

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° :



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique Appliquée :
Physique des matériaux intelligents

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par : Refice Fatima Zohra

Intitulé

**Etude théorique des propriétés électroniques
optiques et diélectriques des alliages
semi-conducteurs**

Soutenu le 23 / 05 / 2017 devant le jury composé de :

Pr N. BOUARISSA	Université de M'sila	Président
Dr F. MEZRAG	Université de M'sila	Rapporteur
Pr S. SAIB	Université de M'sila	Examinatrice

Année universitaire : 2016 /2017

REMERCIEMENTS

*J'adresse mes vifs remerciements à mon encadreur Mme **Mezrag Fadila** pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet et pour les précieux conseils qu'elle m'a donné, et pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs.*

*Je tiens à remercier, le président de jury, Professeur **Nadir Bouarissa** et l'examineur Mme **Saib Salima**, 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.

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

Dédicace

Je dédie ce travail :

A mon père et A ma mère

A mes frères et A mes sœurs

A mes neveux Sohaib et Abdo

A ma nièce Ferdows

A Amine

A toute la famille Refice

A tous mes amis

A tous ceux que j'aime

Fatima Zahra

Tables des matières

Remerciement.....	i
Dédicace.....	ii
Tables des matières.....	iii
Introduction Générale.....	1

Chapitre I : Généralités sur les semi-conducteurs

I-1 Introduction.....	4
I-2 Définition d'un semi-conducteur.....	4
I-3 La notion de bandes d'énergie.....	5
I-4 Bande interdite (gap énergétique).....	6
I-4-1 Gap direct et gap indirect.....	7
I-5 La conduction électrique des électrons et des trous.....	8
I-6 Différentes types des semi-conducteurs.....	10
I-6-1 Semi-conducteur intrinsèque.....	10
I-6-2 Semi-conducteur extrinsèque.....	10
I-6-2-1 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N.....	10
I-6-2-2 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P.....	10
I-7 Les matériaux semi-conducteurs.....	11
I-7-1 Les semi-conducteurs par groupe.....	12
I-8 Conclusion.....	14
Références bibliographiques citées dans le chapitre I.....	15

Chapitre II: Les propriétés Physiques des matériaux semi-conducteurs

II-1 Introduction.....	16
II-2 Propriétés structurales.....	16
II-2-1 Structure Zinc Blende.....	16
II-2-2 La constante de maille.....	18
II-3 Propriétés électroniques.....	19
II-3-1 Structure de bande d'énergie électronique.....	20
II-4 Propriétés optiques.....	21
II-4-1 Interaction rayonnement matière.....	22
II-4-1-1 Absorption fondamentale.....	22

II-4-1-2 Emission spontanée.....	22
II-4-1-3 Emission stimulée.....	23
II-4-2 La réflexion optique.....	23
II-4-3 L'indice de réfraction.....	24
II-5 Propriétés diélectriques.....	25
II-5-1 La constante diélectrique.....	25
II-5-2 La relation entre l'indice de réfraction et la constante diélectrique.....	26
II-6 Conclusion.....	27
Références bibliographiques citées dans le chapitre II.....	28

Chapitre III : Théorie des alliages semi-conducteurs et méthode pseudo-potentiel

III-1 Introduction.....	29
III-2 Les alliages semi-conducteurs.....	29
III-3 Classification des alliages semi-conducteurs.....	29
III-4 L'approximation du cristal virtuel (VCA).....	31
III-4-1 Le cas d'un alliage ternaire.....	31
III-4-1-1 Le paramètre de maille des alliages ternaire.....	31
III-4-2 Le cas d'un alliage quaternaire.....	32
III-4-2-1 Constante du réseau de l'alliage quaternaire.....	32
III-5 Méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs...32	32
III-5-1 La méthode de pseudopotentiel (P.M).....	32
III-5-2 Le formalisme mathématique du pseudo-potentiel.....	33
III-5-3 La méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M).....	35
III-5-3-1 L'approximation empirique locale.....	35
III-6 Conclusion.....	37
Références bibliographiques citées dans le chapitre III.....	39

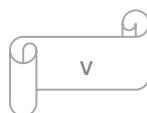
Chapitre IV : Résultats et discussions

IV-I Introduction.....	40
IV-2 Etude des propriétés électroniques.....	40
IV-2-1 L'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$	41
IV-2-1-1 Gap énergétique.....	43
IV-2-1-1-1 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$	43

IV-2-1-1-2 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$	45
IV-3 Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction).....	48
IV-3-1 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$	49
IV-3-2 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$	52
IV-4 Etude des propriétés diélectriques.....	54
IV-4-1 Constante diélectrique de haute fréquence.....	54
IV-4-1-1 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$	54
IV-4-1-2 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$	56
IV-4-2 Le constant diélectrique statique.....	58
IV-4-2-1 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$	58
IV-4-2-2 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$	60
IV-5 Conclusion.....	65
Références bibliographiques citées dans le chapitre IV.....	66
Conclusion Générale	67

Listes des figures et Listes des tableaux

Résumé



Introduction générale

La science des matériaux comporte un grand nombre de domaines d'applications importants, elle constitue à ce titre un domaine très actif de la recherche et technologie modernes.

Un intérêt tout à fait particulier a depuis longtemps déjà été porté aux semi-conducteurs qui sont rappelés à la base de nombreuses technologies de pointe en électronique, en optique, optronique, électronique quantique, et énergie solaire. De ce fait leur rôle dans les futures industries ne cessera de prendre de plus en plus d'importance. [1]

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. [2]

Les propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs peuvent être améliorées par l'emploi des alliages quaternaires semi-conducteurs de la forme $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$, qui présentent l'avantage de contrôler indépendamment le paramètre cristallin et la largeur de la bande interdite.

Néanmoins, les paramètres optoélectroniques des dispositifs dans de tels systèmes quaternaires ont été entravés par un manque de connaissance des paramètres du matériau utilisé. En fait, le développement de nouveaux dispositifs électroniques et optoélectroniques exigent une connaissance profonde des propriétés des matériaux utilisés, pour bien évaluer leur domaine d'application. [3]

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

Quoique plusieurs méthodes théoriques peuvent être utilisées pour calculer la structure de bandes, la méthode de pseudo-potentiel empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel est la méthode la plus simple et rapide, ainsi elle donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience.

Notre travail de mémoire est consacré à l'étude des propriétés électronique, optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ du type III-V cristallisant dans la structure zinc-blende, déposés sur deux substrats InP et GaAs. Le but du travail est l'investigation des paramètres de la structure de bandes électronique, à savoir les gaps énergétiques, l'indice de réfraction, la constante diélectrique statique et la constante diélectrique de haute- fréquence.

Notre travail se base sur la méthode du pseudo-potentiel empirique local couplée avec l'approximation du cristal virtuel VCA.

Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électronique, diélectrique et optique des solides.

Pour ce faire, nous avons subdivisé ce manuscrit en quatre chapitres :

Après une introduction générale, dans le premier chapitre nous essayerons de donner quelques généralités sur les matériaux semi-conducteurs.

Le deuxième chapitre englobe un rappel des principales propriétés physiques des semi-conducteurs, notamment, les propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs.

Dans le troisième chapitre sera présentées la théorie des alliages semi-conducteurs et la méthode du pseudo-potentiel.

Le quatrième chapitre représente la partie pratique de ce travail, nous exposerons nos résultats correspondant aux propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, leur interprétation et leur comparaison aux travaux théoriques et expérimentaux.

Finalement, nous terminerons par une conclusion générale.

Références bibliographiques citées dans l'introduction générale

- [1] A. Zaoui. Thèse de magister. Univ Djilali Liabes, Sidi-Bel-Abbes (2000).
- [2] Benatmane Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V. Mémoire de magister. Université de Batna, (2011).
- [3] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).

Chapitre I : Généralités sur les semi-conducteurs

I-1 Introduction

Les matériaux sont présentés dans de multiples domaines et prennent une place plus importante dans le système que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour. Elles sont subdivisées en trois classes : conducteurs, semi-conducteurs et isolants [1].

Les trois types des matériaux contiennent une bande basse en énergie appelée bande de valence et une bande haute d'énergie appelée bande de conduction, la différence entre les trois types des matériaux est la distance qui sépare la bande de valence de la bande de conduction ou ce qu'on appelle la bande interdite [2].

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, 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, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs [3].

Ces matériaux ont un champ d'application très élargi, ils sont actuellement utilisés dans plusieurs composants électroniques très importants.

Pour connaître l'importance de ces matériaux, nous allons rappeler quelques notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs.

Dans ce chapitre nous allons donner une définition de semi-conducteur et la notion de bandes d'énergie, ainsi que la conduction électrique dans les semi-conducteurs, puis les différents types de semi-conducteurs et leur structure cristalline.

On le terminera par une conclusion.

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 très sensiblement sous l'influence des facteurs extérieurs de l'environnement (température, pression...), de la présence des impuretés (dopage, défauts du réseau), et de la lumière [4].

I-3 La notion de bandes d'énergie

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

Dans ce modèle les énergies possibles pour un électron dans un solide forment ce qu'on appelle des bandes permises, séparées par d'autres bandes appelées bandes d'énergies interdites ou gap. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

Les bandes de faible énergie sont complètement occupées; ce sont des bandes dites de valence, par contre les bandes de haute énergie sont vides ; sont appelées bandes de conduction [5].

On distingue alors :

- La bande de conduction BC
- La bande de valence BV
- La bande interdite BI

La structure de bandes dans un semi-conducteur est représentée dans la figure suivante :

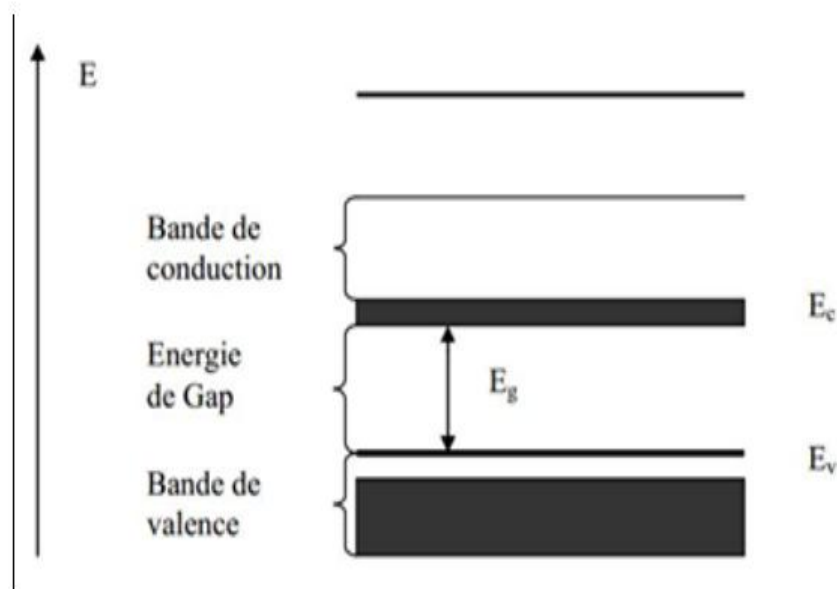


Figure I-1) Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs [6].

I-4 Bande interdite (gap énergétique)

Dans un semi-conducteur comme dans un isolant, l'écart énergétique entre la bande de conduction et la bande de valence est appelé largeur de bande interdite, 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 [7].

Une structure de bandes comparative des trois types de matériaux métal, semi-conducteur et isolant est représentée sur la figure (I-2).

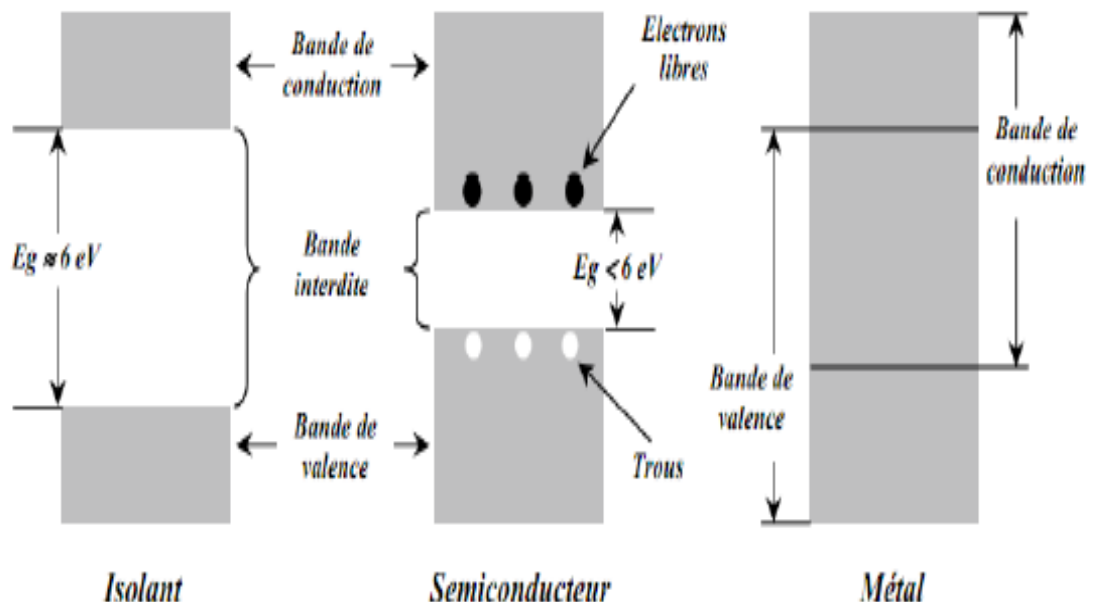


Figure I-2) Les structures des bandes énergétique: Métal, semi-conducteur, isolant [8].

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

Tableau I-1) Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique [9].

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

I-4-1 Gap direct et gap indirect

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde k .

Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [10].

Les structures de bandes représentées sur la figure (I-3) font apparaître deux types fondamentaux de semi-conducteurs :

Les semi-conducteurs à gap direct : si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k .

Les semi-conducteurs à gap indirect : si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k .

La distinction entre les semi-conducteur à gap direct et indirect est très importante, notamment, dans les processus radiatifs, les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [1].

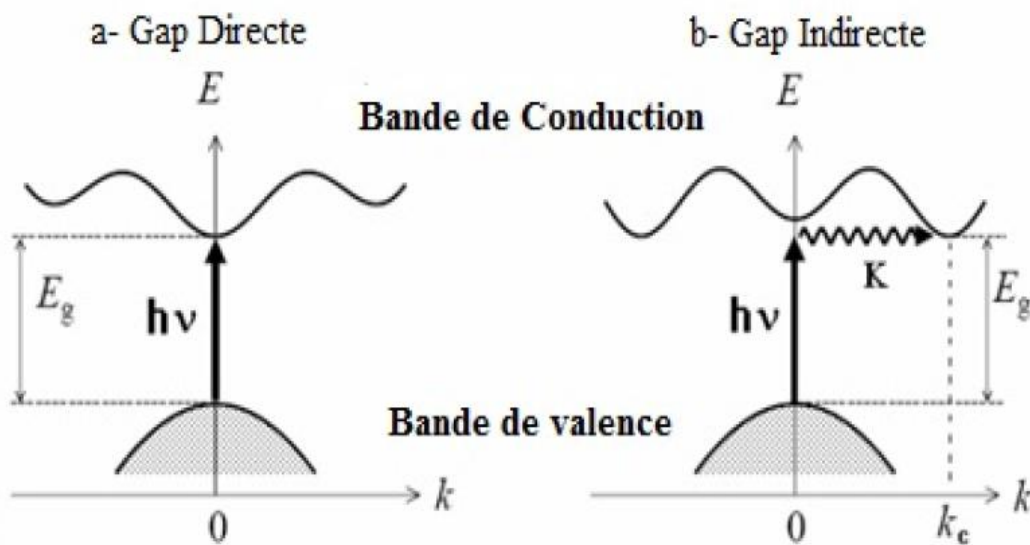


Figure I-3) Les transitions optiques directes et indirectes [3].

I-5 La conduction électrique des électrons et des trous

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

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

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

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

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

- Les électrons, qui se trouvent dans la bande de conduction.
- Les états inoccupés ou trous, présent dans la bande de valence [9].

La figure (I-4) représente la transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction.

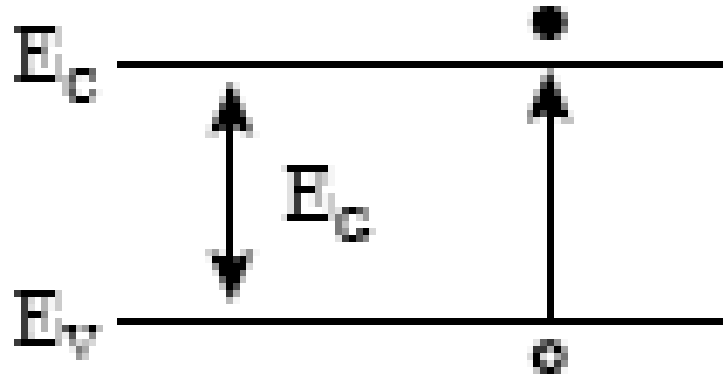


Figure I-4) La transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction

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

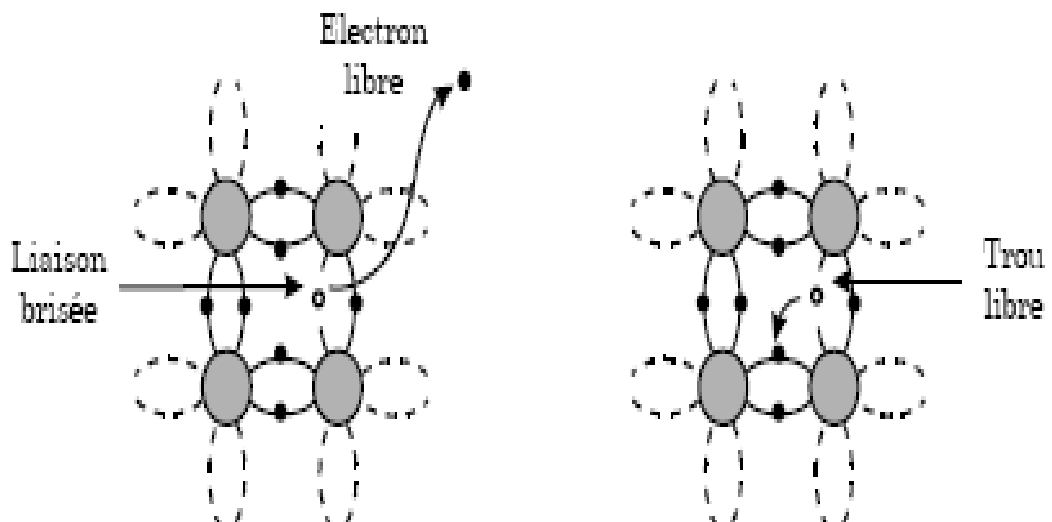


Figure I-5) Apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente.

I-6 Différentes types des semi-conducteurs

I-6-1 Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour 10^{13} atomes de l'élément semi-conducteur).

I-6-2 Semi-conducteur extrinsèque

Un semi-conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semi-conducteur intrinsèque (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semi-conducteur). Selon la nature des impuretés il existe deux types des semi-conducteurs: type n et type p.

I-6-2-1 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N

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

I-6-2-2 Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P

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

Les figures (I-6 et I-7) décrivent les deux types de dopage dans le cas de silicium.

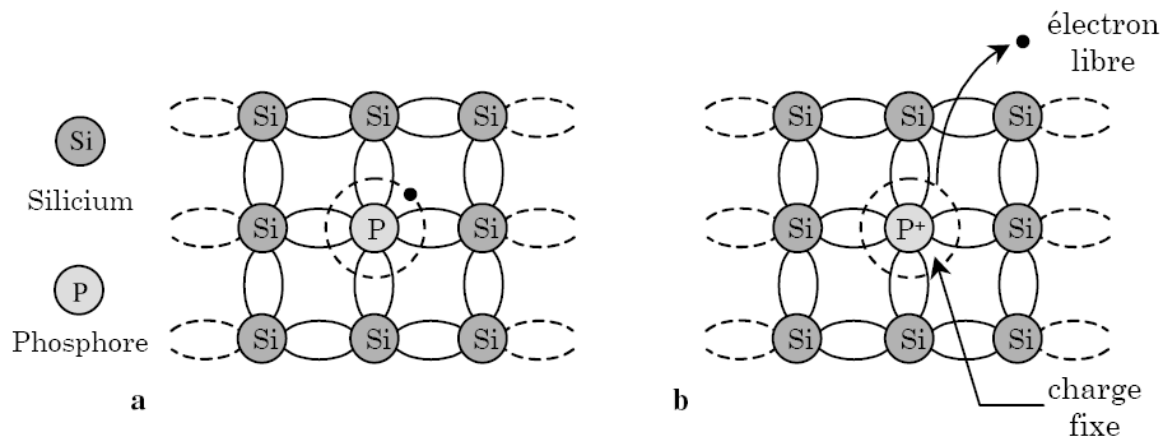


Figure I-6) Silicium dopé au Phosphore (dopage n) : a $T = 0K$ et b $T \neq 0$

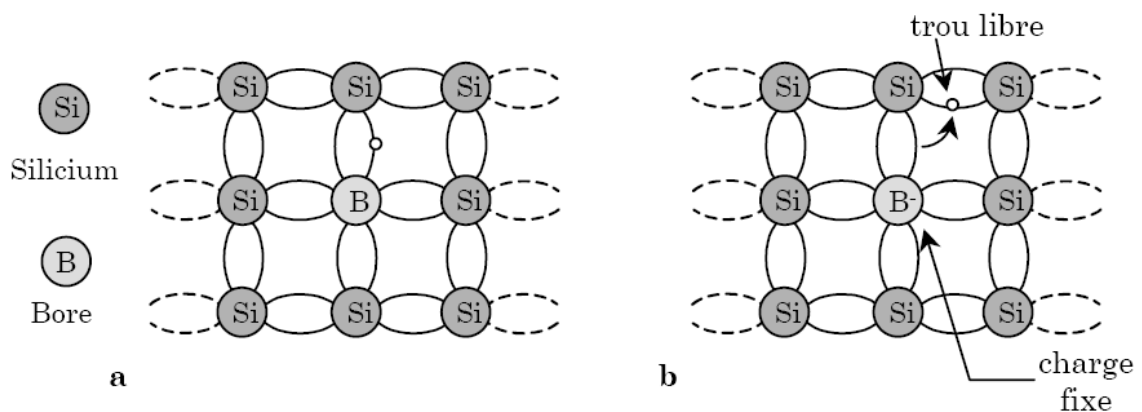


Figure I-7) Silicium dopé au Bore (dopage p) : a $T = 0K$ et b $T \neq 0K$ [9].

I-7 Les matériaux semi-conducteurs

La famille des semi-conducteurs est très vaste.

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

III-V, constitués d'éléments du groupe III (aluminium, gallium, indium, etc.) et d'éléments du groupe V (azote, phosphore, arsenic, antimoine, etc).

I-7-1 Les semi-conducteurs par groupe

1) Groupe IV

Les éléments du groupe IV sont exceptionnels dans le tableau périodique en ce sens que l'enveloppe extérieure des atomes individuels est exactement à moitié remplie. Par un échange de quatre électrons de la coque extérieure avec un autre atome de Si, une structure cristalline tridimensionnelle sans direction préférentielle peut être réalisée. On peut aussi combiner deux différents groupes semi-conducteurs IV pour obtenir un matériau composé tel que le SiC (carbure de silicium). SiC est une matière proche de la ligne frontière entre les semi-conducteurs et des isolants avec une constante de réseau de 0,436 nm et un écart d'énergie de 3,0 eV (413 nm).

Les semi-conducteurs suivants font partie des cristallogènes :

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

2) Groupe III-V

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

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

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

Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs III-V présentée sur le tableau (I-2).

Tableau I-2) Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs III-V

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

3) Groupe II-VI

Les semi-conducteurs suivants sont des alliages d'éléments appartenant au groupe 12 et aux chalcogènes.

Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs II-VI présentée sur le tableau (I-3) [11].

Tableau I-3) Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs II-VI

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

I-8 Conclusion

Les technologies semi-conducteurs ont connus la plus forte progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement des économies modernes, vus les multiples applications technologique, ils possèdent plusieurs propriétés qui peuvent être mises à profit pour des multiples applications surtout dans le domaine optoélectronique.

La connaissance des propriétés de ces matériaux est importante pour l'évaluation de leur domaine d'application.

Références bibliographiques citées dans le chapitre I :

- [1] A. Aouina, Mémoire de Magister en physique, Univ Mentouri Constantine.
- [2] N. Baghdadli, Thèse de doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013).
- [3] S. Ghafir, Mémoire de magister, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013).
- [4] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [5] C. Ng-Hélène Ng, physique des semi-conducteur, 3 Ed.Dunod, (2007).
- [6] N. Benahmed Ben abd allah, Mémoire de magister, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2006).
- [7] C. Kittel, « physique de l'état solide », Ed. Dunod Université (1983).
- [8] M. Labidi, Thèse Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011).
- [9] A. Chovet, P.Masson « physique des semi-conducteurs »,Département Micro-électronique et télécommunications, (2004-2005).
- [10] B.N. Brahmi, Thèse Doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013)
- [11] https://fr.wikipedia.org/wiki/Liste_de_matériaux_semi-conducteurs.

Chapitre II : Les propriétés Physiques des matériaux semi-conducteurs

II-1 Introduction

Les matériaux semi-conducteurs possèdent un champ d'application très élargi, ils sont actuellement utilisés dans plusieurs composants électroniques très importants.

Le développement de nouveaux dispositifs électroniques et optoélectroniques exigent une connaissance profonde des propriétés des matériaux utilisés, pour bien évaluer leur domaine d'application.

Dans ce chapitre nous allons donner quelques propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs, les propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques.

II-2 Propriétés structurales

Les matériaux semi-conducteurs sont exclusivement des solides cristallins. Leurs propriétés électroniques, optiques, mécaniques et thermiques sont donc liées à la géométrie particulière qui représente l'arrangement des atomes au sein du matériau : le réseau cristallin [1].

L'état cristallin se distingue des autres états solides par le fait que, les atomes s'organisent suivant un ordre défini. Cet état est engendré par la répétition périodique d'atome ou de groupement d'atomes (de même nature ou de nature différente) appelé motif du cristal ou maille, suivant les trois directions de l'espace et qui permet, par translation, de générer la structure cristalline. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes [2].

En générale, les semi-conducteurs se cristallisent dans l'une des structures suivantes : Structure Diamant, structure Zinc Blende (cubique), structure Wurtzite (hexagonale) et la structure Rocksalt (NaCl) [3].

II-2-1 Structure Zinc Blende

La plupart des matériaux semi-conducteurs binaires ont une structure Zinc-Blende (ZB). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées.

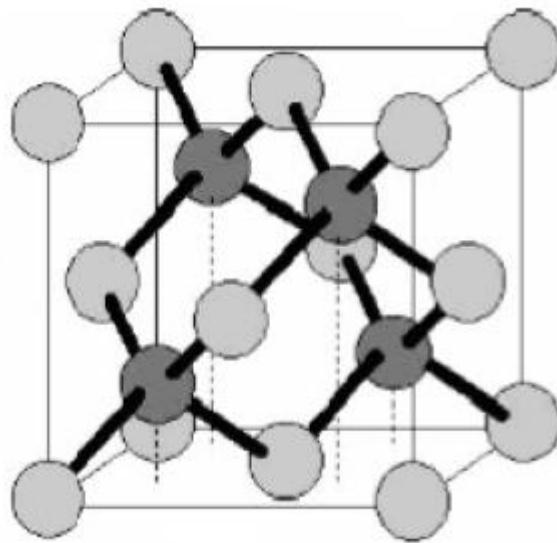
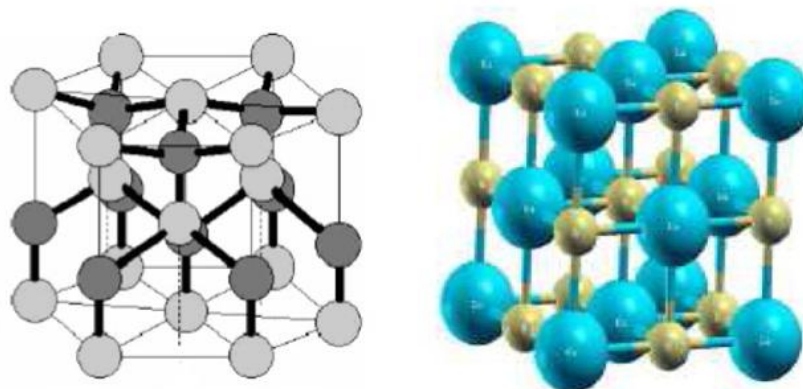


Figure II-1) Structure zinc blende référence

Comme nous pouvons le voir sur la figure II-1, la maille blende revient à une cubique à face centrée dans laquelle les sites tétraédriques non contigus sont tous occupés, soit une multiplicité de 8 atomes par maille (dont autant de cations que d'anions). Le rôle des deux ions étant symétriques, la maille blende se décompose donc en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées imbriqués, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube, l'une 'étant occupé par l'anion (P, As ou Sb), l'autre par le cation (Al, Ga ou In).

Ils existent quelques semi-conducteurs se cristallisent dans la structure Wurtzite (hexagonale) ou Rocksalt (NaCl) [4].

Les deux structures sont présentées dans la figure suivant :



La structure Wurtzite

La structure Rocksalt

Figure II-2) Les structures Wurtzite et Rocksalt

II-2-2 La constante 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 (II-3), suivant les valeurs relatives de six grandeurs on définit les différentes structures cristallines.

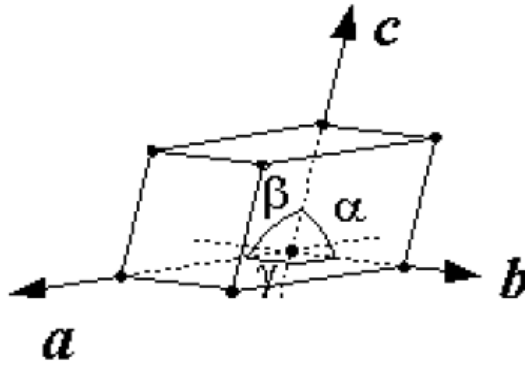


Figure II-3) Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel

La constante de maille est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives, notée a [5].

La détermination de la constante de maille est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. La connaissance de cette constante de maille permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique, il peut varier en fonction de la température et de la pression [4].

Les tableaux suivants présentent la structure cristalline et la constante de maille des matériaux semi-conducteurs des groupes III-V et II-VI :

Tableau II-1) Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V [6].

Matériau	a(Å)	Structure
GaP	5,4508	zb
GaN	3,1896	zb
GaAs	5,65330	zb
InN	3,548	w
InP	5,8690	zb
InSb	6,47937	zb
InAs	6,0583	zb

Tableau II-2) Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-VI [6].

Matériau	a (Å)	Structure
ZnSe	5,6692	zb
ZnTe	6,1037	zb
CdS	4,1367	w
CdSe	4,2999	w
CdTe	6,481	zb
HgS	5,852	zb
HgSe	6,084	zb

II-3 Propriétés électroniques

Les matériaux semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétérostructures. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome comme exemple le gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As et forment des liaisons covalents tétraédriques de type sp^3 : 4 orbitales liantes et 4 orbitales antillanités. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bande d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence.

Cette bande est pleinement occupée par des électrons à $T=0\text{K}$ pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antillanités donnent naissance à quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur E_g (gap). Pour les semi-conducteurs à gap direct le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point Γ , et pour les semi-conducteurs à gap indirect le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k [7].

Les propriétés électroniques des semi-conducteurs sont gouvernées par celles des électrons qui sont soumis à un potentiel périodique généré par les ions situés aux nœuds du réseau cristallin. Dans un cristal infini les porteurs de charges sont libres de se mouvoir dans les trois directions de l'espace et le vecteur d'onde k de l'électron peut prendre toutes les valeurs possibles dans la première zone de Brillouin [8].

II-3-1 Structure de bande d'énergie électronique

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leurs vecteurs 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.

Elles se décomposent en bandes de conduction la plus haute, la bande de valence la plus basse, et la bande interdite qui les sépare qui détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur [9].

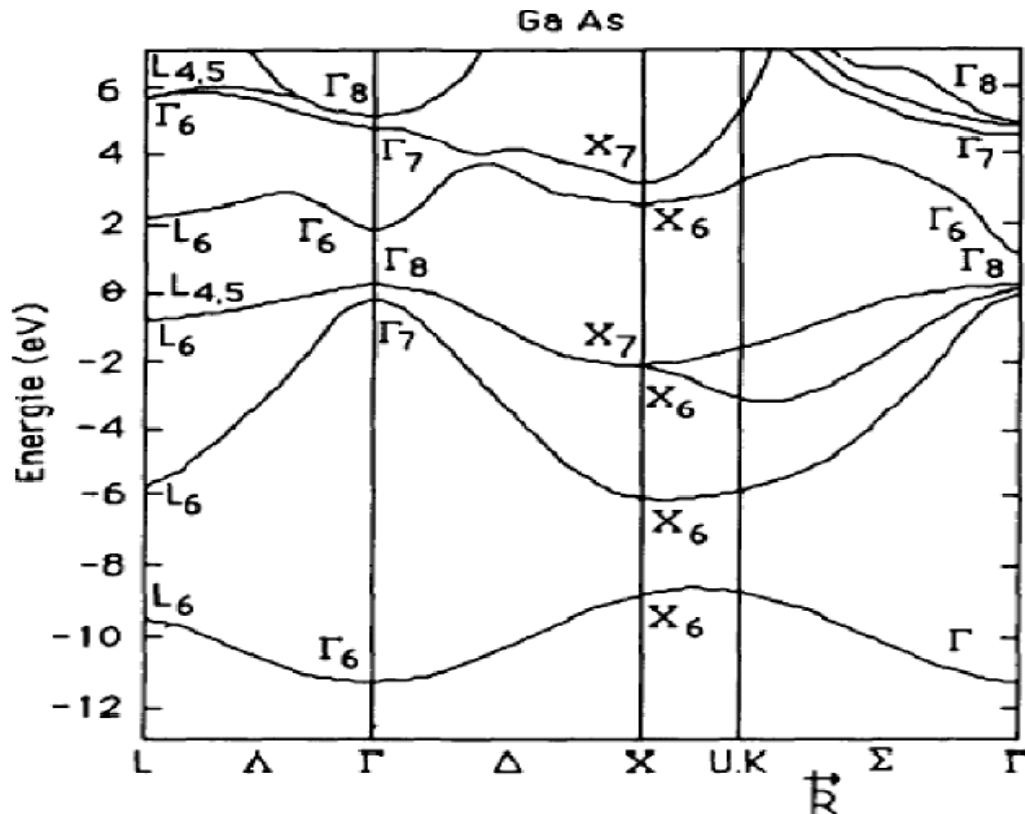


Figure II-4) Structure de bande de GaAs.

II-4 Propriétés optiques

Les propriétés optiques des semi-conducteurs sont intimement liées à leur structure électronique dans la mesure où elles mettent en jeu des transitions entre différents états électroniques [8].

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

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [10].

II-4-1 Interaction rayonnement matière

La lumière interagit beaucoup avec la matière, elle peut être absorbée, réfléchiée, déviée ou émise par la matière.

L'interaction avec les atomes et plus particulièrement avec les électrons du semi-conducteur, peut se faire selon trois processus : l'absorption, l'émission instantanée et l'émission stimulée [2].

II-4-1-1 Absorption fondamentale

Lorsque le photon absorbé provoque un saut d'électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état vide de la bande de conduction, on dit qu'il y a absorption. Ce phénomène présente sur la figure (II-5)

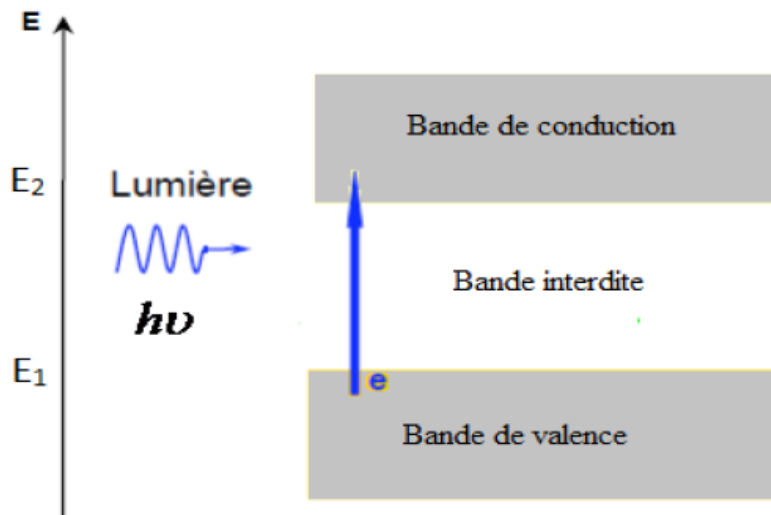


Figure II-5) L'absorption fondamentale de la lumière par les porteurs.

II-4-1-2 Emission spontanée

Lorsqu'un électron de la bande de conduction retombe spontanément sur un état vide de la bande de valence, il y'a émission spontanée. Ce phénomène est présenté sur la figure suivante :

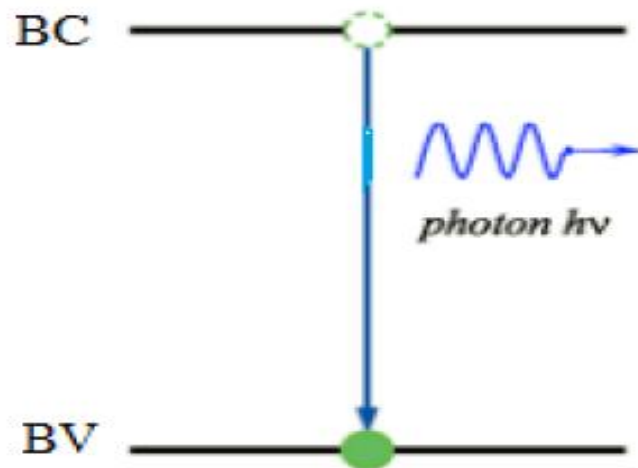


Figure II-6) L'émission spontanée.

II-4-1-3 Emission stimulée

Si le photon absorbé induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de bande de valence avec émission d'un photon, l'émission est dite stimulée [11]. Ce phénomène est présenté sur la figure ci-contre.

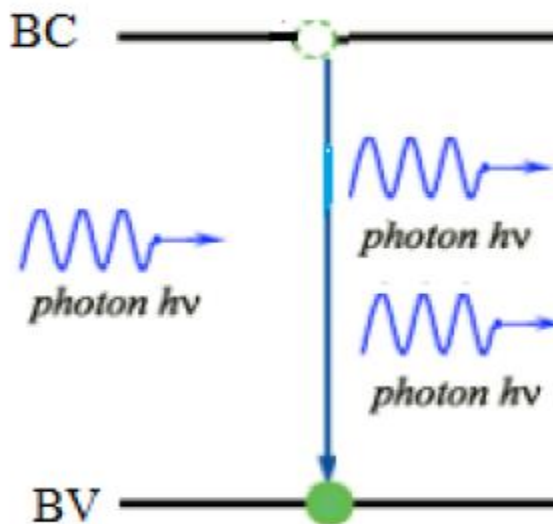


Figure II-7) L'émission stimulée.

II-4-2 La réflexion optique

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constantes diélectriques différents, elle sera divisée en deux, une onde réfléchie et une onde réfractée.

Pour une incidence normale du rayonnement sur la surface d'un solide le coefficient de réflexion s'écrit : [10]

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{II-1})$$

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

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (\text{II-2})$$

II-4-3 L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau à posséder pour ralentir et à dévier la lumière. Cet indice de réfraction (noté n) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ($c=299\,792\text{ km/s}$) et la vitesse de la lumière dans le matériau, on peut exprimer l'indice de réfraction sous une forme complexe comme suite [6] :

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (\text{II-3})$$

$n(\omega)$: Est l'indice de réfraction réelle.

$ik(\omega)$: Est l'indice d'atténuation appelé aussi coefficient d'extinction.

Le tableau II-3 présente les indices de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs :

Tableau II-3) L'indice de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs à $T=300\text{k}$ [12].

Matériau	n
GaP	2,92
InP	3,1
GaAs	3,3
InAs	3,5

II-5 Propriétés diélectriques

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

Cette fonction a des conséquences importantes sur les propriétés physiques des solides[13].

II-5-1 La constante diélectrique

La constante diélectrique appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique.

La permittivité électrique notée $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$, avec ε_r la permittivité électrique relative et ε_0 permittivité électrique du vide. La constante diélectrique intervient dans de nombreux domaines, notamment, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétiques, 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 k cette fonction sera seulement fonction de la fréquence, on parlera ainsi de la constante diélectrique statique qui correspond à l'équilibre thermodynamique, la constante diélectrique $\varepsilon(\infty)$ correspondant à sa limite pour les hautes fréquences ; appelée aussi constante diélectrique optique.

La fonction diélectrique peut être exprimée sous la forme complexe [14] :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + \varepsilon''(\omega) \quad (\text{II-4})$$

La partie imaginaire $\varepsilon''(\omega)$ traduit l'absorption du matériau tandis que la partie réelle $\varepsilon'(\omega)$ est liée à la polarisation du milieu.

Le tableau II-4 présente des valeurs expérimentales de $\varepsilon(0)$ et $\varepsilon(\infty)$ pour quelques matériaux semi-conducteurs.

Tableau II-4) La constante diélectrique statique et optique de quelques matériaux semi-conducteurs à 300k. [2]

Matériau	Constante diélectrique statique	Constante diélectrique optique
GaP	10,7	8,5
GaAs	12,9	10,9
InP	12,4	9,6
InAs	14.9	12.3

II-5-2 La relation entre l'indice de réfraction et la constante diélectrique

Dans le cas d'un milieu isotrope ou un cristal cubique, ε se réduit à un scalaire. La réponse d'un système à une onde électromagnétique plane peut être décrite par l'indice de réfraction complexe :

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} \quad (\text{II-5})$$

La partie réelle de $N(\omega)$ correspond à l'indice normal du cristal dans une région de transparence, tandis que la partie imaginaire $ik(\omega)$ correspond à une absorption optique du cristal (k est appelé le coefficient d'absorption ou coefficient d'extinction).

La constante diélectrique sera déduite de la relation (II-4) et finalement on l'obtient sous sa forme complexe [6] :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \quad (\text{II-6})$$

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 \quad (\text{II-7})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk \quad (\text{II-8})$$

Si on simplifiant par $k=0$ on trouve que :

$$n = \sqrt{\varepsilon_1} \quad (\text{II-9})$$

On peut dire que n et k sont reliés par des relations de dispersion, la connaissance de l'un dans tout le domaine des fréquences permet de détermination de l'autre.

II-6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons regroupé quelques propriétés générales des matériaux semi-conducteurs. La connaissance de ces propriétés représente un intérêt fondamental dans la détermination des structures électroniques et atomiques de ces semi-conducteurs.

Références bibliographiques citées dans le chapitre II :

- [1] John H. Davies, The physics of low-dimensional Semiconductors, Cambridge University Press, (1998)
- [2] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012)
- [3] AH. Souici, « Physique des semi-conducteur », Univ Bejaia, (2013-2014)
- [4] Bahi Wafa. Les semi-conducteurs binaires utilisés dans la composante optoélectronique.
- [5] bechiri. abderrachid. Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V, thèse doctorat. Université mentouri. Umc (Algerie). (2006)
- [6] S.Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur », Wiley, Chichester, (2009).
- [7] S. Datta and B. Das, Appl Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [8] M. Labidi, Thèse Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011)
- [9] N.Baghdadli, these de magister, Univ. Abou-Bakr Belkaid, TLEMCEN. (2010)
- [10] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 6 Ed. DUNOD (2009)
- [11] B.N. Brahmi, Thèse doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013).
- [12] P. Kiréev, « La physique des semi-conducteurs », Ed.Dound Université (2001)
- [13] F. Mezrag, Mémoire de magister, Univ Mohamed Boudiaf de M'sila. (2003)
- [14] S.M.SZE.KWOK K NG. Physic of semi-conductor divise. Edition .weley.

Chapitre III : Théorie des alliages semi-conducteurs

III-1 Introduction

Le mot alliage, implique un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux. Il fut un temps où le mot alliage était uniquement réservé aux métaux, pourtant cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux, notamment les céramiques et les polymères. Peu après le développement des techniques modernes de la croissance cristalline et la purification des semi-conducteurs, il a été réalisé plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires. L'utilisation de ces derniers dans les domaines de la microélectronique et l'optoélectronique a encouragé les chercheurs à développer le côté théorique ainsi que l'expérimental.

Certains composés semi-conducteurs sont des matériaux très intéressants pour leurs propriétés électroniques (mobilité des charges) et optoélectroniques (gap direct). Pour faire varier ces propriétés, il faut jouer sur la structure électronique et ajuster la largeur de la bande interdite. Ceci est réalisé à l'aide d'alliages. Les domaines étendus de la composition chimique variable sont des atouts pour la réalisation de dispositifs adaptés aux exigences. Le progrès effectué dans les différents domaines par les chimistes, les physiciens des matériaux et les technologues ont contribué d'une manière efficace à l'étude et à la fabrication de nouveaux matériaux parmi eux les alliages semi-conducteurs II-VI et IV-VI et III-V [1].

III-2 Les alliages semi-conducteurs

Une mention particulière est donnée aux alliages semi-conducteurs, vu leur application dans le domaine de l'optoélectronique. L'élaboration de ces alliages se fait à partir du composé binaire dont en fait varié leur composition, ils peuvent être binaire, ternaire, quaternaire suivant qu'ils renferment deux, trois, quatre éléments respectivement [2].

III-3 Classification des alliages semi-conducteurs

Les alliages semi-conducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant le nombre de constituants

- Alliage binaire de la forme $A^N B^{8-N}$:



$A^{II}B^{VI}$: CdS, CdSe, CdTe, ...

$A^{III}B^V$: GaAs, InSb, InP ...

$A^{IV}B^{IV}$: SiC, SiGe ...

- Alliage binaire de la forme $A^N B^{10-N}$:

$A^{IV}B^{VI}$: PbS, PbSe, PbTe, ...

- Alliage binaire de la forme $A^N B^{7-N}$:

$A^I B^{VI}$: CuS, CuO ...

Lorsque les éléments binaires $A^N B^{8-N}$ et $A^N C^{8-N}$ sont associés, l'alliage formé peut être soit :

- Alliage ternaire anionique : $A^N B_x^{8-N} C_{1-x}^{8-N}$

- Alliage ternaire cationique : $A_x^N B_{1-x}^N C^{8-N}$

Ces alliages sont caractérisés par la concentration x .

Il existe un autre type d'alliages semi-conducteurs : il s'agit des matériaux "quaternaires". Ce type d'alliages semi-conducteurs fait intervenir quatre composés binaires et sont caractérisés par la présence de deux coefficients stœchiométriques x et y .

Ces alliages peuvent être divisés en deux classes :

- Les solutions quadratiques : ces alliages ont la forme : $A_{1-x}^N B_x^N C_y^{8-N} D_{1-y}^{8-N}$

- Les solutions triangulaires, deux cas se présentent :

Les solutions purement anioniques : $A^N B_x^{8-N} C_y^{8-N} D_{1-x-y}^{8-N}$

Les solutions purement cationiques : $A_x^N B_y^N C_{1-x-y}^{8-N} D^{8-N}$

Les alliages quaternaires quadratiques ont été les premiers et les plus recherchés et étudiés.

Les critères concernant l'accord des paramètres de maille ainsi que l'identité des structures cristallines des éléments binaires parents restent toujours valables dans le cas des alliages quaternaires.

Dans ce cas, il faut tenir compte de l'accord de maille entre l'alliage quaternaire et son substrat pour trouver une relation entre les deux concentrations molaires x et y [3].

Dans un alliage, la structure cristalline basée sur périodicité du réseau n'est plus respectée et le désordre est primordial suite à la distribution des atomes de ces composés dans les sites des sous réseau [2]. Pour l'élaboration d'un alliage ternaire, quaternaire, avec une propriété physique de valeur spécifique, il est particulièrement important de relier cette propriété à la composition de l'alliage, pour cela, on fait appel à l'approximation du cristal virtuel.

III-4 L'approximation du cristal virtuel (VCA)

Cette approche est la plus utilisée pour sa simplicité d'application tout en assurant des résultats s'accordant aux données expérimentales.

III-4-1 Le cas d'un alliage ternaire

L'approximation du cristal virtuel (VCA) est la proche le plus simple, elle considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen. Cet alliage ternaire de la forme $A_xB_{1-x}C$ est composé des molécules AC avec une fonction molaire x et des molécules BC avec une fonction molaire $(1-x)$ [4].

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter cet alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [5].

La valeur moyenne $F(x)$ de la propriété physique de l'alliage ternaire, peut être liée linéairement à la concentration stœchiométrique x par la relation suivante :

$$F(x)_{A_xB_{1-x}C} = xF_{AC} + (1-x)F_{BC} \quad (\text{III-1})$$

III-4-1-1 Le paramètre de maille des alliages ternaire

Les travaux expérimentaux montrent que la constante du réseau du ternaire obéit à la loi de Vegard à l'exception de certains alliages où des très petites déviations ont été observées. La constante du réseau « a » est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires (AC et BC) qui forment l'alliage.

Le paramètre de réseau donné par la loi de Vegard [6] :

$$a(x)_{A_xB_{1-x}C} = xa_{AC} + (1-x)a_{BC} \quad (\text{III-2})$$

a_{AC} est la constante du réseau du composé AC

a_{BC} est la constante du réseau du composé BC

x est la concentration molaire.

III-4-2 Le cas d'un alliage quaternaire

Les alliages quaternaires sont d'intérêt particulier dans la technique actuel à cause de l'avantage qu'il offrent pour la conception des dispositifs aux propriétés souhaitées, ils ajoutent un degré de liberté du gap énergétique, couvrant ainsi, une gamme de longueur d'onde.

Ces alliages quaternaires sont de la forme $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$, composé de quatre binaires AC, BC, AD et BD est caractérisé par la présence de deux coefficient stœchiométriques x et y , permettant d'ajuster de façon indépendante les propriétés physiques de l'alliage quaternaire, en utilisant les propriétés physiques de ses composés binaires en particulier son potentiel et son paramètre de maille. La propriété physique $F(x, y)$ de ce type d'alliage est calculé par une interpolation linéaire des paramètres de ses composés binaires :

$$F_{ABCD}(x, y) = xyF_{AC} + (1-x)yF_{BC} + x(1-y)F_{AD} + (1-x)(1-y)F_{BD} \quad (\text{III-3})$$

III-4-2-1 Constante du réseau de l'alliage quaternaire $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$

Pour un système quaternaire, la constante de réseau est donnée par la loi de Vegard

$$a_{alliage}(x, y) = xy a_{AC} + (1-x)y a_{BC} + x(1-y) a_{AD} + (1-x)(1-y) a_{BD} \quad (\text{III-4})$$

a_{AC} , a_{BC} , a_{AD} et a_{BD} sont les constantes des réseaux des composés binaires formant l'alliage quaternaire [7].

III-5 Méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie des composés semi-conducteurs

L'approche du pseudopotentiel est actuellement l'approche la plus utilisée pour la détermination des structures de bandes électroniques et d'autres propriétés telles que la bande interdite, la dépendance de la température et de la pression avec la structure électronique, les propriétés chimiques... etc [3].

III-5-1 La méthode de pseudopotentiel (P.M)

La méthode du pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies $E_n(k)$ et d'autres propriétés des semi-conducteurs, la vertu majeure de cette approche est seulement les électrons de valence qui sont considérés [8].

On sépare donc les électrons de l'atome en électrons de cœur et en électrons de valence. Ces derniers occupent les couches les plus externes intervenant dans les liaisons chimiques. Les électrons du cœur quant à eux sont dans les couches internes les plus proches du noyau et sont très peu sensibles à l'environnement chimique de l'atome.

L'intérêt de cette méthode est que seuls les électrons de valence seront pris en compte. Les électrons du cœur seront supposés "gelés" et seuls les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électronique. Les coefficients utilisés dans la méthode O.P.W. pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur, peuvent être utilisés pour construire un potentiel orthogonal. Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valence loin du cœur. Et on obtient par effet d'annulation un potentiel faible ou "pseudo-potentiel". Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres (N.F.E.M) ou toute autre méthode standard pour résoudre l'équation de Schrödinger [9].

III-5-2 Le formalisme mathématique du pseudo-potentiel

Comme dans la méthode OPW, la fonction Ψ est donnée par la somme d'ondes planes Φ_k^v et des états atomiques occupés du cœur Φ_k^c

$$\Psi_k = \Phi_k^v + \sum_c b_c \Phi_k^c \quad (\text{III-5})$$

Sachant que Ψ_k est orthogonale aux états du cœur Φ_c alors :

$$\langle \Phi_k^c / \Psi_k \rangle = 0 \quad (\text{III-6})$$

$$\Rightarrow \Psi_k = \Phi_k^v - \sum_c \langle \Phi_k^c / \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c \quad (\text{III-7})$$

En plus Ψ_k vérifie l'équation de Schrödinger $H\Psi_k = E_k \Psi_k$, alors on peut écrire :

$$H\Phi_k^v - H \sum_c \langle \Phi_k^c / \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \Psi_k \quad (\text{III-8})$$

Sachant, en plus, que Φ_k^c vérifie aussi l'équation de Schrödinger

$H\Phi_k^c = E_k^c \Phi_k^c$ alors l'équation (III-7) devient comme suit :

$$H\Phi_k^v - E_k^c \sum_c \langle \Phi_k^c / \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \Psi_k \quad (\text{III-9})$$

$$= E_k \left[\Phi_k^v + \sum_c - \langle \Phi_k^c / \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c \right] \quad (\text{III-10})$$

$$H\Phi_k^v + \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \Phi_k^c / \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \Phi_k^v \quad (\text{III-11})$$

D'où l'on peut déduire la formule suivante

Avec :

$$\sum_c (E_k - E_k^c) \langle \Phi_k^c / \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = V_R \Phi_k^v \quad (\text{III-12})$$

Alors l'équation (III-10) s'écrit comme suit :

$$H\Phi_k^v + V_R \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (\text{III-13})$$

$$(H + V_R) \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (\text{III-14})$$

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_c + V_R \right] \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (\text{III-15})$$

Avec $V_p = V_c + V_R$ qui est le pseudo-potentiel considéré comme faible.

Où V_c représentant le potentiel attractif du cœur (-) et V_R représentant le potentiel répulsif (+)

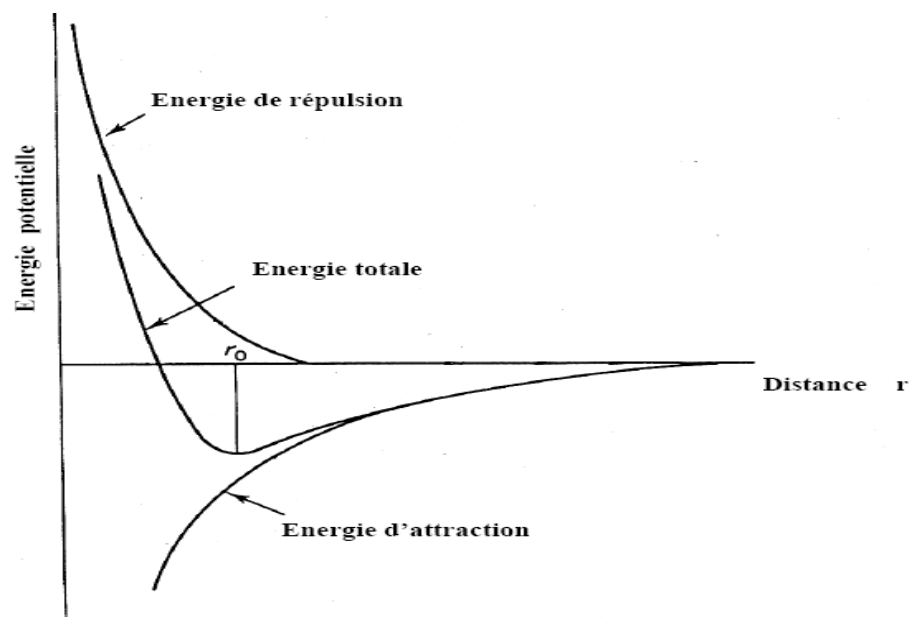


Figure III-1) Le potentiel d'interaction entre deux atomes en fonction de la distance r

Pour la résolution de l'équation de Schrödinger, on va considérer le pseudo-potentiel comme perturbation [10].

III-5-3 La méthode empirique des pseudo-potentiels (E.P.M)

La méthode empirique du pseudo-potentiel (E.P.M) n'est pas utilisée extensivement pour étudier tous les métaux mais appliquée avec succès à une douzaine de semi-conducteurs de structure diamant et zinc blende. La première application de succès est le germanium et le silicium.

Elle utilise pour déterminer les paramètres entrant dans le calcul de la structure de bande électronique, en utilisant les données expérimentales [8].

L'E.P.M à deux approximations importantes qui sont :

- L'approximation empirique locale.
- L'approximation empirique non locale [11].

III-5-3-1 L'approximation empirique locale

Dans cette technique, la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelques termes de $V(G)$ que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations faites sur la réflexion et l'absorption des cristaux.

L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux $V(G)$ du pseudo-potentiel $V_P(r)$ que l'on imagine être une superposition linéaire des pseudo-potentiels atomiques et peut être écrit comme suit [12] :

$$V_P(r) = \sum_{R,\tau} V_q(r - R - \tau) \quad (\text{III-16})$$

R : est un vecteur du réseau direct.

τ : est le vecteur de translation du réseau direct.

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

$$V_P(r) = \sum_G S(G) V_q(G) \exp(iG \cdot r) \quad (\text{III-17})$$

$V_q(G)$: est le facteur de forme

$S(G)$: est le facteur de structure donné par :

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iGr) \quad (\text{III-18})$$

N_a : étant le nombre d'atomes de base.

Le pseudo fonction d'onde $\Psi_{n,k}(r)$ et les énergies $E_n(k)$ seront les solutions de l'équation :

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_P(r) \right] \Psi_{n,k}(r) = E_n(k) \Psi_{n,k}(r) \quad (\text{III-19})$$

Où n représente l'indice de la bande.

$\Psi_{n,k}(r)$ sont les fonctions de Blokh et peuvent être développées en une série d'onde planes.

Cette technique du pseudo-potentiel est pratiquement utilisée, car elle nécessite seulement un nombre réduit de facteurs de forme pour le calcul de la structure de bandes électroniques.

Le plus important dans ce calcul est la connaissance des facteurs de forme et les facteurs de structure [11].

Le procédé de calcul de L' E.P.M comme le montre le diagramme suivant est : choisir $V(G)$, la structure est incluse par le facteur de structure et l'équation de Schrödinger est résolue pour les valeurs propres $E(k)$ d'énergie et les pseudo-fonctions d'ondes $\Psi_{n,k}(r)$. Ces énergies sont comparées avec l'expérience et $V(G)$ est altéré si on n'obtient pas un bon accord entre l'expérience et la théorie. Le procédé est répété jusqu'à l'obtention d'un bon accord entre l'expérience et la théorie.

En plus de L'E.P.M, qui constitue la méthode la plus utilisée dans le calcul des structures de bandes, d'autres variétés de la méthode pseudo-potentiel ont été développées. Ce sont notamment la méthode Self-consistante et Ab initio [9].

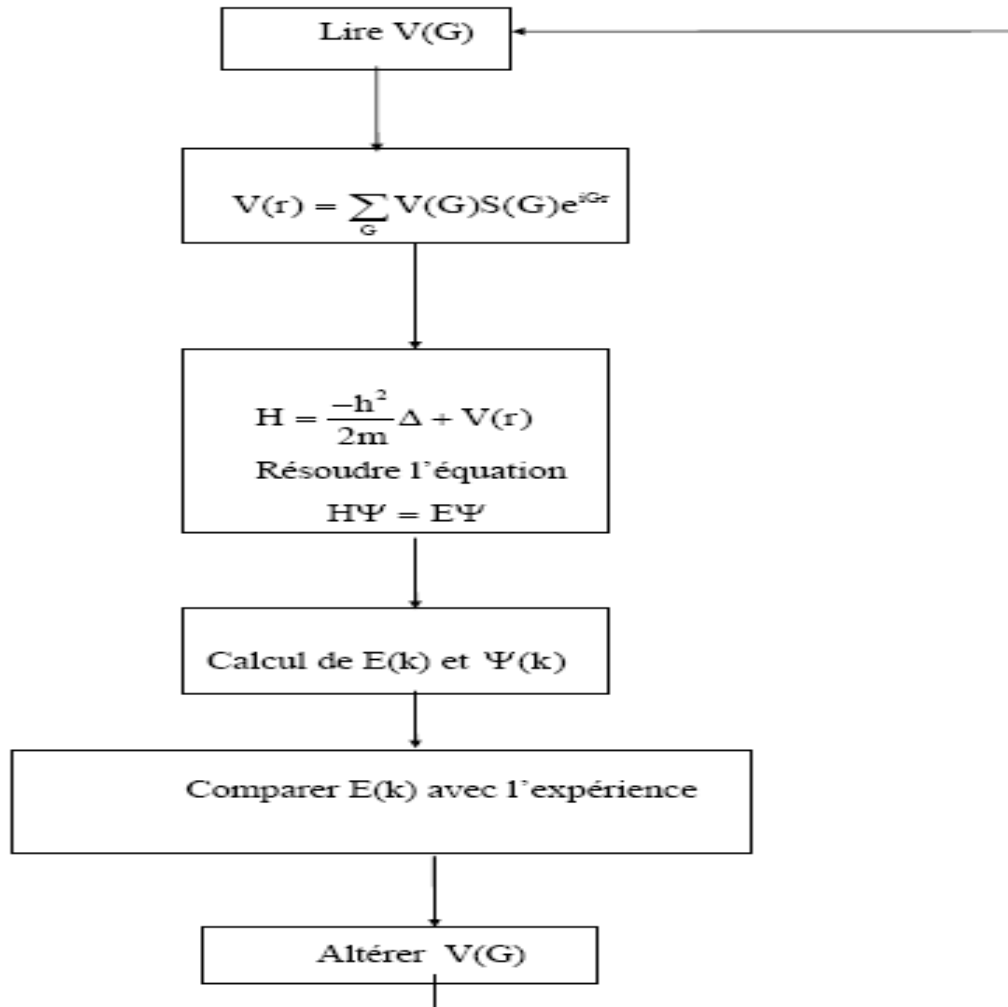


Figure III-2) L'algorithme du calcul de l'EPM

III-6 Conclusion

Dans le troisième chapitre nous avons donné la théorie des alliages semi-conducteurs et la méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie de ces matériaux.

Les alliages des composés semi-conducteurs sont considérés comme une classe importante de ces matériaux, grâce à l'ajustement et le contrôle de leurs paramètres physiques en fonction de la composition, permettant ainsi, l'obtention d'un composant optoélectronique aux propriétés désirées.

L'approche du pseudo-potentiel est actuellement l'approche la plus utilisée pour la détermination des structures de bandes électroniques et d'autres propriétés telles que la bande interdite.

Le choix de la méthode des pseudo-potentiels empirique l'EPM est basé essentiellement sur le fait d'obtenir les états de valence sans calculer pour autant les états du cœur qui ne sont pas nécessaires pour la description de propriétés physiques d'un système. Les états réels sont décrits par des pseudos fonctions d'ondes ayant une représentation dans l'espace de Fourier par un nombre limité d'ondes planes minimisant ainsi les calculs numériques.

Références bibliographiques citées dans le chapitre III :

- [1] M. Monir, Thèse de doctorat, Univ Mustapha Stambouli Mascara (2016).
- [2] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod université (1983).
- [3] BECHIRI. Abderrachid. Effet du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V. thèse doctorat. Université Mentouri. UMC (ALGERIE). 2006.
- [4] N. Bouarissa, Matter.Chem.Phys.72 (2001) 387.
- [5] J. E. Bernard, A. Zunger, Phys. Rev. B36, 3199 (1987).
- [6] M. Labidi, Thèse Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011).
- [7] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [8] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors, Springer Series in Solide-State Sciences , Ed. Spriger , New York, (1989).
- [9] H. Baaziz. Thèse de doctorat, Univ Colonel Hadj Lakhdar Batna (2006).
- [10] K. Mohamed Wahiba, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [11] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [12] M. L. Cohen and T. Bergestresser Phys. Rev. 141, 789 (1966).

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV-I Introduction

Le progrès scientifique est très lié au développement de la physique des semi-conducteurs en mettant à profit leurs propriétés pour réaliser certains dispositifs électroniques et optoélectroniques.

Actuellement, les alliages à plusieurs composants ont suscité beaucoup d'attention en raison de leurs utilisations comme substrats, couches de revêtement, éléments actifs dans les dispositifs optoélectroniques des appareils photoniques à haute vitesse, et pour d'autres applications. Les caractéristiques de fonctionnement des dispositifs dépendent des propriétés électroniques des matériaux constitutifs, ces propriétés peuvent être améliorées par l'utilisation des alliages quaternaires.

Donc les alliages quaternaires sont des matériaux largement utilisés dans la fabrication des composants électroniques. Une connaissance de ces propriétés est nécessaire pour déterminer leur domaine d'application.

Notre travail porte sur l'étude des propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages quaternaires semi-conducteurs déposés sur un substrat : $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ /InP et $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ /GaAs par simulation numérique. Il s'agit de modéliser la structure et les interactions dominantes par l'utilisation d'un algorithme approprié.

Ces semi-conducteurs de la famille III-V se cristallisent dans la structure "Zinc Blende". Cette structure, comme on a vu précédemment, s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées.

Dans ce présent travail, nous avons opté pour l'utilisation de la méthode empirique du pseudo-potential (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA).

IV-2 Etude des propriétés électroniques

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

La nature empirique de la méthode du pseudo-potentiel consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques. [1]

Ces facteurs de forme, initialement pris de la théorie, sont ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [2], dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée, de l'écart des niveaux d'énergie défini par :

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

Ou :

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

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 le nombre de paramètre du pseudo-potentiel empirique. Les valeurs des facteurs de formes sont modifiées par interaction jusqu'à minimiser le δ [3].

IV-2-1 L'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$

Dans le présent travail, les propriétés électroniques des alliages quaternaires $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposés sur deux substrats InP et GaAs sont étudiées.

Les facteurs de forme pseudo-potentiels symétriques V_S et antisymétriques V_A ajustés, ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires utilisés, sont donnés dans le tableau (VI-1).

Tableau VI-1) Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés GaAs, InAs, GaP et InP.[4]

Composé	Les facteurs de formes (Ry)						Les Paramètres De réseau a (Å)
	V _S (3)	V _S (8)	V _S (11)	V _A (3)	V _A (4)	V _A (11)	
GaAs	-0.235393	0.0126	0.057018	0.073883	0.05	0.01	5.6533
InAs	-0.214015	0.00	0.046505	0.045385	0.045	0.01	6.0583
GaP	-0.225284	0.00	0.109755	0.084005	0.06	0.03	5.4505
InP	-0.200313	0.00	0.068396	0.106112	0.06	0.03	5.8687

Dans l'approche du pseudo-potentiel local, V_S et V_A ne dépendent que de G . Pour l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ étudié, V_S et V_A sont écrits comme suit:

$$V_S^{alliage} = xyV_S^{GaAs} + (1-x)yV_S^{InAs} + x(1-y)V_S^{GaP} + (1-x)(1-y)V_S^{InP} \quad (IV-3)$$

$$V_A^{alliage} = xyV_A^{GaAs} + (1-x)yV_A^{InAs} + x(1-y)V_A^{GaP} + (1-x)(1-y)V_A^{InP} \quad (IV-4)$$

La variation du paramètre du réseau de l'alliage quaternaire étudié en fonction des compositions x et y est supposée suivre la loi de Vegard [5], c'est-à-dire:

$$a_{alliage} = xy a_{GaAs} + y(1-x)a_{InAs} + x(1-y)a_{GaP} + (1-x)(1-y)a_{InP} \quad (IV-5)$$

a_{GaAs} , a_{InAs} , a_{GaP} et a_{InP} sont les constantes du réseau du GaAs, InAs, GaP et InP.

Tenant compte de principe de l'accord de maille entre l'alliage et le substrat, la variation de la composition y en fonction de x est calculée en résolvant les deux équations (IV-6) et (IV-8) :

La condition d'accord de maille pour le $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur le substrat InP :

$$a_{InP} = xy a_{GaAs} + y(1-x)a_{InAs} + x(1-y)a_{GaP} + (1-x)(1-y)a_{InP} \quad (IV-6)$$

La solution de cette équation est comme suit :

$$y = \frac{0.4182x}{0.1893 + 0.0132x} \quad (0 \leq x \leq 0.47 \quad \text{et} \quad 0 \leq y \leq 1) \quad (IV-7)$$

La condition d'accord de maille pour le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur le substrat GaAs :

$$a_{\text{GaAs}} = xy a_{\text{GaAs}} + y(1-x)a_{\text{InAs}} + x(1-y)a_{\text{GaP}} + (1-x)(1-y)a_{\text{InP}} \quad (\text{IV-8})$$

La solution de cette équation est comme suit :

$$y = \frac{0.4182x - 0.2157}{0.0132x + 0.1893} \quad (0.52 \leq x \leq 1 \quad \text{et} \quad 0 \leq y \leq 1) \quad (\text{IV-9})$$

IV-2-1-1 Gap énergétique

IV-2-1-1-1 L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

Les variations des gaps énergétique direct E_{Γ}^{Γ} et indirects $E_{\Gamma}^X, E_{\Gamma}^L$, ont été calculé pour différentes compositions x du $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ avec le substrat InP allant de 0 à 0.47, nos résultats sont présentés dans le tableau (IV-2)

Tableau IV-2) Les variations des gaps énergétique de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

Composition x	E_{Γ}^{Γ} (eV)	E_{Γ}^X (eV)	E_{Γ}^L (eV)
0	1.33996 1.35 ^{a)} , 1.33995 ^{b)}	2.19001 2.21 ^{a)} , 2.44 ^{b)} , 2.1899 ^{b)}	1.93005 2.05 ^{a)} , 2.19 ^{b)} , 1.93004 ^{b)}
0.05	1.32782	2.10595	1.89613
0.1	1.30634	2.02936	1.85643
0.15	1.27555	1.95974	1.81097
0.2	1.23547	1.89651	1.75977
0.25	1.18606	1.83915	1.70297
0.3	1.12729	1.78702	1.64068
0.35	1.05917	1.73955	1.57303
0.4	0.9818	1.69611	1.50018
0.45	0.89537	1.65617	1.42228
0.47	0.85834	1.64106	1.38976

^{a)} Valeur expérimentale et théorique indiquée dans Réf [6] [7] [8]

^{b)} Valeur expérimentale indiquée dans Réf [4].

On remarque que nos résultats des gaps est en meilleur accord avec l'expérience.

La variation du gap fondamental (E_{Γ}^{Γ}) de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ en fonction de la composition x du Gallium est présenté dans la figure (IV-1).

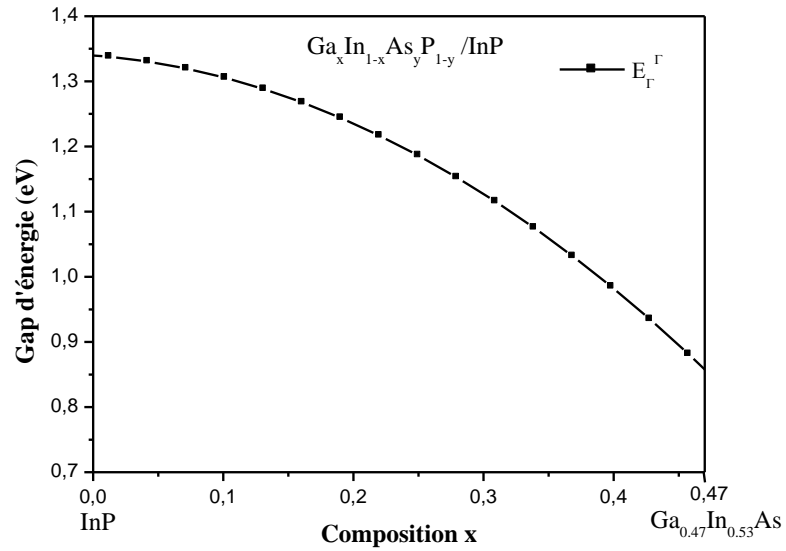


Figure IV-1) La variation du gap fondamental (E_{Γ}^{Γ}) en fonction de la composition x du Gallium de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

L'équation du fit quadratique est :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 1.3400 - 0.1511x - 1.8597x^2 \quad (\text{IV-10})$$

Pour voir une éventuelle transition des gaps direct et indirect, la figure (IV-2) a été tracée.

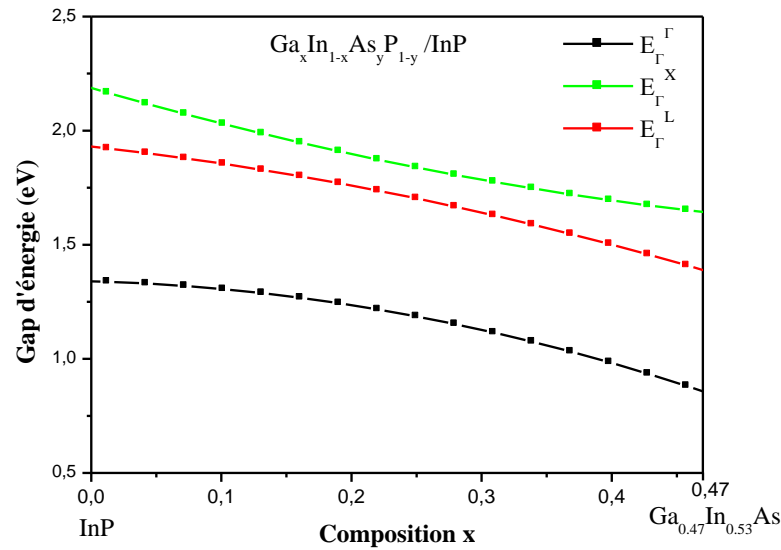


Figure IV-2) La variation du gap direct (E_{Γ}^L) et des gaps indirects (E_{Γ}^X), (E_{Γ}^L) en fonction de la composition x de l'alliage semi-conducteur $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

Les équations des fit polynomiaux de deuxième ordre des gaps indirect donné comme suit :

$$E_{\Gamma}^X = 2.1871 - 1.6628x + 1.0766x^2 \quad (\text{IV-11})$$

$$E_{\Gamma}^L = 1.9305 - 0.6357x - 1.0979x^2 \quad (\text{IV-12})$$

A travers cette figure, nous constatons que les gaps décroissent avec l'augmentation de la composition x du Gallium, cette variation est monotone et non linéaire.

Pour l'accord de maille de l'InP, l'alliage d'intérêt a un gap direct E_{Γ}^L et présentant un écart considérable par rapport aux gaps E_{Γ}^X et E_{Γ}^L et qu'aucune transition de gaps n'est remarquée.

Les résultats suggèrent un gap direct pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ pour toutes les compositions x , ce qui permet de conclure que l'alliage est un semi-conducteur à gap direct. Et que sa valeur varie de 1.3399 eV à 0.8583 eV chaque fois que x varie de 0 à 0.47

IV-2-1-1-2 L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$

Les variations des gaps énergétique direct (E_{Γ}^L) et indirects (E_{Γ}^X), (E_{Γ}^L), ont été calculé pour différentes compositions x du Gallium de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ avec le substrat GaAs allant de 0,52 à 1, nos résultats sont illustrés dans le tableau (IV-3).

Tableau IV-3) Les variations des gaps énergétique de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$

Composition x	E_{Γ}^{Γ} (eV)	E_{Γ}^X (eV)	E_{Γ}^L (eV)
0.52	2.0545	2.2362	2.26829
0.58	2.02287	2.17644	2.2312
0.64	1.97636	2.12337	2.18336
0.7	1.91543	2.07609	2.12539
0.76	1.84057	2.03377	2.05802
0.82	1.75253	1.9956	1.98196
0.88	1.6522	1.96087	1.898
0.94	1.54085	1.92913	1.80703
1	1.41998 1.42 ^{a)} , 1.41998 ^{b)} , 1.42 ^{b)} 1.42 ^{c)} , 1.43 ^{d)}	1.89996 1.81 ^{a)} , 1.91 ^{b)} , 2.03 ^{b)} 1.81 ^{c)} , 1.911 ^{d)}	1.71006 1.72 ^{a)} , 1.71 ^{b)} , 1.73 ^{b)} , 1.82 ^{b)}

a) Valeur expérimentale et théorique indiquée dans Réf [9], [7], [10]

b) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [4]

c) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [10]

d) Valeur théorique indiquée dans Réf [7]

Nous remarquons que les résultats des gaps est en meilleur accord avec l'expérience.

La variation du gap fondamental (E_{Γ}^{Γ}) de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ en fonction de la composition x du Gallium est tracé sur la figure (IV-3).

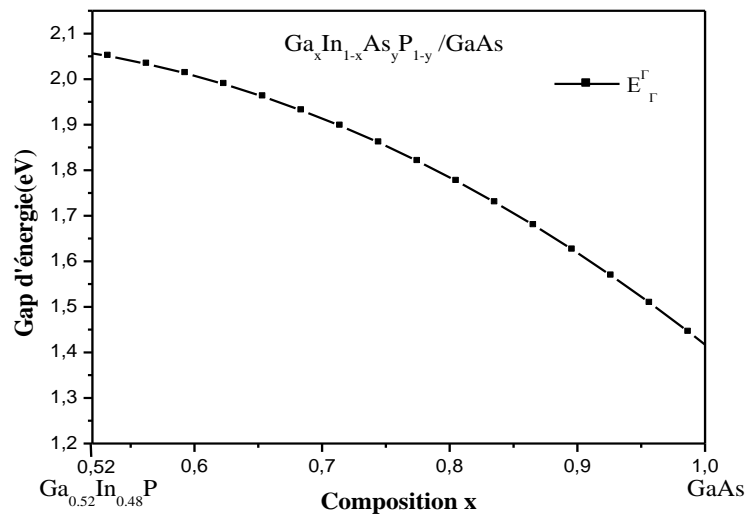


Figure IV-3) La variation du gap fondamental (E_{Γ}^{Γ}) en fonction de la composition x du Gallium de l’alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$

Dans le but de confirmer la possibilité d’existence d’une transition du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) et des gaps indirects (E_{Γ}^X) et (E_{Γ}^L) en fonction de la composition x en Gallium, nous avons tracés les différents courbes de variation des gaps énergétiques en fonction de la composition x du Gallium sur la même figure (IV-4).

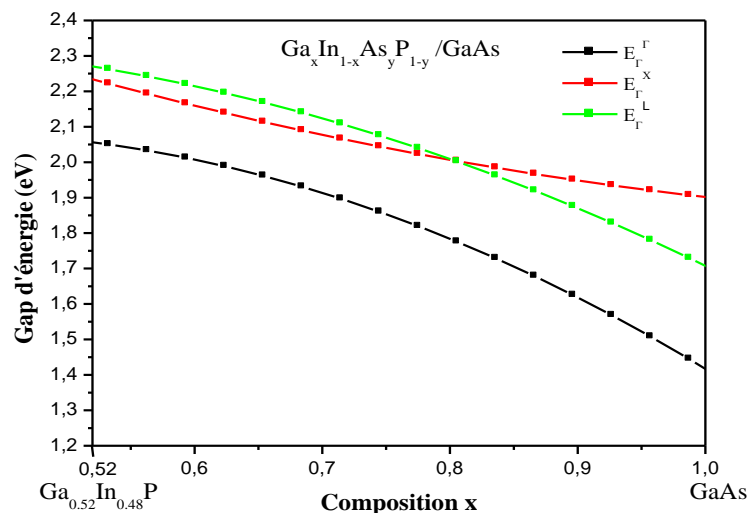


Figure IV-4) La variation du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) et des gaps indirects (E_{Γ}^X), (E_{Γ}^L) en fonction de la composition x de l’alliage semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$

Les fits quadratiques faites sur les gaps d'énergie étudiés (E_{Γ}^{Γ}), (E_{Γ}^X) et (E_{Γ}^L) sont données par les expressions analytiques suivantes :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 1.8170 + 1.3930x - 1.7928x^2 \quad (\text{IV-13})$$

$$E_{\Gamma}^X = 2.9042 - 1.5986x + 0.5962x^2 \quad (\text{IV-14})$$

$$E_{\Gamma}^L = 2.2585 + 0.6441x - 1.1949x^2 \quad (\text{IV-15})$$

Nous observons que les trois gaps E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X et E_{Γ}^L décroissent de façon monotone et non linéaire avec l'augmentation de la concentration x de Gallium.

Pour l'accord de maille de GaAs, l'écart des gaps E_{Γ}^X et E_{Γ}^L est relativement faible, on remarque aussi que le gap direct est le gap fondamental E_{Γ}^{Γ} ce qui permet de conclure que l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ / GaAs est un semi-conducteur à gap direct.

Et que sa valeur varie de 2.0545 eV à 1.41998 eV chaque fois que x varie de 0.52 à 1

IV-3 Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction)

L'indice de réfraction (n) des semi-conducteurs est un paramètre physique très important lié aux interactions atomiques microscopiques, il est souvent relié à l'énergie de gap.

Plusieurs approches ont été envisagées pour corréler le gap énergétique des semi-conducteurs à leur indice de réfraction.

La corrélation entre n et E_g à des répercussions importantes sur la structure de bande des semi-conducteurs, il serait utile de trouver une valeur acceptable de n d'un matériau quelconque à partir de cette relation.

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques, les fibres optiques.

Il y'a plusieurs modèles pour calculer ce paramètre, Moss était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction n et le gap énergétique E_g basée sur le modèle atomique, sa formule est donnée comme suite [11] :

$$n^4 E_g = k \quad (\text{IV-16})$$

Où la constante $k=108\text{eV}$ est établie par Ravindra et Srivastava [12]

La forme linéaire de Ravindra [13]:

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{IV-17})$$

α et β sont des constantes avec $\alpha = 4.16 \text{ eV}$ et $\beta = -0.85 \text{ eV}^{-1}$

La forme linéaire de Gupta et Ravindra [14]

$$n = \alpha + b E_g \quad (\text{IV-18})$$

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

La relation empirique de Hervé et Vandamme donnée par [15] :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{IV-19})$$

Avec $A = 13.6 \text{ eV}$ et $B = 3.4 \text{ eV}$

La relation de Reddy at Anjaneyulu [16] :

$$E_g e^n = 36.3 \quad (\text{IV-20})$$

La relation empirique de Reddy et Ahmmed [17]:

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154 \quad (\text{IV-21})$$

En utilisant ces six modèles, nous avons calculé l'indice de réfraction des alliages semi-conducteurs $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ et $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ à partir des valeurs de leurs gaps d'énergie qui sont représentés dans les tableaux (IV-2) et (IV-3).

IV-3-1 L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

Nos résultats de calcul de l'indice de réfraction pour chaque modèle sont présentés sur le tableau (IV-4).

Tableau IV-4) Calcul des indices de réfraction de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ en fonction de la composition x du Gallium.

Composition x	n calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vadamme	Reddy et Anjneyulu	Reddy et Ahmmed	
0	2.9962	3.0210	3.2532	3.0384	3.2991	3.5451	3.1 ^{a)}
0.05	3.0031	3.0313	3.2607	3.0454	3.3082	3.5562	
0.1	3.0153	3.0496	3.2740	3.0578	3.3245	3.5763	
0.15	3.0334	3.0757	3.2931	3.0758	3.3484	3.6062	
0.2	3.05772	3.1098	3.3118	3.0996	3.3803	3.6470	
0.25	3.08908	3.1518	3.3486	3.1295	3.4211	3.7007	
0.3	3.12857	3.2018	3.3850	3.1660	3.4720	3.7700	
0.35	3.1777	3.2597	3.4273	3.2096	3.5343	3.8593	
0.4	3.2385	3.3254	3.4752	3.2608	3.6101	3.9750	
0.45	3.31402	3.3989	3.5288	3.3203	3.7023	4.1279	
0.47	3.34920	3.4304	3.5518	3.3466	3.7445	4.2033	

a) Valeur théorique indiquée dans Ref [9]

Pour faire une comparaison, nous avons présenté également la valeur théorique citée dans référence 9, Il en résulte de ces comparaisons que, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique de composé InP est celle donnée par les relations de : Moss, Ravindra et Hervé et Vandamme. Mais il faut dire que le modèle qui donne la valeur la plus proche de la valeur théorique est celui de Hervé et Vandamme.

En raison du manque de données dans la littérature de l'indice de réfraction n du $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ pour l'intervalle de composition x ($0 \leq x \leq 0.47$), les présents résultats seront donc des prédictions.

La figure (IV-5) donne la variation de l'indice de réfraction de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ en fonction de la composition x du Gallium des six modèles, la relation qui relie les deux grandeurs (x et n) est présentée par le fit quadratique d'ordre deux donné par les équations suivante :

$$n = 3.0018 - 0.0793x + 1.7118x^2 \quad (\text{La relation de Moss}) \quad (\text{IV-22})$$

$$n = 3.0209 + 0.1284x + 1.5809x^2 \quad (\text{La relation de Ravindra}) \quad (\text{IV-23})$$

$$n = 3.2531 + 0.0936x + 1.1531x^2 \quad (\text{La relation de Gupta et Ravindra}) \quad (\text{IV-24})$$

$$n = 3.0403 + 0.0273x + 1.3193x^2 \quad (\text{La relation de Hervé et Vandamme}) \quad (\text{IV-25})$$

$$n = 3.3047 - 0.0530x + 2.0748x^2 \quad (\text{La relation de Reddy et Anjaneyulu}) \quad (\text{IV-26})$$

$$n = 3.5613 - 0.3190x + 3.4931x^2 \quad (\text{La relation de Reddy et Ahmmed}) \quad (\text{IV-27})$$

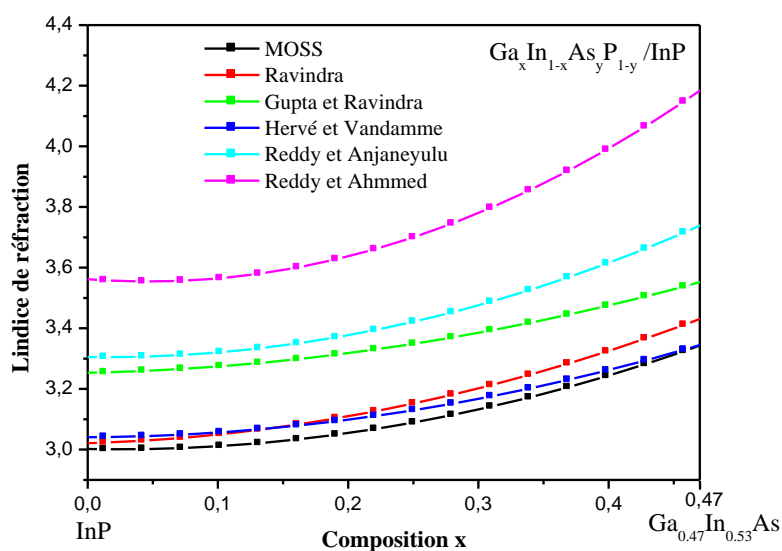


Figure IV-5) La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la composition x de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ des six modèles.

Notons que la variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x présente un comportement monotone pour tous les modèles utilisés. L'augmentation de la concentration x du Gallium entraîne une augmentation monotone de n . Bien que du point de vue qualitatif, les valeurs de n obtenu à partir des six modèles utilisés sont différentes les unes des autres, mais présentent la même tendance. L'augmentation de l'indice de réfraction est directement liée à la diminution du gap en fonction de composition x .

Nous pouvons conclure que dans l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$, le matériau qui a le plus petit gap E_g a la plus grande valeur de n .

IV-3-2 L'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$

Les valeurs d'indice de réfraction d'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ en fonction de x pour tous les modèles sont présentées sur le tableau (IV-5) comparés aux valeurs théoriques.

Tableau IV-5) Calcul des indices de réfraction de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ en fonction de la composition x du Gallium.

Composition x	n calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vadamme	Reddy et Anjaneyulu	Reddy et Ahmmed	
0.52	2.6926	2.4136	2.8102	2.6864	2.8717	3.0898	
0.58	2.7031	2.4405	2.8298	2.6999	2.8873	3.1045	
0.64	2.7188	2.4800	2.8586	2.7200	2.9105	3.1266	
0.70	2.7402	2.5318	2.8964	2.7470	2.9418	3.1569	
0.76	2.7676	2.5955	2.9428	2.7811	2.9817	3.1962	
0.82	2.8018	2.6703	2.9974	2.8225	3.0307	3.2457	
0.88	2.8434	2.7556	3.0596	2.8716	3.0897	3.3072	
0.94	2.8934	2.8502	3.1286	2.9285	3.1594	3.3829	
1	2.9531	2.9530	3.2036	2.9935	3.2411	3.4759	3.3 ^{a)}

^{a)} Valeur expérimentale indiquée dans Réf [10]

Le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique est en utilisant les deux modèles (Gupta et Ravindra), (Reddy et Anjaneyulu). Nous pouvons conclure que le modèle de Reddy et Anjaneyulu donne la valeur qui est la plus proche de la valeur théorique.

En raison du manque de données dans la littérature de l'indice de réfraction n du $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ pour l'intervalle de composition x ($0.52 \leq x \leq 1$), les présents résultats seront donc comme des prédictions.

La dépendance de n de la concentration x du Gallium est montrée dans la figure (IV-6), pour les six modèles envisagés.

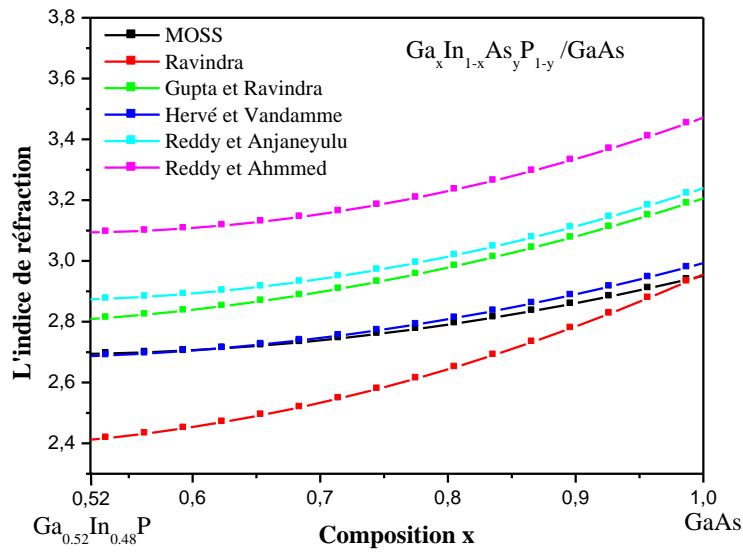


Figure IV-6) La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la composition x de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ des six modèles.

Les équations quadratiques suivantes montrent la variation d'indice de réfraction en fonction de la composition x pour les différents modèles utilisés.

$$n = 2.9154 - 0.924x + 0.9594x^2 \quad (\text{La relation de Moss}) \quad (\text{IV-28})$$

$$n = 2.6153 - 1.1840x + 1.5239x^2 \quad (\text{La relation de Ravindra}) \quad (\text{IV-29})$$

$$n = 2.9576 - 0.8644x + 1.1120x^2 \quad (\text{La relation de Gupta et Ravindra}) \quad (\text{IV-30})$$

$$n = 2.8873 - 0.9165x + 1.0220x^2 \quad (\text{La relation de Hervé et Vandamme}) \quad (\text{IV-31})$$

$$n = 3.1524 - 1.2113x + 1.2978x^2 \quad (\text{La relation de Reddy et Anjaneyulu}) \quad (\text{IV-32})$$

$$n = 3.4686 - 1.5046x + 1.5069x^2 \quad (\text{La relation de Reddy et Ahmmed}) \quad (\text{IV-33})$$

Nous observons que tous les modèles présentent le même comportement, l'augmentation de l'indice de réfraction avec l'augmentation de composition x du Gallium.

L'augmentation de l'indice de réfraction est directement liée à la valeur du gap en fonction de composition x . Il augmente quand le gap diminue.

Nous pouvons conclure que dans l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ le matériau qui a le plus petit gap E_g a la plus grande valeur de n .

IV-4 Etude des propriétés diélectriques

IV-4-1 Constante diélectrique de haute fréquence

Basé sur les valeurs calculées de l'indice de réfraction n obtenu à partir des différents modèles utilisés, la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} a été estimée en utilisant l'expression suivante [18] :

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \quad (\text{IV-34})$$

IV-4-1-1 L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

La variation de la constante ϵ_{∞} pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ avec le substrat InP à partir des différents modèles, pour différentes composition x du Gallium dans l'intervalle ($0 \leq x \leq 0.47$) est présentée dans le tableau (IV-6).

Tableau IV-6) La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ à partir des différents modèles.

Composition x	ϵ_{∞} calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Reddy et Ahmmed	
0	8.9772	9.1264	10.5833	9.2318	10.8840	12.5677	9.20 ^{a)} , 9.9 ^{b)} 9.61 ^{c)} , 9.6 ^{d)}
0.05	9.0186	9.1887	10.6321	9.2744	10.9441	12.6465	
0.1	9.0920	9.3000	10.7190	9.3501	11.0523	12.7899	
0.15	9.2015	9.4599	10.8445	9.4605	11.2117	13.0046	
0.2	9.3496	9.6708	11.0091	9.6075	11.4264	13.3006	
0.25	9.5424	9.9338	11.2131	9.7937	11.7039	13.6951	
0.3	9.7879	10.2515	11.4582	10.0235	12.0547	14.2129	
0.35	10.0977	10.6256	11.7463	10.3015	12.4912	14.8941	
0.4	10.4878	11.0582	12.0770	10.6328	13.0328	15.8006	
0.45	10.9827	11.5525	12.4524	11.0243	13.7070	17.0395	
0.47	11.2171	11.7676	12.6152	11.1997	14.0212	17.6677	

a) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [6]

b) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [19]

c) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [20]

d) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [21]

Nous observons le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique de la constante diélectrique de haute fréquence du composé InP est donné en utilisant les relations Moss et Ravindra et Hervé et Vandamme. Le modèle qui donne la valeur la plus proche de la valeur théorique est le modèle de Hervé et Vandamme.

Pour les valeurs de x différents de zéro, nos résultats sont des prédictions.

La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles est montrée sur la figure (IV-7).

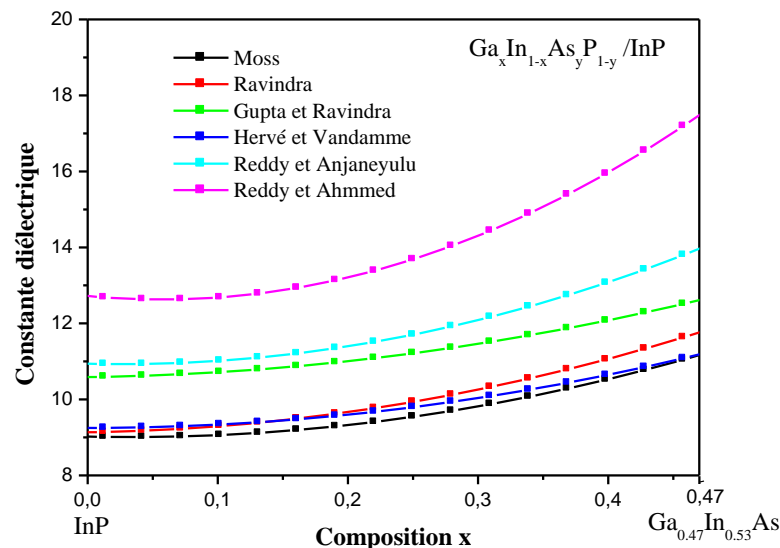


Figure IV-7) La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ des six modèles.

La valeur de ε_∞ dépend du modèle utilisé, il existe une différence quantitative entre les différents modèles.

Nous observons que ε_∞ varie de façon monotone et non linéaire, elle augmente avec l'augmentation de la composition x du Gallium, et le même comportement dans tous les

modèles, Ce comportement est qualitativement semblable à celui de l'indice de réfraction en fonction de la composition x .

Les équations du fit quadratique pour chaque modèle sont données par les expressions suivantes :

$$\varepsilon_{\infty} = 9.0205 - 0.7350x + 11.2790x^2 \quad (\text{La relation de Moss}) \quad (\text{IV-35})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 9.1354 + 0.4879x + 10.8399x^2 \quad (\text{Relation de Ravindra}) \quad (\text{IV-36})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 10.5879 + 0.4561x + 8.1874x^2 \quad (\text{Relation de Gupta et Ravindra}) \quad (\text{IV-37})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 9.2498 - 0.0126x + 8.7701x^2 \quad (\text{Relation de Hervé et Vandamme}) \quad (\text{IV-38})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 10.9356 - 0.7518x + 15.3018x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Anjaneyulu}) \quad (\text{IV-39})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 12.7185 - 3.2364x + 28.4100x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Ahmmed}) \quad (\text{IV-40})$$

IV-4-1-2 L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$

La variation de la constante ε_{∞} pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ avec le substrat GaAs à partir des différents modèles, pour les différentes valeurs de la composition x dans l'intervalle ($0.52 \leq x \leq 1$) est présentée dans le tableau (IV-7).

Tableau IV-7) La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de d'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ à partir des différents modèles.

Composition x	ε_{∞} calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Reddy et Ahmmed	
0.52	7.2500	5.8264	7.8972	7.2167	8.2466	9.5468	
0.58	7.3067	5.9560	8.0077	7.2894	8.3365	9.6379	
0.64	7.3918	6.1504	8.1715	7.3984	8.4710	9.7756	
0.70	7.5086	6.4100	8.3891	7.5460	8.6541	9.9660	
0.76	7.6596	6.7366	8.6600	7.7345	8.8905	10.2156	
0.82	7.8500	7.1305	8.9844	7.9665	9.1851	10.5345	
0.88	8.0849	7.9533	9.3611	8.2460	9.5462	10.9375	
0.94	8.3717	8.1236	9.7881	8.5761	9.9818	11.4440	
1	8.7207	8.7202	10.2630	8.9610	10.5047	12.0818	10.9 ^{a)}

a) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [10]

Notant que les deux modèles (Reddy et Anjaneyulu) et (Gupta et Ravindra) donne la valeur approche de la valeur théorique. Le modèle qui donne la valeur la plus approche de la valeur théorique c'est le modèle de Reddy et Anjaneyulu. Aucune donnée n'est disponible pour ϵ_∞ du $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ($0.52 \leq x \leq 1$) et donc nos résultats sont des prédictions.

Nos résultats sont tracés dans la figure (IV-8).

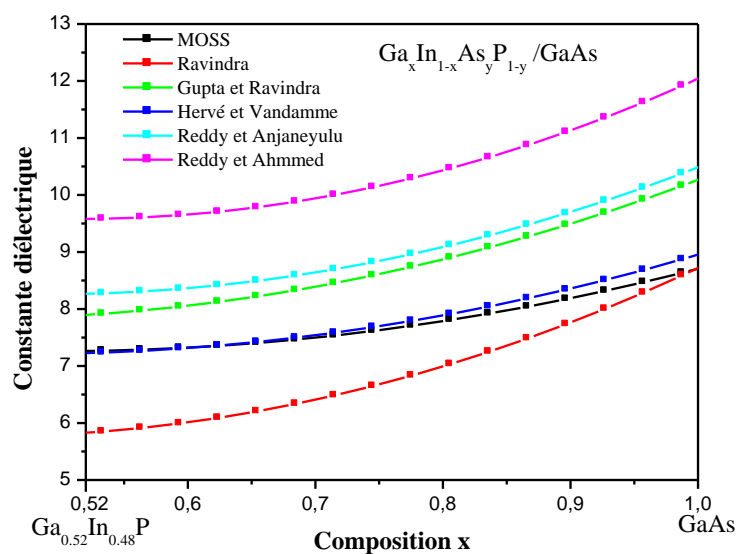


Figure IV-8) La variation de la constante ϵ_∞ Pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ en fonction de la composition x.

La même tendance est observée pour tous les modèles utilisés, l'augmentation de la composition x du Gallium entraîne une augmentation monotone de ϵ_∞ .

La relation qui relie les deux grandeurs (x et ϵ_∞) est présentée par le fit quadratique donné par les équations suivante :

$$\epsilon_\infty = 8.6458 - 5.6013x + 5.6597x^2 \quad (\text{Relation de Moss}) \quad (\text{IV-41})$$

$$\epsilon_\infty = 7.5352 - 8.1244x + 9.3085x^2 \quad (\text{Relation de Ravindra}) \quad (\text{IV-42})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 9.1176 - 6.1405x + 7.2889x^2 \quad (\text{Relation de Gupta et Ravindra}) \quad (\text{IV-43})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 8.5549 - 5.7586x + 6.1557x^2 \quad (\text{Relation de Hervé et Vandamme}) \quad (\text{IV-44})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 10.2441 - 8.1927x + 8.4326x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Anjaneyulu}) \quad (\text{IV-45})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 12.3313 - 10.7076x + 10.4163x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Ahmmed}) \quad (\text{IV-46})$$

IV-4-2 Le constant diélectrique statique

Nous avons également calculé la constante diélectrique statique ε_0 en utilisant le modèle de Harisson suivant : [22]

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_{\infty} - 1} = 1 + \nu \quad (\text{IV-47})$$

Où ν est donné par :

$$\nu = \frac{\alpha_p^2(1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{IV-48})$$

α_p est la polarité obtenue selon la définition de Vogl

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{IV-49})$$

Où $V_S(3)$ et $V_A(3)$ représente les facteurs de formes pseudo-potentiel symétrique et antisymétrique respectivement.

α_c est la covalence définie comme suit :

$$\alpha_c = \sqrt{1 - \alpha_p^2} \quad (\text{IV-50})$$

IV-4-2-1 L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

En utilisant les six modèles, nous avons calculé le constante diélectrique statique ε_0 en fonction de la composition x pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$, Nos résultats sont indiqués dans le tableau (IV-8).

Tableau IV-8) La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

Composition x	ϵ_0 calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Reddy et Ahmmed	
0	14.2516	14.4995	16.9197	14.6746	17.4192	20.2161	11.85 ^{a)} , 12.9 ^{b)} 12.5 ^{c)} , 12.4 ^{d)}
0.05	13.1117	13.3686	15.5488	13.4981	16.0201	18.5915	
0.1	12.3487	12.6404	14.6305	12.7107	15.0979	17.5348	
0.15	11.8497	12.1915	14.0232	12.1923	14.5090	16.8808	
0.2	11.5462	11.9519	13.6423	11.8720	14.1694	16.5367	
0.25	11.4002	11.8767	13.4342	11.7061	14.0318	16.4560	
0.3	11.3906	11.9387	13.3655	11.6692	14.0708	16.6226	
0.35	11.5099	12.1197	13.4144	11.7453	14.2749	17.0508	
0.4	11.7612	12.4081	13.5636	11.9256	14.6477	17.7870	
0.45	12.1609	12.7979	13.8040	12.2074	15.2067	18.9325	
0.47	12.3683	12.9808	13.9239	12.3489	15.4883	19.5457	

a) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [6]

b) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [19]

c) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [20]

d) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [21]

Pour les valeurs de x différents de zéro, nos résultats sont des prédictions.

La figure (IV-9) présenté la variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x pour tous les modèles dans la même courbe.

Notant que le même comportement pour tous les modèles, ce comportement est non linéaire.

Le modèle qui donne la valeur plus proche de la valeur théorique c'est le modèle de Moss.

Les équations du fit quadratique pour tous les modèles sont données comme suit :

$$\epsilon_0 = 14.0865 - 19.4335x + 33.8609x^2 \quad (\text{Relation de Moss}) \quad (\text{IV-51})$$

$$\epsilon_0 = 14.2924 - 18.2166x + 33.3253x^2 \quad (\text{Relation de Ravindra}) \quad (\text{IV-52})$$

$$\varepsilon_0 = 16.6706 - 21.9077x + 34.7995x^2 \quad (\text{Relation de Gupta et Ravindra}) \quad (\text{IV-53})$$

$$\varepsilon_0 = 14.4756 - 19.247x + 31.7871x^2 \quad (\text{Relation de Hervé et Vandamme}) \quad (\text{IV-54})$$

$$\varepsilon_0 = 17.2117 - 23.7933x + 43.2018x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Anjaneyulu}) \quad (\text{IV-55})$$

$$\varepsilon_0 = 20.0706 - 30.3063x + 61.9354x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Ahmmed}) \quad (\text{IV-56})$$

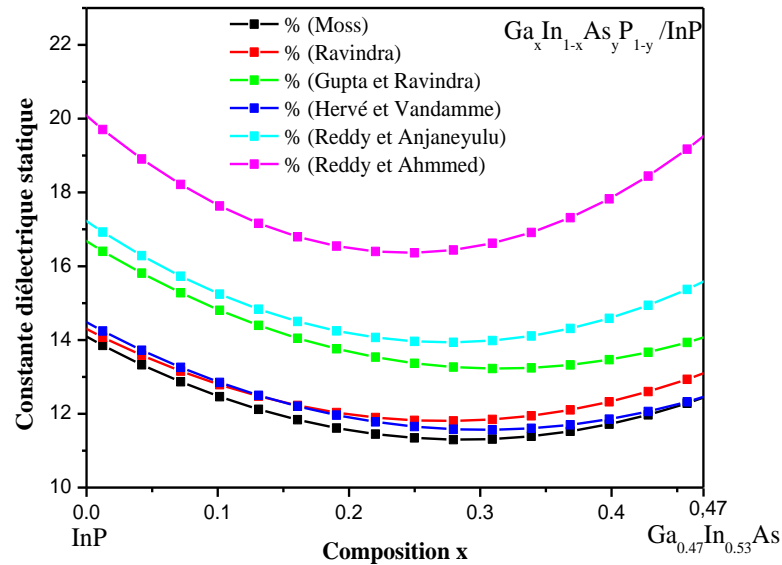


Figure IV-9) La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$

IV-4-2-2 L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$

La variation de la constante diélectrique statique ε_0 en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$, Nos résultats sont donnés dans le tableau (IV-9). Nous avons également présenté la valeur théorique pour une éventuelle comparaison.

Tableau IV-9) La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la composition x du Gallium en utilisant les différents modèles pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$

Composition x	ϵ_0 calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Reddy et Ahmmed	
0.52	9.7092	7.7240	10.6110	9.6628	11.0979	12.9097	
0.58	9.3644	7.5730	10..2941	9.3415	10.7302	12.4562	
0.64	9.1617	7.5766	10.1574	9.1702	10.5398	12.2057	
0.70	9.0738	7.7110	10.1660	9.1202	10.4948	12.1222	
0.76	9.0832	7.9629	10.2975	9.1741	10.5772	12.1856	
0.82	9.1830	8.3235	10.5382	9.3222	10.7779	12.3899	
0.88	9.3708	8.7900	10.8787	9.5612	11.0974	12.7412	
0.94	9.6505	9.3594	11.3127	9.8904	11.5400	13.2558	
1	10.0323	10.0318	11.8367	10.3135	12.1194	13.9645	12.9 ^{a)}

a) Valeur expérimentale indiquée dans Réf [10]

Le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique est estimé en utilisant les deux modèles Gupta et Ravindra et Reddy et Anjaneyulu, Le modèle de Reddy et Anjaneyulu donne la valeur la plus proche de la valeur théorique.

Pour les valeurs de x différents de un, nos résultats sont des prédictions.

Ces valeurs sont données dans la figure (IV-10).

Notons que la variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x du Gallium présente un comportement monotone et non linéaire pour tous les modèles utilisés.

Les équations des fit polynomiaux de deuxième ordre donnant la relation entre x et ϵ_0 sont comme suit :

$$\epsilon_0 = 16.4229 - 20.0823x + 13.7015x^2 \quad (\text{Relation de Moss}) \quad (\text{IV-57})$$

$$\epsilon_0 = 13.4232 - 19.2809x + 15.9066x^2 \quad (\text{Relation de Ravindra}) \quad (\text{IV-58})$$

$$\epsilon_0 = 17.5296 - 21.7653x + 16.1054x^2 \quad (\text{Relation de Gupta et Ravindra}) \quad (\text{IV-59})$$

$$\epsilon_0 = 16.241 - 20.0712x + 14.1611x^2 \quad (\text{Relation de Hervé et Vandamme}) \quad (\text{IV-60})$$

$$\epsilon_0 = 19.2618 - 25.0809x + 17.9468x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Anjaneyulu}) \quad (\text{IV-61})$$

$$\epsilon_0 = 23.0732 - 30.9044x + 21.7859x^2 \quad (\text{Relation de Reddy et Ahmmed}) \quad (\text{IV-62})$$

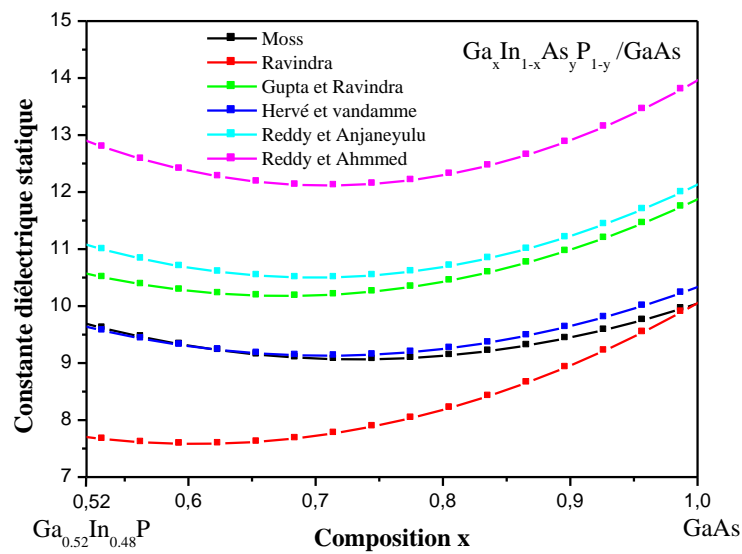


Figure IV-10) La variation du constant diélectrique statique en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l’alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$

Pour étudier le constant diélectrique statique ϵ_0 et la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_∞ , nous avons tracés les deux dans le même courbe pour tous les modèles en fonction de la composition x des alliages $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ et $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$, ces courbes présentes dans les deux figure (IV-11) (IV-12) respectivement.

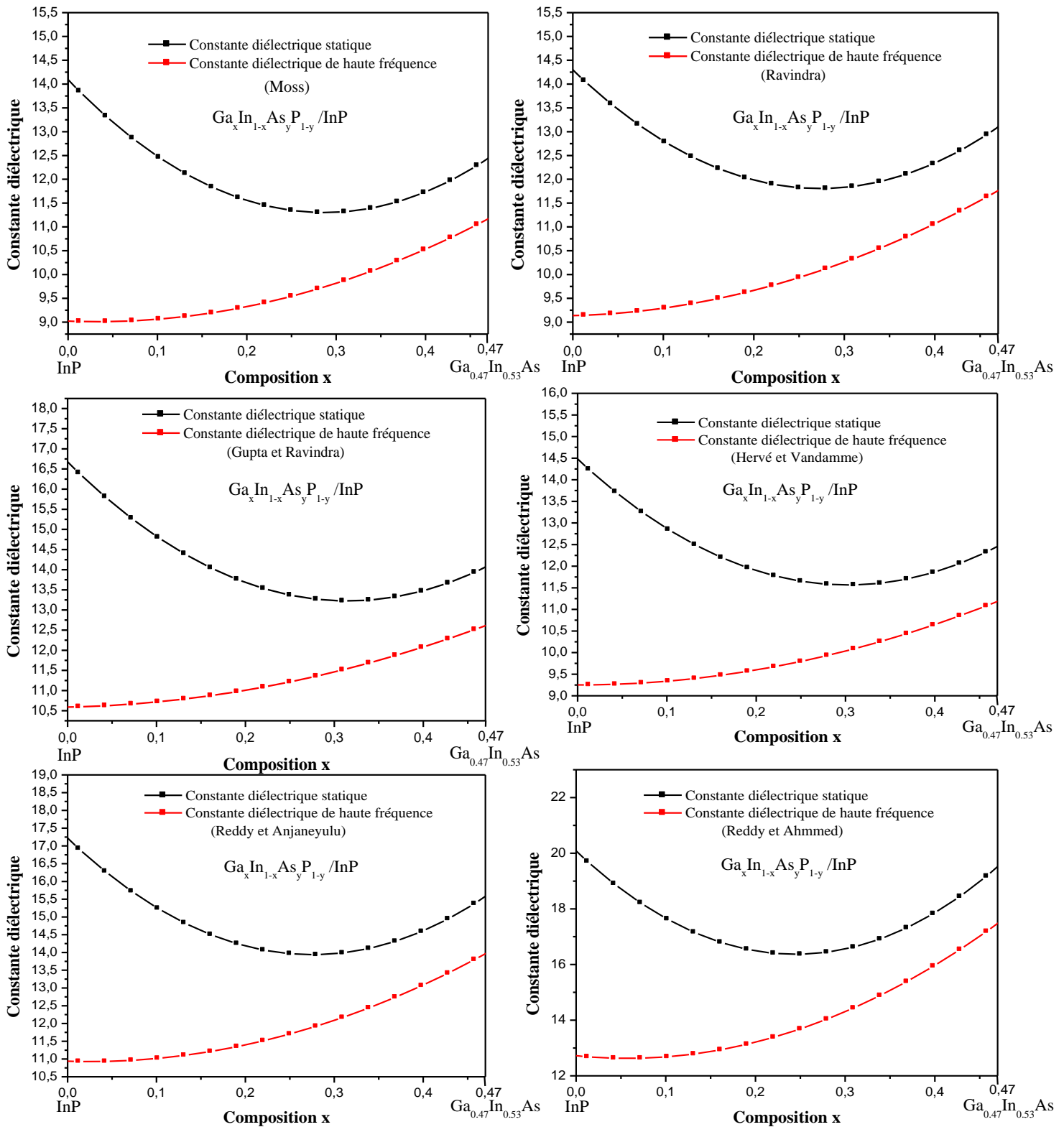


Figure IV-11) La variation des constant diélectrique statique diélectrique de haute fréquence de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ en fonction de la composition x des six modèles.

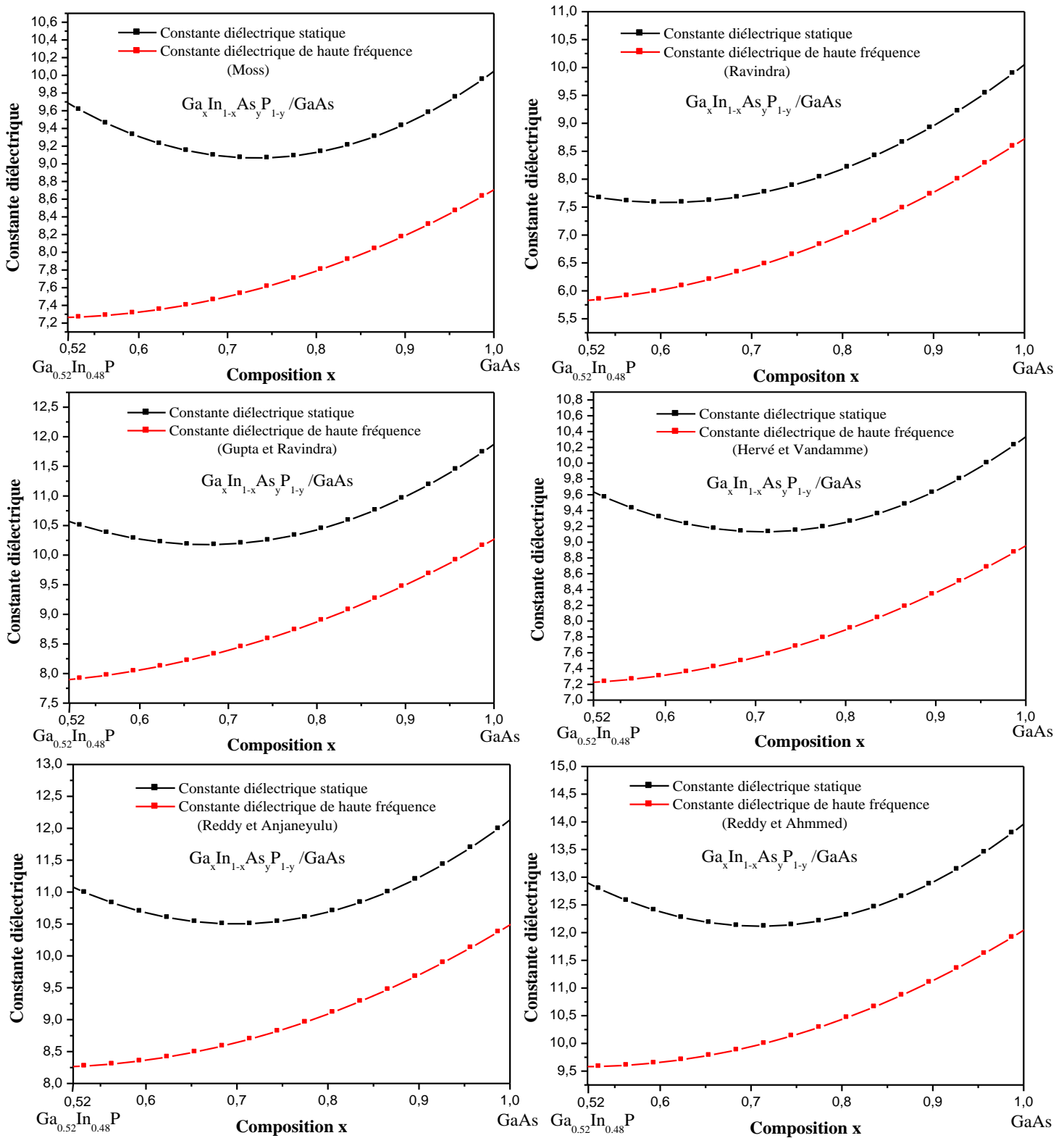


Figure IV-12) La variation des constant diélectrique statique et de haute fréquence de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ en fonction de la composition x des six modèles.

On note que les valeurs de ε_0 et ε_∞ dépend du modèle utilisée, il existe une différence quantitative entre les différents modèles. Nous observons aussi qu'il n'y a pas une différence qualitative entre ces modèles. Quelque soit le modèle utilisé, le comportement des constantes diélectriques ε_0 et ε_∞ en fonction de la composition x du Gallium est le même.

Nous observons que ε_0 varie non linéairement avec x et suit le même comportement qualitatif que celui de ε_∞ .

La tendance de ε_0 et ε_∞ indique que les deux constantes diélectriques augmentent pour des grandes concentrations du Gallium.

D'autre part les tendances de ε_0 et ε_∞ indiquent que le stockage d'énergie électrique et magnétique dans le matériau étudié dépend fortement de la composition x dans l'alliage.

L'augmentation de la constante diélectrique lorsqu'on augmente la composition x indique que la capacité du stockage d'énergie électrique potentiel et la quantité de charge sont augmentés.

IV-5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques telles que le gap énergétique, l'indice de réfraction et les constantes diélectriques statique et de haute fréquence, de l'alliage semi-conducteurs quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats InP et GaAs. Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode empirique des pseudo-potentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la composition x du Gallium.

Dans les deux substrats, le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ est à gap direct pour toutes les concentrations du Gallium.

L'indice de réfraction a été calculé selon six modèles existants, il varie d'une manière monotone et non linéaire en fonction de la composition x du Gallium, Ce comportement est similaire pour la variation des constantes diélectriques statique et de haute fréquence en fonction de la composition x du Gallium.

Références bibliographiques citées dans le chapitre IV

- [1] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [2] N. Bouarissa, M. Boucenna, Phys. Scr. 79 (2009) 015701.
- [3] N. Bouarissa, T. Kobayashi, and H. Nara, Solid. State. Commun. 96 (1995) 689.
- [4] A. Bechiri, effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V. Thèse doctorat. Univ mentouri Algérie (2006).
- [5] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [6] M. Boucenna, N. Bouarissa, F. Mezrag, Composition and lattice mismatch dependent dielectric constants and optical phonon modes of $\text{InAs}_{1-x-y}\text{Sb}_x\text{P}_y$ quaternary system. Phys. 67 (2014) 318-322.
- [7] S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, Wiley, Chichester, (2009).
- [8] N. Bouarissa, Electronic properties of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ from pseudopotential calculations, Phys 124 (2010) 336-341.
- [9] F. Mezrag, Thèse de magister, Univ de m'sila, Algeria (2003).
- [10] F. Mezrag, Optoelectronic and dielectric properties of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ ternary alloys, J Mater Sci (2006) 41:5323–5328.
- [11] T.S. Moss, Proc. Phys. Soc. B 63 (1950) 167.
- [12] N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, Infrared Phy. 19 (1979) 603.
- [13] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [14] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [15] R.R. Reddy, S. Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. (b) 174 (1992) K 91.
- [16] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21.
- [17] R.R. Reddy, Y.N. Ahmed, Infrared Phys. Technol. 36 (1995) 825.
- [18] K. Mohamed Wahiba, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012).
- [19] S. Adachi, Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors (Chichester: Wiley), (2005)
- [20] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (ed.), 1999, Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol.2 (Singapore: World Scientific)
- [21] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Giannozzi, Rev. Mod. Phys. 73 (2001) 515
- [22] S. Yu. Davydov, S.K. Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947.

Conclusion générale

En conclusion, dans ce présent travail nous avons étudié les propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages quaternaires semi-conducteurs déposés sur un substrat : $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ et $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ dans la phase zinc-blende. Toutes ces propriétés ont été examinées en fonction de la composition x du Gallium. Les calculs sont principalement effectués par l'emploi de la méthode du pseudo-potentiel empirique EPM, couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA.

Nos résultats ont montré que pour le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur le substrat InP et le substrat GaAs, tous les gaps d'énergie étudiés varient de façon monotone et non linéaire avec la composition x ($0 \leq x \leq 0.47$) avec ($0 \leq y \leq 1$) pour le substrat InP et ($0.52 \leq x \leq 1$) avec ($0 \leq y \leq 1$) pour le substrat GaAs. Les gaps énergétique direct et indirect sont décroissent avec l'augmentation de la composition x du Gallium.

Les résultats suggèrent que l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ a un gap direct E_{Γ}^{Γ} pour toutes les compositions x , Et que sa valeur varie de 1.3399 eV à 0.8583 eV chaque fois que x varie de 0 à 0.47, et que son écart est considérable par rapport aux gaps E_{Γ}^X et E_{Γ}^L et qu'aucune transition de gaps n'est remarquée.

Dans le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$, l'écart des gaps E_{Γ}^X et E_{Γ}^L est relativement faible, on remarque aussi que le gap direct est le gap fondamental E_{Γ}^{Γ} ce qui permet de conclure que l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ est un semi-conducteur à gap direct. Et que sa valeur varie de 2.0545 eV à 1.41998 eV chaque fois que x varie de 0.52 à 1

Les gaps d'énergie du substrat GaAs sont les plus élevés énergétiquement que les gaps du substrat InP et présente par contre une transition des gaps pour la concentration $x = 0.80$

L'indice de réfraction a été calculé selon six modèles empiriques. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x pour l'alliage semi-conducteur quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposés sur les substrats InP et GaAs montre une augmentation de l'indice de réfraction avec l'augmentation de la composition x du Gallium pour tous les modèles utilisés.

Avec le substrat InP, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique est celle donnée par la relation Hervé et Vandamme, et pour le substrat GaAs le modèle de Reddy et Anjaneyulu donne la valeur qui est la plus proche de la valeur théorique.

Nous pouvons conclure aussi que, l'augmentation de la concentration x du Gallium entraîne une augmentation monotone de n et que le matériau qui a le plus petit gap E_g a la plus grande valeur de n .

Les constantes diélectriques statique et haute fréquence aussi calculés pour six modèles, les valeurs de ε_0 et ε_∞ dépend du model utilisée, il existe une différence quantitative entre les différents modèles mais pas qualitative, quelque soit le model utilisé, leur comportement en fonction de la composition x du Gallium est le même, monotone et non linéaire.

La tendance de ε_0 et ε_∞ indique que les deux constantes diélectriques augmentent pour des grandes concentrations du Gallium.

D'autre part les tendances de ε_0 et ε_∞ indique que le stockage d'énergie électrique et magnétique dans le matériau étudié dépend fortement de la composition x dans l'alliage. L'augmentation de la constante diélectrique lorsqu'on augmente la composition x indique que la capacité du stockage d'énergie électrique potentiel et la quantité de charge sont augmentées.

En raison du manque des données dans la littérature de l'indice de réfraction n et des constantes diélectriques statique et de haute fréquences du $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ pour l'intervalle de composition x ($0 \leq x \leq 0.47$) pour le InP et ($0.52 \leq x \leq 1$) pour le GaAs, les présents résultats seront donc des prédictions.

Le contrôle de ces paramètres en faisant varier la composition x pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ est d'une importance capitale pour la conception de nouveaux dispositifs optoélectroniques.

Figures :

Figure I-1) Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs.....	5
Figure I-2) Les structures des bandes énergétique : Métal, semi-conducteur, isolant.....	6
Figure I-3) Les transitions optique directes et indirectes.....	8
Figure I-4) La transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction.....	9
Figure I-5) Apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente...	9
Figure I-6) Silicium dopé au Phosphore (dopage n) : a $T = 0K$ et b $T \neq 0$	11
Figure I-7) Silicium dopé au Bore (dopage p) : a $T = 0K$ et b $T \neq 0K$	11
Figure II-1) Structure zinc blende référence.....	17
Figure II-2) Les structures Wurtzite et Rocksalt.....	17
Figure II-3) Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel	18
Figure II-4) Structure de bande de GaAs.....	21
Figure II-5) L'absorption fondamentale de la lumière par les porteurs.....	22
Figure II-6) L'émission spontanée.....	23
Figure II-7) L'émission stimulée.....	23
Figure III-1) Le potentiel d'interaction entre deux atomes en fonction de la distance r	34
Figure III-2) L'algorithme du calcul de l'EPM.....	37
Figure IV-1) La variation du gap fondamental (E_{Γ}^{Γ}) en fonction de la composition x du Gallium de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$	44
Figure IV-2) La variation du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) et des gaps indirects (E_{Γ}^X), (E_{Γ}^L) en fonction de la composition x de l'alliage semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$	45
Figure IV-3) La variation du gap fondamental (E_{Γ}^{Γ}) en fonction de la composition x du Gallium de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$	47
Figure IV-4) La variation du gap direct (E_{Γ}^{Γ}) et des gaps indirects (E_{Γ}^X), (E_{Γ}^L) en fonction de la composition x d'alliage semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$	47
Figure IV-5) La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la composition x de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ des six modèles.....	51
Figure IV-6) La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la composition x de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ des six modèles.....	53
Figure IV-7) La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ des six modèles.....	55
Figure IV-8) La variation de la constante ϵ_{∞} Pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ en fonction de la composition x	57

Figure IV-9) La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$60

Figure IV-10) La variation du constant diélectrique statique en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$62

Figure IV-11) La variation des constant diélectrique statique diélectrique de haute fréquence de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ en fonction de la composition x des six modèles.....63

Figure IV-12) La variation des constant diélectrique statique et de haute fréquence de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ en fonction de la composition x des six modèles.....64

Tableaux

Tableau I-1) Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique.....7

Tableau I-2) Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs III-V.....13

Tableau I-3) Quelques exemples des matériaux semi-conducteurs II-VI.....14

Tableau II-1) Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V...19

Tableau II-2) Le paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs II-VI...19

Tableau II-3) L'indice de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs à $T=300k$24

Tableau II-4) La constante diélectrique statique et optique de quelques matériaux semi-conducteurs à $300k$26

Tableau VI-1) Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés $GaAs, InAs, GaP, InP$...42

Tableau IV-2) Les variations des gaps énergétique d'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$43

Tableau IV-3) Les variations des gaps énergétique de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$46

Tableau IV-4) Calcul des indices de réfraction de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ en fonction de la composition x du Gallium.....50

Tableau IV-5) Calcul des indices de réfraction de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ en fonction de la composition x du Gallium.....52

Tableau IV-6) La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ à partir des différents modèles.....54

Tableau IV-7) La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de d'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ à partir des différents modèles.....56

Tableau IV-8) La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la composition x en utilisant les différents modèles pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ 59

Tableau IV-9) La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la composition x du Gallium en utilisant les différents modèles pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ 61

Résumé

Nous rapportons dans ce travail une étude théorique des propriétés électroniques, optiques et diélectriques de l'alliage quaternaire semi-conducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ dans la structure zinc blende déposés sur les substrats InP et GaAs. Ces alliages ont un intérêt important pour la conception des dispositifs optoélectroniques. Les calculs sont principalement basés sur l'approche du pseudo-potentiel empirique avec l'approximation du cristal virtuel VCA.

Nos résultats ont montré qu'en faisant varier la concentration du Gallium, l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ présente un gap direct pour les intervalles $(0 \leq x \leq 0.47, 0 \leq y \leq 1)$ et $(0.52 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1)$ pour les deux substrats InP et GaAs respectivement, ce travail pourrait nous fournir des diverses possibilités pour l'obtention des indices de réfraction et des constantes diélectriques en faisant varier les compositions (x et y). Nos résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles et d'autres sont des prévisions.

Abstract

In this work, we report a theoretical study of electronic, optical and dielectric properties of the alloy quaternary semiconductor $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ in the zinc blende structure lattice matched to InP and GaAs. This alloy have a significant interest to design optoelectronic devices. The calculations are mainly based on the pseudo-potential approach under the virtual crystal approximation VCA.

Our results showed that by varying the Gallium concentration, the alloy $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ present a direct band gap in the range of x and y $(0 \leq x \leq 0.47, 0 \leq y \leq 1)$ and $(0.52 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1)$ lattice matched to InP and GaAs respectively. The present investigation provide more opportunities to obtain diverse refractive indices and dielectric constants while still controlling the composition parameters (x and y). Our results are in a good agreement with the available experimental and theoretical results, and others are predictions.

الملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة نظرية للخصائص الإلكترونية، البصرية والعازلة للسبيكة الرباعية النصف ناقلة $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ والمتبلورة بطور "zinc-blende" المتموضعة على الركيزتين InP و GaAs، هذه السبيكة لها أهمية كبيرة في تصميم الأجهزة الإلكترونية الضوئية. حساباتنا معتمدة اساسا على طريقة شبه الكمون التجريبي المحلي المقرون بتقريب البلورة الافتراضية VCA. تشير النتائج المتحصل عليها مع التغيير في تركيز الجاليوم، الى امتلاك هذه السبيكة مانع طاقي مباشر في المجال $(0 \leq x \leq 0.47, 0 \leq y \leq 1)$ و $(0.52 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1)$ للركيزتين InP و GaAs على التوالي. هذا العمل يعطينا العديد من الاحتمالات للحصول على مؤشرات الانكسار وثوابت العوازل مع التغيير في المركبين (y, x) . النتائج المحصل عليها موافقة للمعطيات التجريبية والنظرية المتوفرة، ونتائج أخرى تعتبر توقعات.