utilisateur et selon l'utilisation et selon l'application.[I.7]

Le GaAs est un semi-conducteur III-V, qui comprend aussi 8 électrons s-p par cellule unité (3 provenant du Ga et 5 d'As).

Les composés III-V cristallisent généralement dans une structure zinc-blende. Ce réseau est constitué de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc) interpénétrés, l'un étant formé par les éléments III et l'autre par les éléments V.

**Références bibliographiques citées dans chapitre I**

- [I.1] G. Roosen, « Matériaux semiconducteurs III-V, II-VI et nitrures pour l'optoélectronique », Ed. Hermes Science (2003).
- [I.2] N. Bouarissa, R. Bachiri, Phys B. 322 (2002) 193.
- [I.3] G. kiréev, « Physique des semiconducteur et des composants électronique », 4 Ed. Masson (1998).
- [I.4] E. Mooser, « Introduction à la Physique du solide », 1 Ed. Presses polytechniques et universitaires romandes (1993).
- [I.5] [www.creea.u-bordeaux.fr](http://www.creea.u-bordeaux.fr) physique\_ technologie\_ composants\_ puissance.pdf.
- [I.6] C. Ngô- Hélène Ngô, physique des semi-conducteurs, 3 Ed. Dunod, (2007).
- [I.7] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod Université (1983).
- [I.8] Frederic P Miller, Agnes F Vandome, John McBrewster, « semiconducteurs», VDM Publishing House Ltd, (2010).
- [I.9] Beiser A. Physique Appliquée : Cours et Problèmes. McGrawHill, série Schaum.
- [I.10] Michel Sauzade, « Introduction à électronique analogique », Paris sud (1995).
- [I.11] Y. Quéré, « physique des matériaux », Ellipses, Paris, (1988).
- [I.12] P.Y.Y u and M. Cardona, « Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties», springer-Verlag, Berlin Heidelberg New-York, (2001).



## **Chapitre II :**

**Les propriétés élastiques des semi-conducteurs**

## II.1 Introduction

Les physiciens ont été, depuis des siècles, tentés de mettre en équations, le comportement élastique de la matière. Plus ou moins générales, précises ou robustes, ces modélisations s'appuient sur la représentation du phénomène à l'aide de champs vectoriels et de tenseurs. Ceux-ci décrivent, en particulier, la déformation de l'objet ainsi que les contraintes internes qu'ils subissent. Des lois de comportement viennent lier les contraintes et la déformation qui en résultent. Les idées physiques de base sont simples: La loi de Hooke et la deuxième loi de Newton.

Nous donnons les définitions de quelques grandeurs élastiques: tenseur de déformations, tenseurs des contraintes et constantes élastiques. Pour cela, nous nous sommes inspirés du livre de Kittel [II.1].

## II.2 Energie et tenseur des constantes élastiques

Soumettre un cristal idéal (cas du calcul ab-initio) à des contraintes extérieures afin d'estimer sa résistance à la déformation (dureté). La déformation dans ce cas est proportionnelle au module de cisaillement élastiques, alors que dans le cas d'un solide réel cette résistance est déterminée par les défauts cristallins (dislocations et /ou défauts ponctuels). Le module de compressibilité et de cisaillement peuvent être exprimés comme une combinaison linéaire d'un ensemble de constantes d'élasticité  $C_{ij}$  et sont actuellement considérées comme les meilleurs prédicteurs de dureté pour les solides [II.2].

## II.3 Tenseur des déformations

Sous l'action de forces extérieures, les corps solides se déforment [II.3]. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position au repos de l'objet pour laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet. Les éléments du tenseur des déformations  $\varepsilon_{ij}$  sont définis d'une façon générale par la relation suivante :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II-1})$$

avec  $(x_1=x, x_2=y, x_3=z)$

Le tenseur de déformation symétrique s'écrit :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{II-2})$$

Les éléments diagonaux de ce tenseur définissent les déformations d'élongation et expriment un changement de longueur dans les directions x, y ou z alors que les déformations notées  $\varepsilon_{xy}, \varepsilon_{yz}, \varepsilon_{zx}$  représentent les variations d'angles entre les axes Ox, Oy, et Oz. Les composantes de la déformation sont des rapports et par conséquent ils n'ont donc pas de dimension.

L'allongement relatif  $\left(\frac{\delta l}{l}\right)$  mesuré dans une direction quelconque indiquée par le vecteur unitaire  $\vec{d} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  est donné par le calcul ci-dessous :

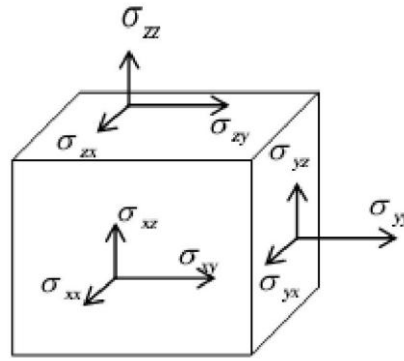
$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{xy} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{xz} & \alpha_{yz} & \alpha_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \quad (\text{II-3})$$

#### II.4 Tenseur des contraintes

Après la description de la déformation, nous introduisons ici le tenseur des contraintes qui va décrire en chaque point de l'espace la répartition des forces internes. Rappelons que la contrainte, est la force qui s'exerce sur l'unité de surface du solide [II.4].

##### Définition :

Le tenseur des contraintes, noté  $\bar{\sigma}$  est une matrice symétrique 3x3. C'est tout comme le tenseur des déformations, une approximation assez grossière de ce qui se passe en chaque point du matériau (figure III.1).



**Figure II-1 :** Les composantes du tenseur des contraintes.

Ces composantes, notées  $\sigma_{ij}$ , sont les éléments du tenseur  $\bar{\sigma}$ , l'indice  $i$  repérant la direction dans laquelle s'exerce la contrainte et l'indice  $j$  se référant à la face sur laquelle elle s'exerce. Chaque élément  $\delta_{ij}$ , représente alors une force par unité de surface ou bien une pression. Les éléments  $\sigma_{ij}$ , sont appelés contraintes normales, car elle agissent perpendiculairement à la face. Les éléments  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ , avec  $i \neq j$  sont les contraintes tangentielles puisqu'elles agissent sur le plan de la surface, Le tenseur des contraintes est symétrique et s'écrit :

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{II-4})$$

## II.5 Relation contrainte-déformation

Deux tenseurs d'ordre 2 peuvent être définis : le tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  et le tenseur des déformations  $\varepsilon_{ij}$ . Ils sont tous les deux symétriques, c'est à dire que  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  et  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ .

En théorie de l'élasticité linéaire, il existe une relation linéaire entre  $\sigma_{ij}$  et  $\varepsilon_{ij}$  donnée par la loi de Hooke généralisée [II.5].

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{II-5})$$

$C_{ijkl}$  est un tenseur d'ordre 4 appelé tenseur de rigidité élastique et il définit les constantes élastiques du matériau. Le nombre de combinaisons possibles de quatre indices  $ijkl$  est de  $3^4 = 81$  éléments. Dans le cas le plus général et par raison de symétrie de  $\sigma_{ij}$  et de  $\varepsilon_{kl}$  et en appliquant la relation de Maxwell  $C_{ijkl} = C_{klij}$  [II.5]. Les éléments  $C_{ijkl}$  se réduisent à 21 éléments indépendants. En outre, la symétrie du solide cristallin réduit notablement ce nombre

[II.6]. Les constantes  $C_{ijkl}$  sont donc notées par une nouvelle notation (notation de voigt), à savoir  $C_{\alpha\beta}$  [II.5,3], telles que les indices ij ou kl sont abrégés en remplaçant chaque paire d'indice initialement quadruplés par un seul indice  $\alpha$  ou  $\beta$ .

Ainsi, les abréviations seront comme suit :

$$\begin{array}{ll} 11 \longrightarrow 1 & 32 \text{ ou } 23 \longrightarrow 4 \\ 22 \longrightarrow 2 & 31 \text{ ou } 13 \longrightarrow 5 \\ 33 \longrightarrow 3 & 21 \text{ ou } 12 \longrightarrow 6 \end{array}$$

Exemple :

$$C_{1111} = C_{11}, C_{1112} = C_{16}, C_{2232} = C_{24}$$

La loi de Hooke généralisée peut écrire sous la forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (\text{II-6})$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{II-7})$$

Le nombre des coefficients  $C_{\alpha\beta}$  indépendants dépend de la symétrie du matériau.

Il croit si la symétrie du cristal est réduite : 3 pour un cristal cubique, 5 pour un cristal hexagonal, 9 pour un cristal orthorhombique...etc

Structure (avec groupe ponctuel)	Nombre des constantes indépendant
Triclinique	21
Monoclinique	13
Orthorhombique	9
Tétraogonal (4,-4/m)	7
Tétraogonal (422,4mm,-4 2/m, 4/mmm)	6
Hexagonal et rhomboédrique (3,-3)	7
Hexagonal et rhomboédrique (32,3m,-32/m)	6
Hexagonal (6,-6.6/m,622,6mm,-62m,-6/mmm)	5
Cubique	3

**Tableau II-1 :** Le nombre des constantes élastiques indépendant pour différents structure cristalline avec leur groupe ponctuel [II.5].

## II.6 Loi de Hooke

Le tenseur des contraintes  $\bar{\sigma}$  (la cause) et le tenseur des déformations  $\bar{\varepsilon}$  (l'effet) sont liés par le tenseur des constantes élastiques  $\bar{c}$  par [II.4] :

$$\bar{\sigma} = \bar{c}\bar{\varepsilon} \quad (\text{II-8})$$

La notation en indice contracté permet d'écrire cette relation :

$$\sigma_{ij} = C_{i,j,k,l} \varepsilon_{k,l} \quad \text{ou} \quad \left\{ \begin{array}{l} \sigma_{ij} : \text{est un élément de tenseur de rang 2} \\ \varepsilon_{k,l} : \text{est un élément de tenseur de rang 2} \\ C_{i,j,k,l} : \text{est un élément de tenseur de rang 4} \end{array} \right. \quad (\text{II-9})$$

### Remarque :

Le rang d'un tenseur correspond au nombre d'indices nécessaires pour définir l'un de ces éléments : Le tenseur de rang 2 compte  $3^2$  composants, et le tenseur de rang 4 compte  $3^4 = 81$  composants. Le produit tensoriel  $\bar{\sigma} = \bar{c}\bar{\varepsilon}$  reste très lourd à manipuler, c'est pourquoi nous allons faire appel à une écriture matricielle : Au tenseur  $\bar{\sigma}$  de rang 2, on associe un vecteur à 6 éléments :

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 = \sigma_{xx} \\ \sigma_2 = \sigma_{yy} \\ \sigma_3 = \sigma_{zz} \\ \sigma_4 = \sigma_{yz} \\ \sigma_5 = \sigma_{xz} \\ \sigma_6 = \sigma_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{II-10})$$

On obtient donc un vecteur (un tenseur de rang 1) dont les composants ne sont définis qu' l'aide d'un seul indice, On fait de

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 = \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_2 = \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_3 = \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_4 = 2\varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{II-11})$$

E pour le tenseur des déformations  $\bar{\varepsilon}$

En notation contractée, la loi de Hooke s'exprime alors :

$$\sigma_\alpha = C_{\alpha\beta} \varepsilon_\beta \text{ avec } \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \quad (\text{II-12})$$

$C_{\alpha\beta}$  étant réduit à une matrice 6×6 (tenseur de rang 2) symétrique possédant donc 21

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (\text{II-13})$$

Dans le cas d'une symétrie cubique [II.1], et en utilisant un repère dont les axes sont parallèles aux directions cristallographiques [100], [010] et [001] dans le système cubique, il ne reste que trois éléments indépendants  $C_{\alpha\beta}$  non nuls :  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  pour déterminer les propriétés élastiques du milieu. La matrice  $\bar{C}$  s'écrit :

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-14})$$

### II.7 Densité d'énergie élastique

La densité d'énergie élastique  $U$  est une fonction quadratique des déformations, dans le cas où la loi Hooke s'applique [II.4] :

$$B = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (\text{II-15})$$

On obtient les composantes des contraintes en dérivant  $U$  par rapport à la composante de déformation correspondante. Ce résultat découle de la définition de l'énergie potentielle :

$$\sigma_{xx} = \frac{\delta U}{\delta \varepsilon_{xx}} = \frac{\delta U}{\delta \varepsilon_1} = C_{11} \varepsilon_{12} + \frac{1}{2} \sum_{\beta=2}^6 (C_{1\beta} + C_{\beta 2}) \varepsilon_{\beta} \quad (\text{II-16})$$

### II.8 Module de compression et compressibilité

Soit une dilatation uniforme  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \frac{1}{3} \delta$  pour cette déformation l'énergie d'un cristal cubique est [II.4] :

$$IU = \frac{1}{6} (C_{11} + 2C_{12}) \delta^2 \quad (\text{II-17})$$

On définit le module de compressibilité  $B$  par :

$$U = \frac{1}{2} B \delta^2 \quad (\text{II-18})$$

Soit pour un cristal cubique :

$$B = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (\text{II-19})$$

La compression  $k$  est définie par  $K = \frac{1}{B} I$

### II.9 Méthode calcul

Dans nos calculs, nous nous sommes basés sur le modèle « Valence Force Field » de Harrison [II.7], qui permet de faire le lien entre les constantes élastiques  $C_{ij}$  et le paramètre

de Kleinman  $\xi$  [II.8]. L'ajustement des facteurs de forme, nous a permis de calculer la polarité  $\alpha_p$  Définie par Vogl [II.9].

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{II-20})$$

Où  $V_S(3)$  et  $V_A(3)$  sont les facteurs de formes symétriques et antisymétriques à G(111),

Respectivement. En utilisant la description de Baranowski [II.10, II.11], et les interactions covalentes et de recouvrement des liaisons dans les composés tétraédriques et après simplification, nous obtenons les expressions des constants élastiques suivantes :

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[ 4.37 \frac{\hbar^2}{m} (5+\lambda)(1-\alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} - 0.6075 \left( (1-\alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} \right) \right] \quad (\text{II-21})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[ 4.37 \frac{\hbar^2}{m} (3-\lambda)(1-\alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} + 0.6075 \left( (1-\alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} \right) \right] \quad (\text{II-22})$$

$$C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha+\beta) - 0.136SC_0 - c\xi^2 \quad (\text{II-23})$$

Où  $d = \frac{a\sqrt{3}}{4\lambda}$  est la distance des proches voisins ( $a$  étant le paramètre du réseau) et  $\lambda$  un paramètre constant de valeur 0.738.

$$S = \frac{Z^{+2}}{\varepsilon} \quad (\text{II-24})$$

Et

$$C_0 = \frac{e^2}{d^4} \quad (\text{II-25})$$

$Z^*$  est la charge effective calculée selon la relation suivante :

$$Z^* = e_T^* - \frac{8}{3} \alpha_p (1-\alpha_p^2) \quad (\text{II-26})$$

Et  $e_T^*$  est donnée par la relation suivante :

$$2e_T^* = -\Delta Z + \frac{8\alpha_p}{1+\alpha_p^2} \quad (\text{II-27})$$

Le coefficient C apparaissant dans l'équation est donné par :

$$C = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha+\beta) - 0.266SC_0 \quad (\text{II-28})$$

Les quantités  $\alpha$  et  $\beta$  représentent les forces de constantes. En utilisant la relation entre  $C_{11}$  et  $C_{12}$  donnée dans les équations (III-18) et (III-19) et après simplification, les coefficients  $\alpha$  et  $\beta$  sont donnés par :

$$\alpha = \frac{d}{\sqrt{3}}(C_{11} + 3C_{12}) + \frac{d}{3\sqrt{3}}(1.4735C_0) \quad (\text{II-29})$$

$$\beta = \frac{d}{\sqrt{3}}[(C_{11} - C_{12}) - 1.4735C_0], \quad (\text{II-30})$$

$\xi$  Est le paramètre de Kleinman. Il est relié au tenseur de déformation interne. La relation entre le paramètre  $\xi$  et les constantes élastiques données dans la référence [II.12], et après simplification est :

$$\text{Où} \quad \xi = \frac{(2C_{12} - C')}{(C_{11} + C_{12} - C')} \quad (\text{II-31})$$

$$C' = 0,3145C_0 \quad (\text{II-32})$$

Après remplacement de (III-28) dans (III-29), nous obtenons :

$$\xi = \frac{(2C_{12} - C')}{(C_{11} + C_{12} - C')} \quad (\text{II-33})$$

## II.10 Formules des modules d'élasticité pour des solides polycristallins

Pour obtenir les grandeurs élastiques des solides polycristallins on utilise souvent deux approches de Voigt et de Reuss. Les modules de Voigt correspondent à faire une moyenne sur les  $C_{ij}$  dans toutes les orientations possibles des grains alors que les modules de Reuss correspondent à la moyenne sur la relation inverse en faisant intervenir les compliances. Le module de Voigt repose sur l'hypothèse que la déformation est uniforme dans chaque grain, alors que le module de Reuss repose sur l'hypothèse que la contrainte est uniforme. Hill [II.13] a montré que le module de rigidité  $B$  d'un solide polycristallin est forcément compris entre ces deux limites ; le module de Voigt étant la limite supérieure et le module de Reuss la limite inférieure :

$$B_R \leq B \leq B_V \quad (\text{II-34})$$

Pour calculer les modules de rigidité B et de cisaillement G pour un solide cristallin, on prend la moyenne entre ces deux modules :

$$\left\{ \begin{array}{l} G = \frac{G_V + G_R}{2} \\ B = \frac{B_V + B_R}{2} \end{array} \right. \quad (\text{II-35})$$

Le module de Young et le coefficient de poisson sont calculés par les relations :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y = \frac{9GB}{G+3B} \\ \nu = \frac{1}{2} \left[ \frac{\left(B - \frac{2}{3}G\right)}{B + \frac{1}{3}G} \right] \end{array} \right. \quad (\text{II-36})$$

Pour la symétrie cubique les formules qui nous permet de calculer le module de cisaillement et de rigidité sont données par les relations [II.14] :

$$\left\{ \begin{array}{l} G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \\ G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \end{array} \right. \quad (\text{II-37})$$

Ainsi le module de rigidité est :

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{II-38})$$

### II.10.1 Les conditions de stabilité mécanique

Pour les composés III-V la stabilité mécanique traditionnelle conditionne des constantes élastiques dans les cristaux cubiques est su être [II.2] :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{11} - C_{12} > 0 \\ C_{11} > 0 \\ C_{44} > 0 \\ C_{11} + 2C_{12} > 0 \\ C_{12} < B < C_{11} \end{array} \right. \quad (\text{II-39})$$

### II.10.2 Les facteur anisotropies

Et pour symétrie cubique le factor d'anisotropie [II.2] :

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}} \quad (\text{II-40})$$

### II.11 La température de Debye

La température de Debye est un paramètre fondamental important lié à plusieurs propriétés physiques tel que la chaleur spécifique et la température de fusion et l'énergie de vibration à point zéro.

Nous avons calculé la température de Debye  $\theta_D$  de nos composés PX (B, Al, Ga, In) en utilisant la vitesse du son moyenne  $V_m$ , par le suivant équation [II.2]:

$$\theta_D = \frac{h}{k} \left[ \frac{3n}{4\pi} \left( \frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} v_m \quad (\text{II-41})$$

Où  $\hbar$  est la constante du Planck,  $k$  le constante du Boltzmann,  $N_A$  le nombre de l'Avogadro,  $n$  le nombre d'atomes par unité de la formule,  $M$  la masse moléculaire par unité de la formule, la densité  $\rho = \left( \frac{M}{V} \right)$ , la vitesse moyenne du son donnée par l'équation :

$$v_m = \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (\text{II-42})$$

Où  $V_l$  et  $V_t$ , est la vitesse longitudinale et transversale respectivement, et sont données par les expressions suivantes :

$$v_l = \sqrt{\frac{3B+4G}{3\rho}} \quad \text{et : } v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (\text{II-43})$$

**Références bibliographiques citées dans chapitre II**

- [II.1] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 5th ed., Wiley, New York 1976.
- [II.2] F. Gatt, Tèse de master, Univ Med Khider Biskra (2014).
- [II.3] A. Gicquel, Diamond and Related Materials, 20(7) (2011) 875.
- [II.4] L. Hannachi, Thèse doctorat, Univ Ferhat Abbas Setif (2010).
- [II.5] E. Dieulesaint, D. Royer. Ondes élastiques dans les solides. Application au traitement du signal. Ed. Masson, Paris 6, 1974, 407 p.
- [II.6] P. Pavlov, A. Khokhlov. Physique du solide. Ed. Mir, Moscou, 1989, 416 p.
- [II.7] W.A. Harrison, Electronic Structure and Properties of Solids, Freeman, New York, 1980.
- [II.8] S. Zerroug, F. Ali Sahraoui, N. Bouarissa, Mater. Lett. 60 (2006) 546.
- [II.9] P. Vogl, J. Phys. C11 (1978) 251.
- [II.10] J.M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287.
- [II.11] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. 100 (2006) 41.
- [II.12] N. Bouarissa, R. Bachiri, Physica B 322 (2002) 193.
- [II.13] R. Hill, Proc. Phys. Soc. London 65, 350 (1952).
- [II.14] K. B. Panda and K. S. R. Chandran, Acta Mater 54, 1641 (2006).



**Chapitre III :**  
**Résultats et discussions**

### Chapitre III : Résultats et Discussions

L'effet d'une contrainte sur les propriétés électroniques d'un matériau exige la connaissance des propriétés mécaniques, essentiellement les constantes élastiques.

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats qu'on a obtenu sur les propriétés élastiques des cinq composés binaires à savoir GaAs, GaSb, InAs, InSb, et InP. Dans cette contribution, la connaissance des propriétés élastiques nécessite la connaissance des paramètres du réseau ainsi que les facteurs de formes symétrique et antisymétrique des semi-conducteurs sous investigation, qui sont présentés dans le tableau (III-1).

Composé	Paramètre du réseau (Å) [a]	$V_S(3)$	$V_A(3)$
GaAs	5.653	-0.239833	0.05
GaSb	6.118	-0.191206	0.03
InAs	6.058	-0.217669	0.039485
InSb	6.49	-0.201294	0.03
InP	5.869	-0.213870	0.06

[a] Reference [III.1].

**Tableau III-1 :** Paramètre du réseau et facteurs de forme symétrique  $V_S(3)$  et antisymétrique  $V_A(3)$  des composés binaire sous investigation [III.1].

Nous avons utilisé la méthode EPM combinée avec le modèle de Harrison en suivant l'approche de Bouarissa [III.2].

Nos résultats concernant  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  pour tous les semi-conducteurs d'intérêt sont présentés dans le tableau (III-2), qui contient également les données expérimentales disponibles pour la comparaison. En générale, il y a un bon accord entre nos résultats et ceux de l'expérience [III.3].

Composé	$C_{11}$ Théor	$C_{11}$ Expér	$\frac{\Delta C_{11}}{C_{11}}(\%)$	$C_{12}$ théor	$C_{12}$ Expér	$\frac{\Delta C_{12}}{C_{12}}(\%)$	$C_{44}$ Théor	$C_{44}$ Expér	$\frac{\Delta C_{44}}{C_{44}}(\%)$
GaAs	13.765	11.88	-15.867%	5.924	5.38	-10.111%	5.568	5.94	6.263%
GaSb	9.551	8.838	-8.067 %	4.104	4.027	-1.912 %	3.865	4.320	10.532 %
InAs	9.903	8.329	-18.898%	4.258	4.526	5.921 %	4.007	3.959	-1.212 %
InSb	7.136	6.608	-7.990 %	3.066	3.531	13.169 %	2.888	3.027	4.592 %
InP	10.776	10.22	-5.440 %	4.653	5.73	18.796 %	4.353	4.42	1.516 %

**Tableau III-2** : Constantes élastiques ( $10^{11}$  dyn/cm<sup>2</sup>) pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

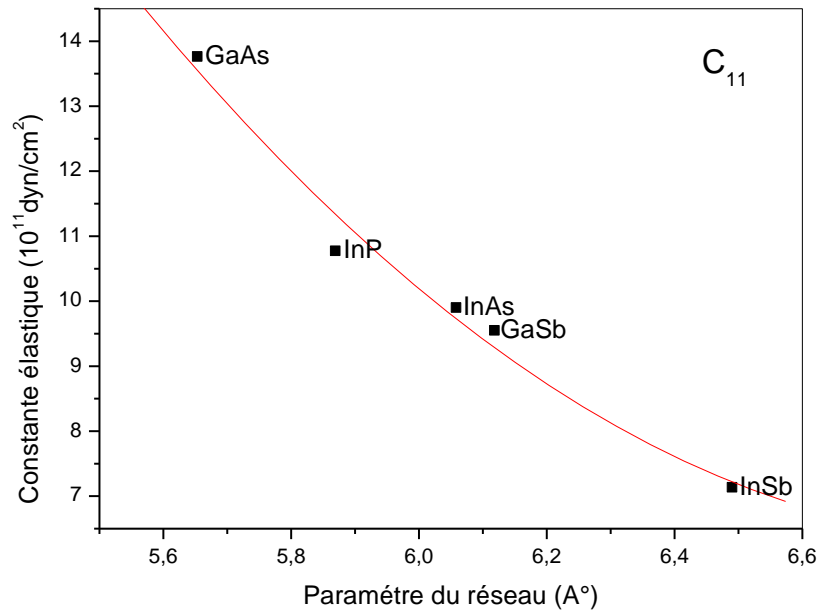
### III.1 Constantes élastiques

Les Figure (III-1) - (III-2) et (III-3) représentent les constantes élastiques,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  respectivement pour les composés binaire GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP en fonction du paramètre du réseau (a). On remarque que toutes les constantes élastiques d'intérêt diminuent d'une manière monotone avec l'augmentation de la constante du réseau a. Qualitativement, ces constantes élastiques montrent un comportement similaire. Ces courbes sont interpolées par les équations suivantes :

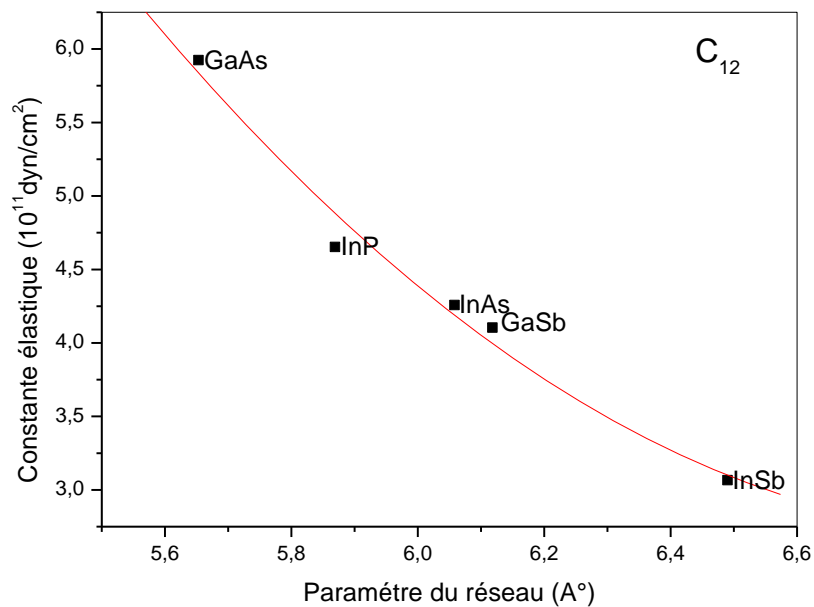
$$C_{11} = 4.32a^2 - 60.04a + 214.86 \quad (\text{III-1})$$

$$C_{12} = 1.85a^2 - 25.78a + 92.32 \quad (\text{III-2})$$

$$C_{44} = 1.75a^2 - 24.33a + 87.03 \quad (\text{III-3})$$

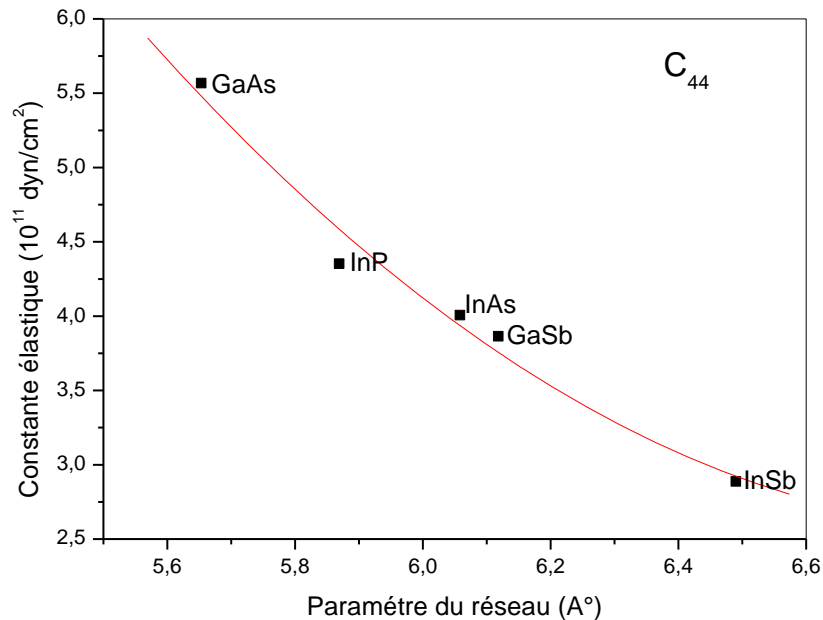


**Figure III-1 :** Variation de la constante élastique  $C_{11}$  en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.



**Figure III-2 :** Variation de la constante élastique  $C_{12}$  en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

A partir de ces équation, on déduit que les paramétré de courbure (termes quadratiques), sont significatifs et par conséquent la variation de  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  en fonction de paramètre du réseau exhibait comportent non linéaire.



**Figure III-3 :** Variation de la constante élastique  $C_{44}$  en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

### III.2 Facteur anisotropies

L'anisotropie est la propriété d'être dépendant de la direction. Quelque chose d'anisotropie pourra présenter différents caractéristiques selon son orientation. Dans ce présent travail, nous avons calculé le facteur d'anisotropie (A) en utilisant la relation [III.4].

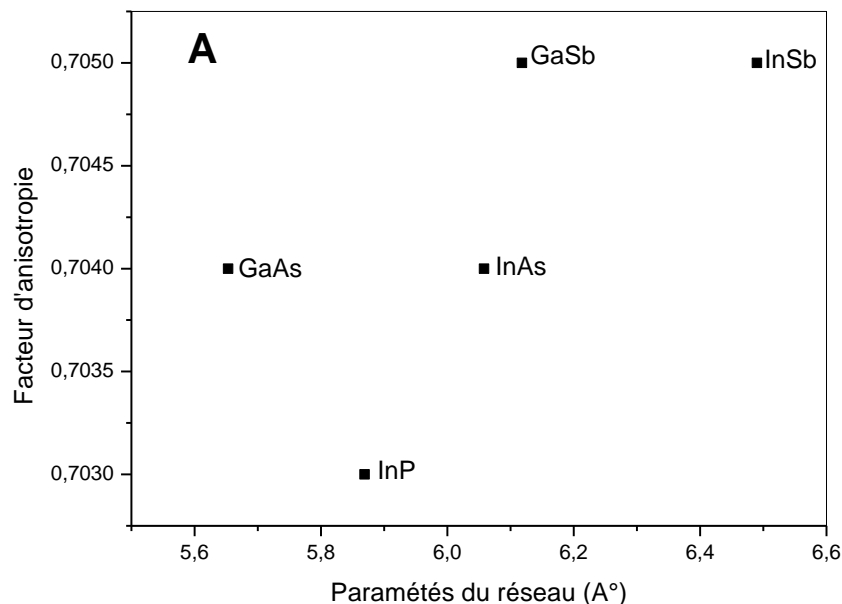
$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (\text{III-4})$$

Nos résultats sont montrés dans le tableau (III-3) et comparés avec ceux de l'expérience tirés de la référence [III.5].

Composé	A(théor)	A(Exp) [Adachi]	$\frac{\Delta A}{A}(\%)$
GaAs	0.704	0.547	- 28.70 %
GaSb	0.705	0.557	- 26.57 %
InAs	0.704	0.480	- 46.67 %
InSb	0.705	0.508	- 38.78 %
InP	0.703	0.508	- 38.39 %

**Tableau III-3 :** Facteur d'anisotropie pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

La déviation entre nos résultat et ceux de l'expérience est dans l'intervalle 26-46 %. Nous voyons que les valeurs de A sont tout différentes de un, ce qui indique que les composés GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP sont des matériaux anisotropes élastiquement.



**Figure III-4 :** Variation du facteur anisotropie en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

Figure III-4 représente la variation du facteur anisotropie en fonction de paramètre du réseau des éléments sous investigation. Nous remarquons que le facteur d'anisotropie varie d'une façon non monotone en fonction de paramétré du réseau, ce qui ne rend pas possible de le présenter sous forme d'un polynomiale. Néanmoins, on peut monter que la valeur du facteur d'anisotropie des semi-conducteurs étudiés est presque la même pour ces semi-conducteurs.

### III.3 Le paramètre de Kleinman

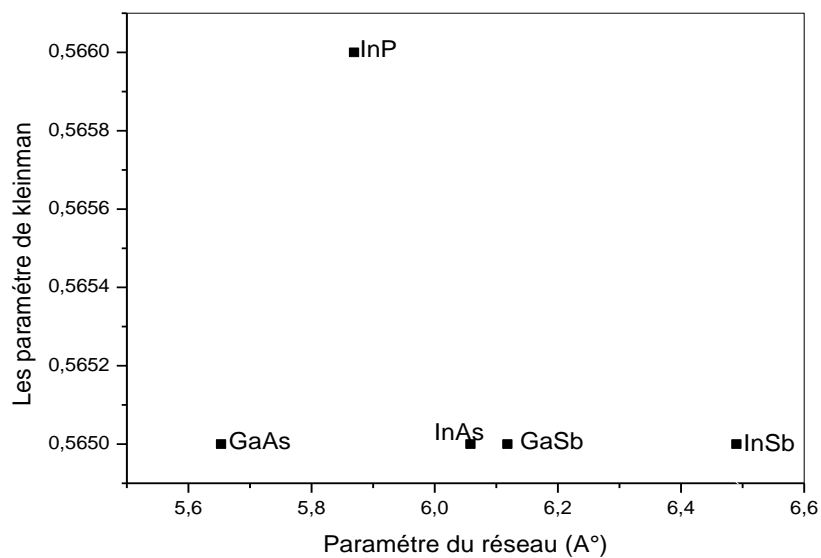
Le paramètre de Kleinman indique la position relative du cation et de l'anion quand le réseau cristallin est soumis à une contrainte à volume constant. Dans ce présent travail, le paramètre de Kleinman ( $\xi$ ) a été calculé pour les composés semi-conducteurs d'intérêt en utilisant l'expression [III.6].

$$\xi = \frac{C_{11} + 8C_{12}}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (\text{III-5})$$

Nos résultats sont présentés dans le tableau (III-4) et comparés aux valeurs expérimentales [III.5]. Nous trouvons aussi un bon accord.

Composé	$\xi$ (theor)	$\xi$ (Exp)[Adachi]	$\frac{\Delta\xi}{\xi}$ (%)
GaAs	0.565	0.585	3.419 %
GaSb	0.565	0.587	3.748 %
InAs	0.565	0.661	14.523 %
InSb	0.565	0.654	13.609 %
InP	0.566	0.675	16.148 %

**Tableau III-4 :** Paramètres de Kleinman pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.



**Figure III-5 :** Variation du paramètre de Kleinman en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

Figure III-5 représente la variation du paramètre de Kleinman en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

On remarque que le paramètre de Kleinman reste presque constant pour tous les éléments étudiés.

#### III.4 Module de cisaillement

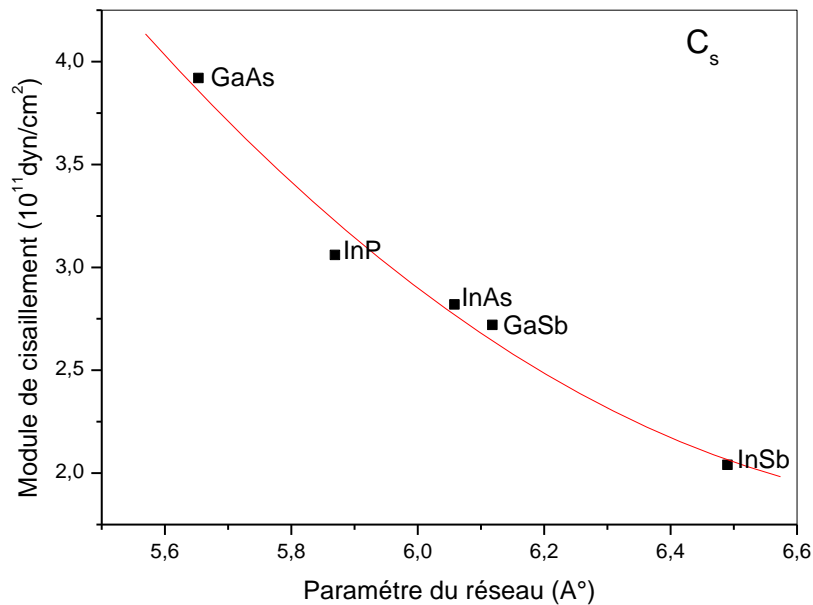
Le module de cisaillement  $C_s$  est une grandeur physique intrinsèque à chaque matériau et qui intervient dans la caractérisation des déformations causées par des efforts de cisaillement.  $C_s$  Est défini comme étant le rapport de compression de cisaillement au contrainte de cisaillement. Il décrit la réponse du matériau aux contraintes de cisaillement et il est relie aux constantes élastiques par l'équation [III.7].

$$c_s = \frac{(C_{11}-C_{12})}{2} \quad \text{(III-6)}$$

En utilisant l'équation (III- 6), on a déterminé les valeurs de  $c_s$  pour chaque composé binaire III-V d'intérêt. Nos résultats sont montrés dans le tableau (III-5). Un raisonnable accord peut être observé entre nos résultats et ceux de l'expérience reportés par Adachi [III.5].

Composé	$C_s(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$ (theor)	$C_s(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$ (Exp)[Adachi]	$\frac{\Delta C_s}{C_s}(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)(\%)$
GaAs	3.92	3.25	- 20.62 %
GaSb	2.72	2.41	- 12.86 %
InAs	2.82	1.9	- 48.42 %
InSb	2.04	1.54	- 32.47 %
InP	3.06	2.25	- 36 %

**Tableau III-5 :** Module de cisaillement pour composé binaire GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.



**Figure III-6 :** Variation du module de cisaillement en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.

Figure III-6 représente la variation du module de cisaillement en fonction de paramètre du réseau des éléments III-V d'intérêt. On note que le module de cisaillement diminue lorsque on augmente le paramètre du réseau.

Il est aussi à noter que le GaAs est l'élément le plus rigide parmi ceux étudiés dans ce travail. Alors que InSb est l'élément le moins rigide. Donc en allant de GaAs à InSb à travers InP, InAs, GaSb la rigidité diminue :

La courbe est interpolée par l'expression suivante :

$$C_s = 4.01a^2 - 55.81a + 199.78 \quad (\text{III-7})$$

On remarque que le coefficient de courbure est important ce qui indique que la variation du module de cisaillement est non linéaire.

### III.5 Module de compression et compressibilité

La compressibilité est une caractéristique d'un corps, définissant sa variation relative du volume sous l'effet pression appliquée.

Le module de compressibilité ( $B_s$ ) est définie comme étant le rapport du changement de la pression agissante sur un volume au changement de la fraction du volume. Il décrit la réponse du matériau à une pression uniforme. Elle est reliée aux constantes élastiques par la relation [III.7].

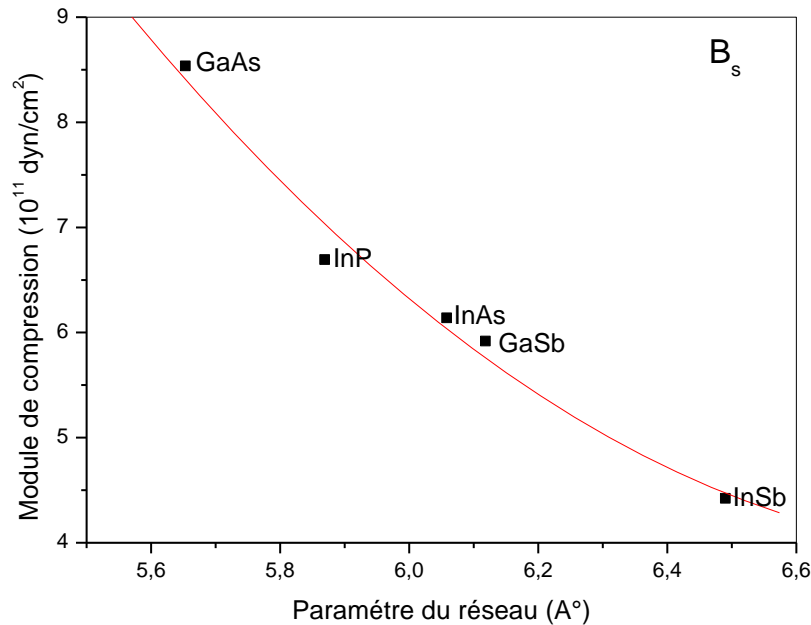
$$B_s = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{III-8})$$

En utilisant l'équation (III-8), on a déterminé les valeurs de  $B_s$  pour les composé binaire III-V d'intérêt.

Nos résultats concernant le module compressibilité sont montrés sur le tableau (III-6). Nous avons présentés les résultats expérimentaux reportés par Adachi [III.5] afin de comparer nos résultats théoriques avec ceux de l'expérience. On note que nos résultats sont en bon accord avec ceux de l'expérience, ce qui donne encore une fois une crédibilité à notre modèle utilisé dans ce travail.

Material	$B_s(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$ (Théor)	$B_s(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$ (Exp)	$\frac{\Delta B_s}{B_s} (10^{11} \text{ dyn/cm}^2)(\%)$
GaAs	8.537	7.547	-13.118 %
GaSb	5.919	5.631	-5.115 %
InAs	6.139	5.794	-5.954 %
InSb	4.422	4.557	2.962 %
InP	6.694	7.227	7.375 %

**Tableau III-6 :** Module de compression pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.



**Figure III-7 :** Variation du module de compression en fonction de paramètre du réseau des éléments III-V d'intérêt.

Figure III-7 représente la variation du module de compression en fonction de paramètre du réseau des éléments III-V d'intérêt.

On remarque que le module de compression diminue lorsque le paramètre du réseau augmente en allant de GaAs à l'InSb. Cela veut dire que le GaAs est l'élément le plus robuste parmi les éléments d'intérêt, ce qui implique que GaAs est l'élément le plus résistant aux déformations élastique, comparativement aux éléments étudiés. La courbe est interpolée par la relation suivante :

$$B_s = 2.68a^2 - 37.19a + 133.14 \quad (\text{III-9})$$

On note d'après l'équation (III-9) que le paramètre de courbure est important ce qui suggère que le module de compression varie d'une façon non linéaire avec le paramètre du réseau.

### III.7 Les conditions de stabilité mécanique

Nous avons aussi vérifié les conditions de stabilité mécanique des semi-conducteurs étudiés. A cet effet nous avons de tester nos résultats concernant les constantes élastiques, on appliquant les critères de stabilité pour un système cubique, comme soit :

Pour GaAs :

$$\begin{array}{l}
 C_{11}-C_{12} >0 \\
 C_{11} >0 \\
 C_{44} >0 \\
 C_{11}+2C_{12} >0 \\
 C_{12} <B < C_{11}
 \end{array}
 \begin{array}{l}
 7.841 >0 \\
 13.765 >0 \\
 5.568 > 0 \\
 25.613 >0 \\
 5.924 < 8.537 < 13.765
 \end{array}$$

On remarque que tous les critères de stabilité mécanique sont vérifiés.

Pour GaSb :

$$\begin{array}{l}
 C_{11}-C_{12} >0 \\
 C_{11} >0 \\
 C_{44} >0 \\
 C_{11}+2C_{12} >0 \\
 C_{12} <B < C_{11}
 \end{array}
 \begin{array}{l}
 5.447 >0 \\
 9.551 >0 \\
 3.865 > 0 \\
 17.759 >0 \\
 4.104 < 5.919 < 9.551
 \end{array}$$

On remarque que tous les critères de stabilité mécanique sont vérifiés.

Pour InAs :

$$\left[ \begin{array}{l} C_{11}-C_{12} >0 \\ C_{11} >0 \\ C_{44} >0 \\ C_{11}+2C_{12} >0 \\ C_{12} <B < C_{11} \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} 5.645 >0 \\ 9.903 >0 \\ 4.007 > 0 \\ 18.419 >0 \\ 4.258 < 6.139 <9.903 \end{array} \right.$$

On remarque que tous les critères de stabilité mécanique sont vérifiés.

Pour InSb :

$$\left[ \begin{array}{l} C_{11}-C_{12} >0 \\ C_{11} >0 \\ C_{44} >0 \\ C_{11}+2C_{12} >0 \\ C_{12} <B < C_{11} \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} 4.07 >0 \\ 7.136 >0 \\ 2.888 > 0 \\ 13.268 >0 \\ 3.066 < 4.422 <7.136 \end{array} \right.$$

On remarque que tous les critères de stabilité mécanique sont vérifiés.

Pour InP :

$$\left[ \begin{array}{l} C_{11}-C_{12} >0 \\ C_{11} >0 \\ C_{44} >0 \\ C_{11}+2C_{12} >0 \\ C_{12} <B < C_{11} \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} 6.123 >0 \\ 10.776 >0 \\ 4.353 > 0 \\ 20.082 >0 \\ 4.653 < 6.694 <10.776 \end{array} \right.$$

On remarque que tous les critères de stabilité mécanique sont vérifiés.

Danc on peut conclure que tous les semi-conducteurs étudiés sont stable mécaniquement.

**Références bibliographiques citées dans chapitre III**

- [III.1] F. Mezrag, Thèse de magister, Univ Mohamed Boudiaf de M'sila (2003).
- [III.2] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys.100 (2006) 41.
- [III.3] S. Adachi, Propertier of Semiconductors Alloys Group IV.III-V and II-VI Semiconductors, Wiley Series in Materials for Electronic & Optoelectronic Applications (2009).
- [III.4] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), Hand Book Series on Semiconductor Parameters, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.
- [III.5] S. Adachi, Propertier of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors, Wiley, Chichester, 2005.
- [III.6] N. Bouarissa\*, R. Bachiri Physica B 322 (2002) 193
- [III.7] L. Hannachi, Thèse doctorat, Univ Ferhat Abbas Setif (2010).



**Conclusion générales**

## Conclusion générales

En conclusion, dans ce présent travail nous avons étudié les propriétés élastiques des semi-conducteurs GaAs, GaSb, InAs, InSb, et InP en utilisant l'approche de Bouarissa. Nous avons déterminé les constantes élastiques, Nous avons calculé aussi les modules d'élasticité ; facteur d'anisotropie, le paramètre de Kleinman, module de cisaillement, et module de compression.

Nos résultats sont interpolés pour une interpolation polynomiale d'ordre deux, afin de trouver des équations qui nous permettent de calculer les constantes élastiques et mécanique des matériaux étudiés à partir de leur paramètre du réseau.

Nos résultats sont comparés avec ceux de la littérature dans la mesure du possible. Généralement, un bon accord a été noté entre nos résultats et ceux de l'expérience ce qui suggère la validité de notre modèle pour le calcul des constantes mécaniques.

Nos résultats ont montré que tous les constantes élastiques d'intérêt diminuent d'une manière monotone avec l'augmentation de la constante du réseau  $a$ . Qualitativement, ces constantes élastiques de cette équation, on déduit que le paramètre de courbure (termes quadratiques), sont significatifs et par conséquent un matériau comporte un comportement non linéaire.

Nos résultats ont montré aussi que le GaAs est le semi-conducteur le plus stable parmi ceux étudiés.

Les critères de stabilité mécanique ont montré que tous les semi-conducteurs d'intérêt sont stables mécaniquement.



# **Tables des illustrations**

(Figures et tableaux)

## Liste des figures et des tableaux

### Figures :

<b>Figure I-1 :</b> L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium).....	4
<b>Figure I-2 :</b> Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.....	5
<b>Figure I-3 :</b> Les structures des bandes énergétiques : Métal, semi-conducteur, isolant.....	6
<b>Figure 1-4 :</b> Répartition des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence à la température $T$ .....	7
<b>Figure I-5 :</b> Le bilan électronique pour semi-conducteur intrinsèque.....	8
<b>Figure 1-6 :</b> Le bilan électronique pour un semi-conducteur extrinsèque de type N.....	9
<b>Figure 1-6 :</b> Le bilan électronique pour un semi-conducteur extrinsèque de type P.....	10
<b>Figure II-1 :</b> Les composantes du tenseur des contraintes.....	17
<b>Figure III-1 :</b> Variation de la constante élastique $C_{11}$ en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....	29
<b>Figure III-2 :</b> Variation de la constante élastique $C_{12}$ en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....	29
<b>Figure III-3 :</b> Variation de la constante élastique $C_{44}$ en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....	30
<b>Figure III-4 :</b> Variation du facteur anisotropie en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....	31
<b>Figure III-5 :</b> Variation du paramètre de Kleinman en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....	32
<b>Figure III-6 :</b> Variation du module de cisaillement en fonction de paramètre du réseau des éléments GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....	34

**Figure III-7 :** Variation du module de compression en fonction de paramètre du réseau des éléments III-V d'intérêt.....36

**Tableaux :**

**Tableau I-1 :** La liste de certains semi-conducteurs.....11

**Tableau I-2 :** Les groupes de semi-conducteurs.....12

**Tableau II-1 :** Le nombre des constantes élastiques indépendant pour différents structure cristalline avec leur groupe ponctuel.....19

**Tableau III-1 :** Paramètre du réseau et facteurs de forme symétrique  $V_S(1)$  et antisymétrique  $V_A(2)$  des composés binaire sous investigation.....27

**Tableau III-2 :** Constantes élastiques ( $10^{11} \text{dyn/cm}^2$ ) pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP..28

**Tableau III-3 :** Facteur d'anisotropie pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....31

**Tableau III-4 :** Paramètres de Kleinman pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....32

**Tableau III-5 :** Module de cisaillement pour composé binaire GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....33

**Tableau III-6 :** Module de compression pour GaAs, GaSb, InAs, InSb et InP.....35

## ملخص :

إن أنصاف النواقل (III-V) مثل المركبات GaAs و GaSb و InAs و InSb و InP لها فعالية جد متميزة عند استخدامها في كهروضوئية وفي تطبيقات اخرى لتطوير تكنولوجيات جديدة. إن الهدف من هذه الدراسة هي البحث عن الخواص المرورية والميكانيكية للمركبات المذكورة أعلاه.

لقد أظهرت النتائج التي توصلنا إليها ان ثابت المرورية يتناقص بطريقة رتيبة وغير خطية مع الزيادة في ثابت الشبكة. ولقد وجدنا ان الغاليوم هو شبه موصل الاكثر صلابة من بين العناصر التي تم دراستها. وقد اظهرت معايير الاستقرار الميكانيكية أن جميع أشباه الموصلات مستقرة ميكانيكيا.

**الكلمات المفتاحية:** خصائص المرورية ، اشباه النواقل 3-5 ، استقرار ميكانيكي ، خصائص ميكانيكية .

## Résumé :

Les semi-conducteurs III-V, tels que GaAs, GaSb, InAs, InSb et de InP, présentent des performances exceptionnelles lorsqu'ils sont utilisés dans des dispositifs optoelectroniques et d'autres applications dans le développement de nouvelles technologies. L'objectif de cette thèse est d'étudier les propriétés élastiques, et mécaniques de ces composés mentionnés ci-dessus.

Nos résultats ont montré que toute les constantes élastiques d'intérêt diminuent d'une manière monotone avec l'augmentation de la constante du réseau on exhibait un comportement non linéaire. Nos résultats ont montré aussi que la GaAs est le semi-conducteur le plus rigide parmi ceux étudiés. Les critères de stabilité mécaniques ont montrés que tous les semi-conducteurs d'intérêt sont stable mécaniquement.

**Mots clés :** propriétés élastiques ; semi-conducteurs III-V ; stabilité mécanique ; paramétrés mécaniques.

## Abstract :

III-V semiconductors, such as GaAs, GaSb, InAs, InSb and InP compounds, have exceptional performance when used in optoelectronic devices and other applications in developing new technologies. The aim of this thesis is to investigate the elastic and mechanical properties of the above compounds. Our results showed that all the elastic constants of interest decrease monotonously and non-linearly with the increase of the lattice constant.

Our results also showed that the GaAs is the robuste semiconductor among those studied here. Mechanical stability criteria have shown that all the semiconductors of interest are mechanically stable.

**Key-words :** elastic properties, III-V semiconductors, mechanical stability, mechanical parameters.