

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj

Faculté des Sciences et de la technologie

Département d'électronique

Mémoire

Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : Electronique

Spécialité : microélectronique

Par

- **Gaidi mohammed El-amine**
- **Drikeche Meftah**

Intitulé

*Etude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé
binaire semi-conducteur InSb*

Soutenu le :

Devant le Jury composé de :

<i>Nom & Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
<i>Dr. L. Dib</i>	<i>MCB</i>	<i>Président</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>Dr.F.Fares</i>	<i>MCA</i>	<i>Encadreur</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>Dr. A. Djemouai</i>	<i>MCA</i>	<i>Examineur</i>	<i>Univ-BBA</i>

Année Universitaire 2021/2022

Dédicaces

Dédicaces

A tous ceux qui nous sont chers.

Remerciements

Remerciements

Nous commençons par remercier « allah » de nous avoir donné la santé, la volonté et la patience pour accomplir cette humble œuvre. Nous remercions sincèrement notre superviseure **Dr. F. FARES** pour nous avoir constamment guidé tout au long du projet et pour son aide, sa disponibilité et ses conseils constructifs.

Nous tenons également à remercier les membres du jury : **Dr. A. Djemouai Dr. L. Dib** et tous les enseignants du département d'électronique.

Nous sommes très reconnaissants à toutes nos familles pour le soutien qu'elles nous ont apporté au fil des ans, en particulier nos chers parents.

Enfin, nous tenons à remercier tous nos amis et toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de cet article.

Tables des matières

Table des matières

Introduction générale.....	1
1. Chapitre 1 : Généralité sur les semi-conducteurs	3
1.1. Introduction :.....	3
1.2. Définition des semi-conducteurs	3
1.3. Quelques notions des semi-conducteurs	4
1.3.1. La notion de bandes d'énergie	4
1.3.2. Bande interdite (gap énergétique).....	4
1.3.3. La conductivité électrique des semi-conducteurs.....	4
1.3.4. La notion d'électron – trous dans les semi-conducteurs	5
1.3.5. La Conduction électrique dans les semi-conducteur	6
1.4. Les différents types des semi-conducteurs.....	7
1.4.1. Les semi-conducteurs intrinsèques.....	7
1.4.2. Les Semi-conducteurs extrinsèques.....	8
1.4.2.1. Les Semi-conducteurs extrinsèques dopés N.....	8
1.4.2.2. Les Semi-conducteurs extrinsèques dopés P	9
1.5. La classification des Semi-conducteur.....	10
1.5.1. Semi-conducteurs élémentaires :.....	10
1.5.2. Semi-conducteurs composés :.....	10
1.6. Les Propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs	11
1.6.1. Propriétés électroniques	11
1.6.2. Propriétés structurales	12
1.6.2.1. Structure Zinc Blende	12
1.6.2.2. La constante de maille.....	12
1.6.3. Propriétés optiques	13
1.6.3.1. Coefficient de réflexion	13
1.6.3.2. L'indice de réfraction.....	13
1.6.3.3. La masse effective	14
1.6.3.4. <i>Propriétés diélectriques</i>	15
a. Le constant diélectrique statique $\epsilon(0)$ et de hautes fréquences $\epsilon(\infty)$	15
b. La relation entre un diélectrique et l'indice de réfraction.	16
1.7. Définition des semi-conducteur III-V.....	17
1.7.1. Présentation des composés binaires InSb.....	18
1.7.2. Intérêt technologique des alliages semi-conducteurs.	19
1.7.3. Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V.....	20

Tables des matières

1.8.	Conclusion	20
2.	Chapitre 2 : Les méthodes de calcul des bandes d'énergies.....	22
2.1.	Introduction.....	22
2.2.	L'équation de Schrödinger	22
2.2.1.	Approximation de Born-Oppenheimer (l'approximation adiabatique)	24
2.2.2.	Approximation du champ auto-cohérent (self-consistent)	25
2.2.2.1.	Approximation de Hartree	25
2.2.2.2.	Approximation de Hartree-Fock.....	26
2.2.2.3.	Approximation de Hartree-Fock-Slater	28
2.2.3.	La méthode de pseudo-potential.....	28
2.2.3.1.	Théorème de Bloch	28
2.2.3.2.	Une base d'onde plane.....	29
2.2.3.3.	L'approximation du cœur gelé	30
2.2.3.4.	Méthode du pseudopotential	31
2.2.4.	Conclusion	33
3.	Chapitre 3 : résultats et discussions	35
3.1.	Introduction :	35
3.2.	Etude des propriétés électroniques :	35
3.2.1.	Les facteurs de forme :	36
3.2.2.	Gap énergétique pour le composé binaire InSb.....	37
3.2.3.	Structure de bandes électroniques	37
3.2.4.	Densité de charge	38
3.3.	Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction)	40
3.4.	Etude des propriétés diélectriques	41
3.4.1.	Le constant diélectrique de haute fréquence	41
3.4.2.	Le constante diélectrique statique ϵ_0	42
3.5.	Conclusion	43
	Conclusion général	45
	Les Références	46
	Résumé	49

Liste des figures

Liste des figures :

FIGURE 1-1	LES DIFFERENTS MATERIAUX.....	3
FIGURE 1-2	LES STRUCTURES DES BANDES ENERGETIQUES : METAL, SEMI-CONDUCTEUR, ISOLANT [11]......	4
FIGURE 1-3	LA DUALITE DE LA CONDUCTIVITE ELECTRIQUE DANS LES SEMI-CONDUCTEURS [4].	6
FIGURE 1-4	L'EVOLUTION DE LA CONCENTRATION DES PORTEURS LIBRES EN FONCTION DE LA TEMPERATURE (CAS DU SILICIUM) [6]	6
FIGURE 1-5	SEMI-CONDUCTEUR INTRINSEQUE.....	7
FIGURE 1-6	LES SEMI-CONDUCTEURS EXTRINSEQUES TYPE N [13]......	8
FIGURE 1-7	LES SEMI-CONDUCTEURS EXTRINSEQUES TYPE P	9
FIGURE 1-8	STRUCTURE DE BANDE A) GAP DIRECT B) GAP INDIRECT.....	11
FIGURE 1-9	STRUCTURE ZINC BLENDE REFERENCE.....	12
FIGURE 1-10	RESEAU TRICLINIQUE PRIMITIF DE L'ESPACE TRIDIMENSIONNEL	13
FIGURE 1-11	LA RELATION ENTRE L'OPTIQUE ET LE DIELECTRIQUE.	16
FIGURE 1-12	STRUCTURE CRISTALLINE DE InSb [13]......	19
FIGURE 2-1	PSEUDISATION DES FONCTIONS D'ONDE DE VALENCE ET DU POTENTIEL [43].....	32
FIGURE 3-1	STRUCTURE DE BANDE ELECTRONIQUE DU COMPOSE BINAIRE InSb	37
FIGURE 3-2	LA DENSITE DE CHARGES ELECTRONIQUES DE LA BANDE DE VALENCE DU COMPOSE BINAIRE InSb.	38
FIGURE 3-3	LA DENSITE DE CHARGES ELECTRONIQUES DE LA PREMIERE BANDE DE CONDUCTION DU COMPOSE BINAIRE InSb.	39

Liste des Tableaux

Liste des tableaux

TABLEAU 1-1 LISTE DE CERTAINS SEMI-CONDUCTEURS.	10
TABLEAU 1-2 CONSTANTES DIELECTRIQUES STATIQUE ET OPTIQUE DE QUELQUES MATERIAUX	16
TABLEAU 1-3 UN EXTRAIT DE CLASSIFICATION PERIODIQUE DES ELEMENTS.	17
TABLEAU 1-4 PROPRIETES DES PRINCIPAUX COMPOSES BINAIRES III-V A 300 K.....	18
TABLEAU 3-1 LES FACTEURS DE FORME PSEUDO-POTENTIELS DE COMPOSE INSb.....	36
TABLEAU 3-2 LES VARIATIONS DES GAPS ENERGETIQUES D'INSb.....	37
TABLEAU 3-3 L'INDICE DE REFRACTION POUR LE COMPOSE BINAIRE INSb	41
TABLEAU 3-4 LE CONSTANT DIELECTRIQUE DE HAUTE FREQUENCE POUR LE COMPOSE INSb ...	41
TABLEAU 3-5 LA VARIATION DE CONSTANT DIELECTRIQUE STATIQUE POUR (INSb).....	42

Introduction

Général

Introduction générale

La science des matériaux joue un rôle très important dans les développements technologiques et ce rôle ne cesse de progresser dans beaucoup de domaines.

Dans le domaine de la physique de l'état solide, les semi-conducteurs sont souvent les plus utilisés dans la technologie de pointe et sont les plus étudiés et en particulier par voie de simulation grâce au progrès technologique des outils informatique (soft & hard).

Les composés semi-conducteurs binaires sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à la richesse de leur propriétés électroniques, optiques, structurales, et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectronique.

L'indium antimonide (InSb) est l'un des matériaux III-V qui a une importance technologique, il est constitué d'antimoine et d'indium.

C'est un composé à gap étroit utilisé comme détecteur infrarouge, notamment en imagerie thermique, dans les systèmes de guidage autodirecteur infrarouge et en les détecteurs à base d'antimoniure d'indium sont sensibles aux longueurs d'ondes comprises entre 1 et 5 μm .

Dans ce présent travail nous avons examiné les propriétés électroniques et optiques ainsi que la constante diélectrique à haute fréquence du semi-conducteur binaire InSb dans la phase zinc-blende.

Le but du travail est l'investigation des paramètres de la structure de bandes électroniques, à savoir les gaps énergétiques, l'indice de réfraction, la constante diélectrique statique.

Le mémoire est organisé de la façon suivante :

Dans le premier chapitre nous présenterons une généralité sur les semi-conducteurs.

Le deuxième chapitre sera consacré aux méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergies électroniques.

Nos résultats sont exposés et discutés dans le troisième chapitre. Notre travail est achevé par une conclusion générale.

Chapitre 1 :

Généralité sur les semi-

conducteurs

1. Chapitre 1 : Généralité sur les semi-conducteurs

1.1. Introduction :

Les semi-conducteurs désignent les matériaux capables de relayer du courant électrique en ayant des propriétés physiques à mi-chemin entre le métal et l'isolant. Ce sont des éléments essentiels de l'électronique et de l'informatique modernes puisqu'ils permettent de contrôler à la fois la direction du courant et son intensité [1].

La famille des semi-conducteurs est très vaste parce que va des éléments du barreau du tableau périodique IV et Ge aux composés de colonnes : quaternaires ternaires, et binaire. Nous allons évoquer en revue dans ce chapitre les plusieurs propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs.

1.2. Définition des semi-conducteurs

Un semi-conducteur est représenté par un corps cristallin dont les spécifications de conductivité électrique sont intermédiaires entre celles liées aux isolants et aux conducteurs, et elles varient plusieurs fois en termes d'amplitude, sous l'influence de:

- la température
- l'éclairement
- la présence d'impuretés (dopage) [2]

La figure 1.1 représente différents matériaux dans la nature

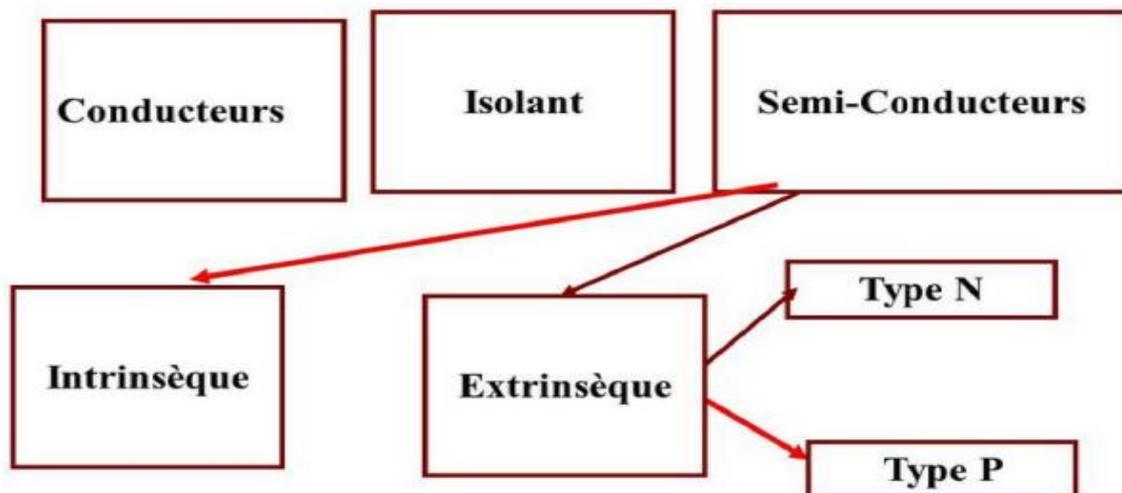


Figure 1:1 Les différents matériaux

1.3. Quelques notions des semi-conducteurs

Un semi-conducteur est un matériau aux propriétés physico-chimiques bien définies qui obéit à des lois typiques qui évoquent tous les éléments et dispositifs dont le fonctionnement est étroitement lié.

1.3.1. La notion de bandes d'énergie

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 nuance des facteurs extérieurs de l'environnement (température, pression...), de la présence des impuretés (dopage, défauts du réseau), et de la lumière [10].

1.3.2. Bande interdite (gap énergétique)

Dans un semi-conducteur comme dans un isolant, la différence d'énergie entre la bande de conduction et la bande de valence est appelée l'expression de la bande interdite, ou l'écart gap noté E_g , exemple, où le porteur de charge ne peut pas se trouver.

C'est un paramètre nécessaire qui détermine les spécifications électroniques et optiques des semi-conducteurs et valorise ainsi son domaine de performance.

Une structure des bandes comparative des trois types de matériaux métal, semi-conducteur et isolant est représentée sur la figure (1.2).

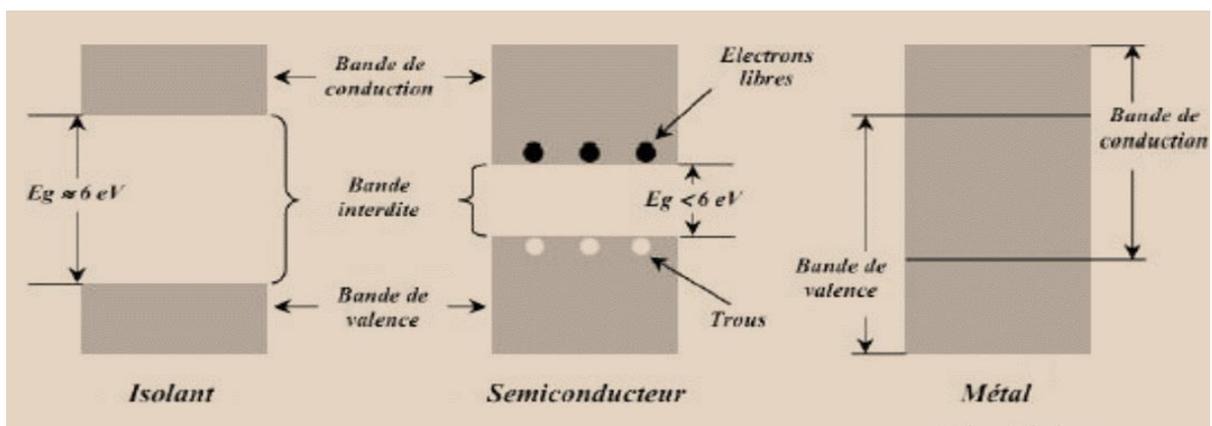


Figure 1:2 Les structures des bandes énergétiques : Métal, semi-conducteur, isolant [11].

1.3.3. La conductivité électrique des semi-conducteurs

Dans le modèle classique, un corps est isolant s'il ne contient pas d'électrons mobiles.

Dans le conducteur, les électrons appartiennent vaguement au noyau et peuvent se déplacer à travers le réseau cristallin. Si n est l'abondance des électrons libres, v leur vitesse moyenne, dans une bande de longueur L , de section S avec une tension V entre les extrémités, alors la densité du courant $J = I/S$ Est égale à $J = n.e.v$.

La vitesse des électrons est proportionnelle à la force à laquelle ils sont Soumis donc a au champ électrique $E = V/L$. Si μ désigne la mobilité, on a : $v = \mu.E$

$$J = n.e.\mu.E = .E = E/\rho$$

Le modèle classique a été remplacé par le modèle quantique des bandes d'énergie. Dans un atome isolé, les électrons occupent des niveaux d'énergie séparés. Dans un cristal, à la suite d'interactions entre atomes, ces taux isolés se dilatent et les électrons occupent des bandes d'énergie admissibles séparées par des bandes interdites. La distribution des électrons dans les taux est régie par les lois de la thermodynamique statistique. Au zéro absolu, il ne remplit que les niveaux d'énergie les plus bas. Dans les isolateurs, les bandes d'énergie inférieures sont complètement pleines. La hauteur de la bande interdite est grande (≈ 5 eV). Il n'y a pas de niveaux d'énergie accessibles et pas de conduction. Par exemple, la Résistivité du diamant est $\rho = 10^{12}\Omega.m$ et celle du mica varie entre $10^{10}\Omega.m$ et $10^{12}\Omega.m$.

Dans les conducteurs, le remplissage complète la dernière plage partiellement occupée : il y a beaucoup de niveaux disponibles et la conductivité est élevée. Pour les métaux qui sont de bons conducteurs, nous obtenons : $\rho_{ag} = 1,6. 10^{-8}\Omega.m$; $\rho_{cu} = 1,7. 10^{-8}\Omega.m$; $\rho_{al} = 2,8. 10^{-8}\Omega.m$

Pour les semi-conducteurs, le taux de remplissage de la dernière bande occupée est soit Très faible soit très important. La hauteur de la bande interdite est faible (≈ 1 eV). La Conduction est faible et varie beaucoup avec la température.

1.3.4. La notion d'électron – trous dans les semi-conducteurs

Les porteurs libres intrinsèques dans un semi-conducteurs est double, soit des électrons (charge négative) soit des trous (charge positive) dont le nombre n_i et p_i est fonction de la température la neutralité du matériau fait que n_i doit être égal a p_i comme le représente la figure ci – dessous [3].

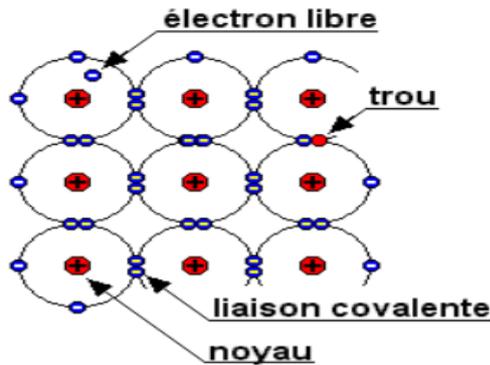


Figure 1:3 La dualité de la conductivité électrique dans les semi-conducteurs [4].

Ce nombre est très faible par rapport au nombre d'atomes par cristal, la conductivité intrinsèque est donc considérée comme faible.

L'augmentation du nombre d'électrons ou de trous peut modifier considérablement les propriétés électriques du semi-conducteur..

1.3.5. La Conduction électrique dans les semi-conducteur

Un semi-conducteur a température 0°K est un isolant et lorsque la température est supérieure à 0K est un métal, lorsque la température est élevée, il devient un conducteur électronique par excitation thermique [5], comme c'est indiqué sur le schéma ci-dessous :

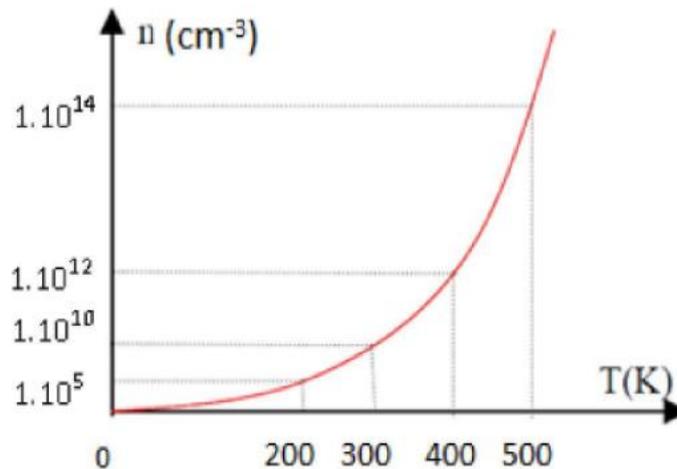


Figure 1:4 L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas du silicium) [6]

Si la liaison de valence est rompue (agitation thermique, photons, etc.), l'électron devient mobile : il laisse un excès de charge positive dans le "trou" (représenté par un + dans un carré). Cet espace va être comblé par les électrons voisins libérés par l'agitation thermique,

qui vont alors laisser un trou : ceux-ci semblent se déplacer dans le réseau. Les électrons (masse positive, charge négative) correspondent aux trous (masse négative, charge positive). Le mouvement des trous étant un processus en deux étapes, leur mobilité dans le réseau est inférieure à celle des électrons. Les trous et les électrons constituent des porteurs libres intrinsèques dont le nombre dépend de la température. L'électro-neutralité d'un matériau nécessite le même nombre de trous et d'électrons (n_i et p_i).

La conductivité intrinsèque du matériau $\sigma = e(n_i \mu_n + p_i \mu_p)$ est très faible.

1.4. Les différents types des semi-conducteurs

Par son habilité à conduire le courant, un Semi-Conducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant. Un semi-conducteur à l'état pur (intrinsèque) n'est pas bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le silicium, le germanium et le carbone [7].

Il existe deux types de semi-conducteurs, l'un pur dit intrinsèque et l'autre dopé appelé extrinsèque.

1.4.1. Les semi-conducteurs intrinsèques

Ce sont des semi-conducteurs très purs et très bien cristallisés présentant un réseau cristallin parfaitement périodique tout en ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour 10¹³ atomes de l'élément semi-conducteurs) ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température, la figure ci-dessous donne un résumé global des semi-conducteurs intrinsèques du point de vue structure de bandes et distributions des charges [8].

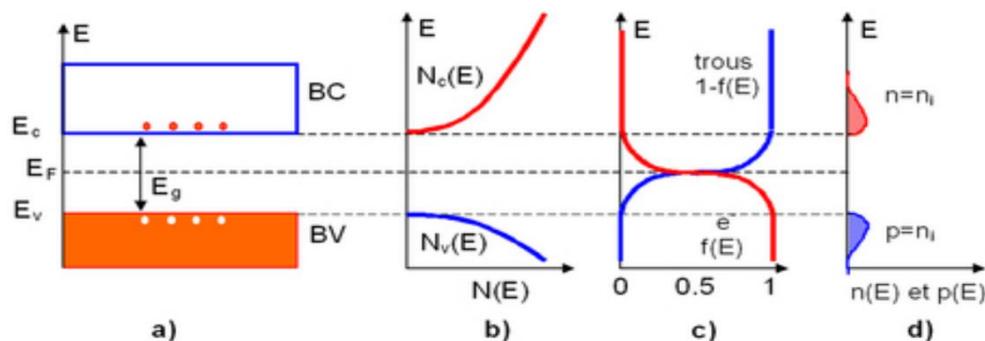


Figure 1:5 Semi-conducteur intrinsèque.

Et: a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'états énergétique c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques des porteurs (les densités des porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées) [9].

1.4.2. Les Semi-conducteurs extrinsèques

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques (diodes, transistors, etc...) et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, etc...).

1.4.2.1. Les Semi-conducteurs extrinsèques dopés N

On introduit dans la matrice de silicium des atomes d'impuretés pentavalents tels que le phosphore P, l'arsenic As et l'antimoine Sb. Chaque atome d'impureté amène un électron de valence supplémentaire. Cet électron est peu lié au noyau ($E \approx 0,01$ eV) et passe aisément dans la bande de conduction. La conductivité du matériau (conductivité extrinsèque) devient à cause du taux de dopage, très supérieure à celle du matériau pur. Les atomes pentavalents ou donneurs deviennent des ions positifs après le passage des électrons excédentaires dans la bande de conduction [12].

Ceci qui augmente considérablement la conductivité du matériau dopé les charges négatives (électrons) sont dits majoritaires, comme on peut le voir dans la figure suivante.

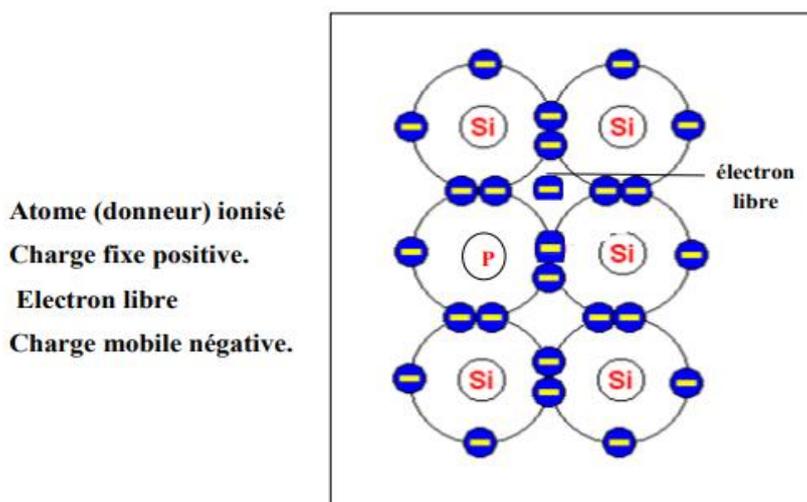


Figure 1:6 Les semi-conducteurs extrinsèques type N [13].

Les données numériques montrent que le nombre des électrons dans le matériau, Fonction du taux de dopage, est supérieur au nombre des trous, fonction de la température, d'un facteur supérieur à 10^3 . La conduction dite de type N (négative) est assurée par des électrons. Les électrons sont les porteurs majoritaires [14].

1.4.2.2. Les Semi-conducteurs extrinsèques dopés P

Dans ce cas, nous avons introduit des atomes trivalents tels que : Bore B, Aluminium Al, Gallium Ga, Indium In.

Il manque alors à l'impureté un électron de valence pour assurer les 4 liaisons avec l'atome de silicium adjacent. Un faible apport d'énergie ($E = 0,05 \text{ eV}$) suffit pour que les électrons du silicium voisin soient piégés par les impuretés : des trous faiblement liés se forment et donc se déplacent. Les atomes trivalents (accepteurs) deviennent des ions négatifs en capturant des électrons. Compte tenu du niveau de dopage, ces trous dépassent largement les porteurs intrinsèques des cristaux purs. La conduction extrinsèque de type P (positive) est augmentée et fournie par des trous. Les trous deviennent majoritaires, et le graphique ci-dessous illustre bien ce phénomène.

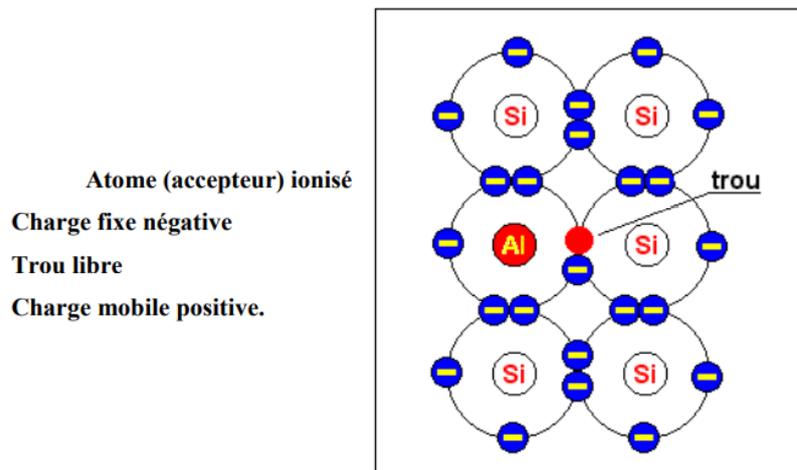


Figure 1:7 Les semi-conducteurs extrinsèques type P

1.5. La classification des Semi-conducteur

Le germanium et le silicium sont les Semi-conducteurs typiques et leur technologie était la plus ancienne et la plus maitrisé, ils sont tétravalents appartenant à la colonne IVB du tableau périodique [15].

Les matériaux semi-conducteurs les plus communs sont des solides inorganiques cristallins tels que :

1.5.1. Semi-conducteurs élémentaires :

- Complexes : Se (colonne VI)
- Simples : In, Sb (colonne IV)

1.5.2. Semi-conducteurs composés :

- Alliages quaternaires: GaInAsP (diodes lasers).
- Binaires : GaAs (meilleur émetteur de lumière que le Si), GaN, SiGe, InSb...
- Alliages ternaires : $Al_xGa_{1-x}As_y$ (dispositifs optoélectroniques comme les diodes lasers, transistors particuliers).

Plus récemment, certains solides organiques (notamment utilisés pour des écrans D'affichage souples). On peut classer suivant les groupes des atomes qui les composent comme l'explique la figure ci-dessous. On trouve une très grande variété de matériaux semi-conducteurs, construits avec des liaisons covalentes (éléments du groupe IV), ou des liaisons qui deviennent de plus en plus ioniques quand on s'éloigne du groupe IV [16].

Tableau 1-1 liste de certains semi-conducteurs.

Colonne	semi-conducteurs
IV	Ge, Si
III-V binaire	GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb
III-V Ternaire	$Al_xGa_{1-x}As_y$, $GaAs_yP_{1-y}$
III-V Quaternaire	$Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$
II-V binaire	CdS, HgTe, CdTe, ZnTe, ZnS

II-V Ternaire	$Cd_xHg_{1-x}Te$
III-V/II-VI quasibinaire	$(GaP)_{1-x}(ZnSe)_x$
III-V/III-V	$(GaAs)_{1-x}(InAs)_x$

1.6. Les Propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs

1.6.1. Propriétés électroniques

Le comportement des semi-conducteurs, comme les métaux et les isolants, est décrit par la théorie des bandes.

Le modèle stipule que les électrons dans un solide ne peuvent prendre que des valeurs d'énergie contenues dans un certain intervalle, ces intervalles sont appelés "bandes d'énergie", plus précisément des bandes d'énergie admissibles, et d'autres "valeurs d'énergie" entre elles appelées bandes séparées par ". Deux bandes d'énergie autorisées jouent un rôle particulier : la "bande de valence" et la "bande de conduction".

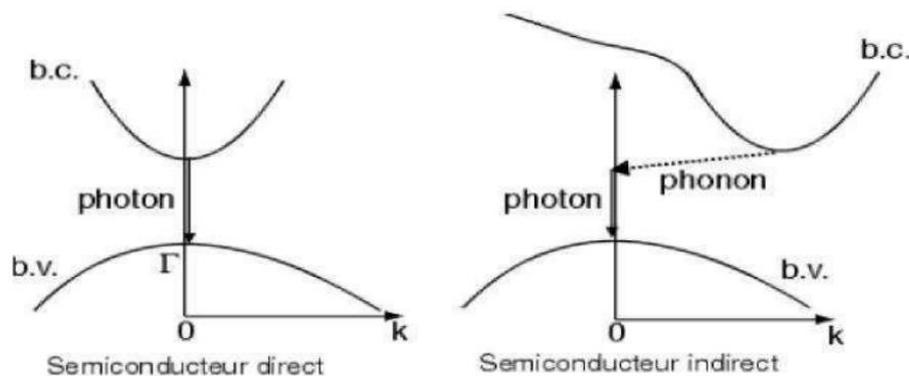


Figure 1:8 Structure de bande a) gap direct b) gap indirect

La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semi-conducteur : Diagramme E (Énergie) - k (Vecteur d'onde). Ce diagramme permet de définir spatialement les extrêmes des bandes de conduction et de valence. Ces extrêmes représentent, dans un semi-conducteur à l'équilibre, des domaines énergétiques où la densité de porteurs type p pour la bande de valence et type n pour la bande de conduction sont importantes.

1.6.2. Propriétés structurales

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. [18][19]

1.6.2.1. Structure Zinc Blende

La majorité des matériaux semi-conducteurs binaires ont une structure Zinc-Blende(ZB). Cette disposition, qui ressemble à un diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées.

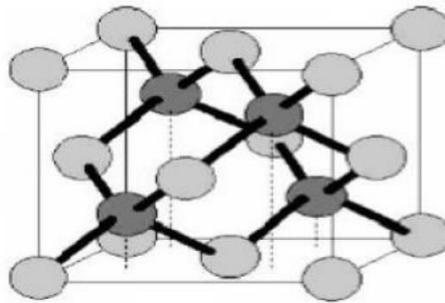


Figure 1:9 Structure zinc blende référence

Comme nous pouvons le voir sur la figure 1.9, 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).

1.6.2.2. La constante de maille

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

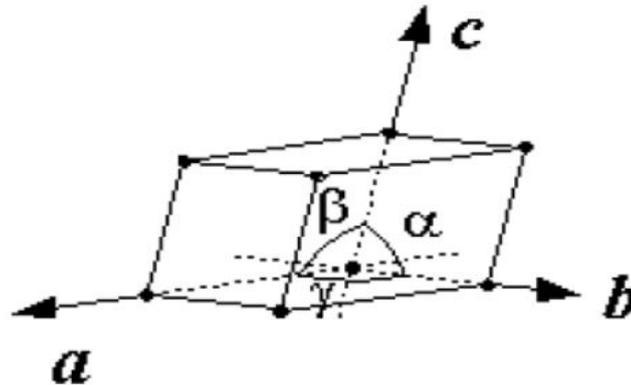


Figure 1:10 Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel

1.6.3. 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 [19].

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.

1.6.3.1. Coefficient de réflexion

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 [19] :

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2} \quad (1.1)$$

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

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (1.2)$$

1.6.3.2. 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 [20]

$$n(\omega) = n_r(\omega) + i\kappa(\omega) \quad (1.3)$$

$n_r(\omega)$: Etant l'indice de réfraction réelle.

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

1.6.3.3. La masse effective

Les électrons dans la bande de conduction sont caractérisés par une fonction d'onde qui est la somme de Bloch des orbitales antis liantes. Dans le cas d'une particule, il s'agit d'une particule dans un potentiel de cristallisation. Cette particule quasi-libre de charge $-e$ et de masse m_0 est représentée par une particule quasi-libre de charge $-e$ et de masse m_e , appelée masse effective de l'électron.

Approximation harmonique est un développement de Taylor jusqu'au second ordre en k , soit :

$$E(k) \approx E(k_0) + \left(\frac{d^2E(k)}{dk^2}\right)_{k=k_0} (k - k_0)^2 \quad (1.4)$$

$$(k - k_0)^2 = E(k_0) + A(k - k_0)^2 \quad (1.5)$$

Où A est une constante le fait que $E(k)$ soit minimum en $k=k_0$ entraîne que $A>0$ et que le terme linéaire. Du développement soit nul.

La masse effective de l'électron par la relation :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*e} = A = \left(\frac{d^2E(k)}{dk^2}\right)_{k=k_0} \quad (1.6)$$

Soit :

$$\left(\frac{1}{m^*e}\right) = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d^2E(k)}{dk^2}\right)_{k=k_0} \quad (1.7)$$

Et écrire :

$$E(k) \approx E(k_0) + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*e}\right) (k - k_0)^2 \quad (1.8)$$

La vitesse de groupe au voisinage de $k=k_0$ vaut alors :

$$Vg = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} E(k) \approx \frac{\hbar(k - k_0)}{m_e^*} \quad (1.9)$$

La masse effective dépend de l'énergie d'interaction avec son environnement, donc de k .

1.6.3.4. Propriétés diélectriques

Un matériau est dit diélectrique si, par définition, ses électrons ne peuvent pas parcourir de longues distances (macroscopiquement). En d'autres termes, c'est un milieu qui ne peut pas conduire le courant.

a. Le constant diélectrique statique $\epsilon(0)$ et de hautes fréquences $\epsilon(\infty)$

Le constante diélectrique, également appelée permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Il a une influence importante sur les propriétés physiques des solides. Elle intervient dans de nombreux domaines, notamment dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétiques, notamment en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, de la réflexion et de l'absorption de la lumière.

Autrement dit, les excitations propres d'un matériau sont décrites par la fonction Diélectrique $\epsilon(\omega, k)$, cette fonction dépend essentiellement de la fréquence et du vecteur d'onde k [30].

Pour les petites valeurs de k , la fonction sera simplement une fonction de fréquence. Par conséquent, nous discuterons de la permittivité statique correspondant à l'équilibre thermodynamique et de la permittivité correspondant à la limite haute fréquence $\epsilon(\infty)$; également appelée permittivité optique. Elle a été définie pour tenir compte de la contribution du cortège électronique des ions.

Le tableau 1.2, présente des valeurs expérimentales $\epsilon(0)$ de et $\epsilon(\infty)$ pour quelques matériaux semi-conducteurs à température ambiante.

Tableau 1-2 Constantes diélectriques statique et optique de quelques matériaux

Matériau	Constante diélectrique statique $\epsilon (0)$	Constante diélectrique optique $\epsilon (\infty)$
Si	11.7	11.7
Ge	15.8	15.8
InSb	17.7	15.6
InAs	14.9	12.3
InP	12.4	9.6
GaAs	12.9	10.9
GaSb	16.1	14.4
GaP	10.7	8.5

b. La relation entre un diélectrique et l'indice de réfraction.

En frappant un matériau diélectrique avec un rayon avec un certain angle, plusieurs phénomènes se produisent en se basant sur les principes de l'optique, et la réaction du matériau dépendra énormément de sa nature comme le montre la figure ci-dessous [17].

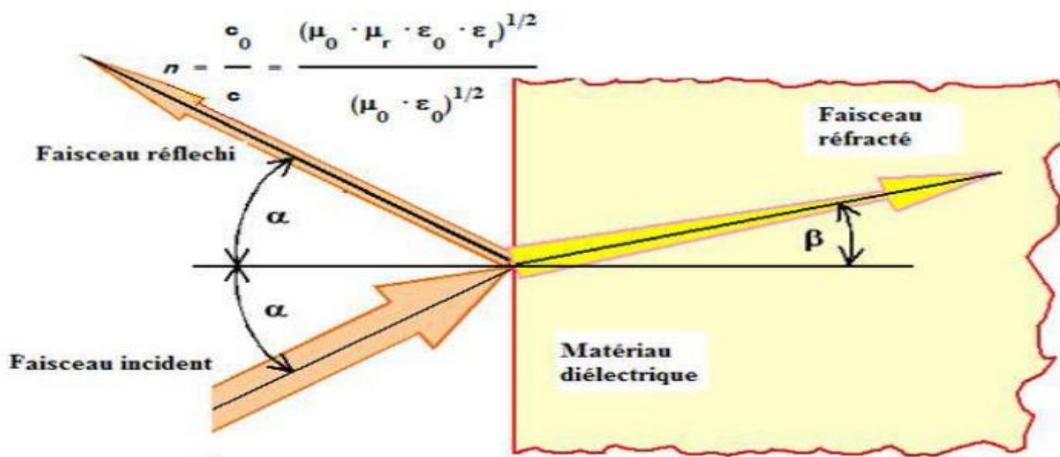


Figure 1:11 La relation entre l'optique et le diélectrique.

Sachant que l'indice de réfraction n est proportionnel à la racine carrée du Constant diélectrique ϵ comme suit :

$$n = \varepsilon^{\frac{1}{2}} \quad (1.10)$$

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

$$n^* = n + jk \quad (1.11)$$

1.7. Définition des semi-conducteur III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la IIIème colonne et d'un élément de la Vème colonne de la classification périodique de mendeleiev.

On peut obtenir un semi-conducteur si la somme des électrons des deux espèces est égale à 8 électrons. [25]

Le tableau (1.3) regroupe un extrait de classification périodique des éléments.

Les chiffres représentent le nombre atomique de matériaux. Qui permet tant de connaître les composés et alliages possible. Par exemple :

- In : Le nombre d'électron de valence est 3 électrons.
- Sb : Le nombre d'électron de valence est 5 électrons.

Donc : In + Sb = InSb : est un semi-conducteur car la somme des électrons des deux espèces (In et Sb) est égale à 08 électrons. Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés. [24]

Tableau 1-3 un extrait de classification périodique des éléments.

III	IV	V
B ₅	C ₆	N ₇
Al ₁₃	Si ₁₄	P ₁₅
Ga ₃₁	Ge ₃₂	As ₃₃
In ₄₉	Sn ₅₀	Sb ₅₁
Tl ₈₁	Pb ₈₂	Bi ₈₃

Le tableau (1.4) présente quelque semi-conducteurs binaire en donnant leur énergie de la bande interdite E_g , la masse effective des électrons du bas de la bande de conduction en

fonction de la masse de l'électron m^*/m_0 , la mobilité électronique à champ faible u et les paramètres cristallins a et c dans le cas du GaN : [23]

Tableau 1-4 propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K.

Composé III-V	E_g (ev)	m^*/m_0	u (cm ² /Vs)	a (Å°)
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
GaN	3.36	0.19	380	$a = 3.189$ $c = 5.185$
Gap	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Comme on peut le voir dans le tableau ci-dessus, plusieurs combinaisons binaires sont possibles, mais chaque combinaison a ses propres propriétés. L'étude de la structure de bande montre que les éléments les plus légers comprennent le bore, l'aluminium, l'azote... donnant des composés à large bande interdite avec des structures de bandes indirectes dans lesquelles la masse effective des électrons est élevée, ce qui est le cas pour le GaP.

De tels matériaux on peut d'intérêt pour l'électronique rapide [21]. Alors que les éléments les plus lourds incluant l'antimonide, le thallium... donnent un composé à courte bande interdite avec une structure de bande directe, c'est le cas du GaSb et InSb. Ces derniers ont des propriétés très intéressantes surtout dans l'électronique rapide et l'optoélectronique [22].

1.7.1. Présentation des composés binaires InSb

InSb : L'antimoniure d'indium (InSb) est un semi-conducteur composé III-V composé d'antimoine et d'indium. Il s'agit d'un composé à espace étroit couramment utilisé comme détecteur infrarouge, en particulier dans l'imagerie thermique, les systèmes de guidage infrarouge et l'astronomie infrarouge. Les détecteurs à base d'antimoniure d'indium sont :

Sensibles aux longueurs d'ondes comprises entre 1 et 5 μm . D'une structure de type «zinc-blende », c'est-à-dire deux mailles cubique faces centrées (cfc) de chacun des deux composants

Imbriquées et décalées d'un vecteur $(1/4 ; 1/4 ; 1/4)$ [13]. Illustré dans la figure suivante

:

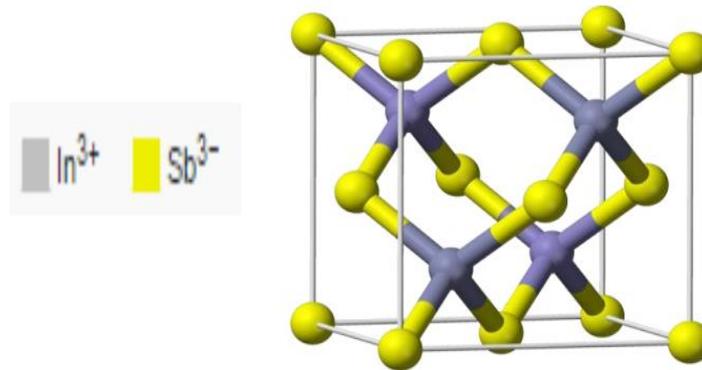


Figure 1:12 : Structure cristalline de InSb [13]

1.7.2. Intérêt technologique des alliages semi-conducteurs.

Tous les composés binaires possibles n'ont pas le même intérêt potentiel. Par exemple, des études de ses propriétés, notamment de la structure des bandes, ont montré que les éléments les plus légers donnent naissance à des composés à larges bandes interdites, dont les propriétés sont proches de celles des isolants. Les composés tels que le bore, l'aluminium ou l'azote et le phosphore de gallium entrent dans cette catégorie, qui sont peu d'intérêt pour l'électronique rapide, les porteurs de charge ou ceux nécessitant une structure de bande directe pour des transitions optiques efficaces nécessitant des semi-conducteurs à mobilité cellulaire élevée. A l'autre extrémité, des éléments lourds comme le thallium ou le bismuth etc. Des composés à caractère métallique sont donnés par ces éléments. On considérera donc principalement des composés à base de gallium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes..

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

1.7.3. Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V

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

1.8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mentionné quelques propriétés générales des matériaux semi-conducteurs.

On a déterminé ses structures électroniques et atomiques.

Chapitre 2 :
Les méthodes de calcul des
bandes d'énergies

2. Chapitre 2 : Les méthodes de calcul des bandes d'énergies

2.1. Introduction

Des expériences sont nécessaires pour comprendre le lien entre les interactions entre particules au sein d'un solide et les propriétés observées [28]. Il est aussi important de recourir à une modélisation, c'est-à-dire à l'élaboration de théories qui permettent non seulement de mieux comprendre les propriétés de ces composés mais aussi de les prédire. Ainsi, on peut proposer et évaluer des structures de solides ayant une dureté et une inertie chimique proche du diamant ou supérieure. On peut aussi simuler par exemple différentes compositions chimiques d'alliages pour avoir des semi-conducteurs ayant des mobilités électroniques très élevées et à gap direct qui correspondrait à une fréquence ou couleur bien choisie pour l'utiliser dans les lasers, les photo-détecteurs, ...etc.

Donc pour comprendre les différentes propriétés physiques ; il est nécessaire d'étudier le milieu dans lequel se déplacent les électrons. Cette étude est reliée aux méthodes de calculs.

En général, vu la complexité des solides, résultant de l'interaction d'un grand nombre de particules, il est indispensable de recourir à des approximations. Au cours de ce deuxième chapitre, nous présenterons tout d'abord des généralités au traitement quantique non relativiste

D'un système composé de plusieurs particules puis nous aborderons les deux grandes familles de calculs quantiques : l'approximation de Hartree et Hartree-Fock, d'une part, et la théorie de la fonctionnelle de la densité d'autre part. Davantage, la méthode de pseudo potentiel est ainsi exposée en détail dans ce chapitre.

2.2. L'équation de Schrödinger

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger (1887-1961) en 1926 a proposé une équation pour déterminer la fonction d'onde d'un système. Elle permet de trouver les énergies et les fonctions d'onde associées aux régimes stationnaires d'un système donné.

Le calcul de l'énergie totale d'un système composé d'ions et d'électrons en interaction est obtenu dans le cas général par résolution de l'équation de Schrödinger des états stationnaires.

Tout corps cristallin peut être considéré comme un système unique composé de particules légères (électrons) et lourdes (noyaux). L'état stationnaire des particules est décrit par l'équation de Schrödinger :

$$\bullet \hat{H}\Psi (R, r) = E\Psi (R, r) \quad (2.1)$$

$$\bullet \Psi (R, r) = \Psi (r_1, r_2, r_3, \dots R_1, R_2, \dots) \quad (2.2)$$

Où \hat{H} est l'hamiltonien du cristal qui contient tous les termes d'énergie (énergie cinétique et potentielle), aussi bien ceux apportés par les noyaux ($N\alpha$) que ceux apportés par les électrons (Ne). E est l'énergie totale du cristal, et Ψ est la fonction d'onde du système, fonction des coordonnées des noyaux et des électrons, et contient toute l'information du système [29].

r_i ($i=1\dots Ne$) et R_i ($i=1\dots N\alpha$) représentent les coordonnées des électrons et des noyaux respectivement.

L'opérateur hamiltonien comprend toutes les formes d'énergie notamment :

1) l'énergie cinétique totale de noyaux :

$$\bullet T_z = \sum_{\alpha} T_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_{\alpha}}{2 M_{\alpha}} \right) \quad (2.3)$$

Avec \hbar : Représente le constant de Planck, M_{α} est la masse du noyau

2) L'énergie cinétique totale des électrons :

$$\bullet T_e = \sum_i T_i = \sum_{i=1}^{Ne} \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) \quad (2.4)$$

Avec : m est la masse de l'électron.

3) l'énergie d'interaction des noyaux deux par deux

$$\bullet U_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} U_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{|R_{\alpha} - R_{\beta}|} \quad (2.5)$$

Avec : Z_{α} et Z_{β} sont la charge des noyaux α et β .

4) l'énergie d'interaction des électrons deux par deux :

$$\bullet Ue = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} Uij = \frac{1}{2} \sum_{i, i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.6)$$

5) l'énergie D'interaction noyaux-électrons :

$$\bullet Uez = - \sum_{i=1}^{Ne} \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} \frac{Z\alpha e^2}{|r_i - R\alpha|} = \sum_{i=1}^{Ne} \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} Uia \quad (2.7)$$

Alors l'équation de Schrödinger pourra Donc être représentée sous la forme :

$$(Te + Tz + Ue + Uz + Uez) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \quad (2.8)$$

On trouve dans un cm³, d'un solide cristallin près de 10²² atomes, implique 3(Z+1) N α variables, alors il est plus qu'évident que l'on ne saurait obtenir une solution de cette équation car il s'agit d'un problème à N corps qui n'est résolu qu'en moyennant un certain nombre d'approximations.

2.2.1. Approximation de Born-Oppenheimer (l'approximation adiabatique)

La première approximation que nous pouvons faire a été élaborée conjointement par Born et Oppenheimer en 1927 [30], Les noyaux sont beaucoup plus lourds que les électrons. Ceci nous permet de découpler le mouvement des électrons de celui des noyaux, c'est ce que l'on appelle l'approximation de Born-Oppenheimer. Dans cette approximation, le problème standard de la chimie quantique est d'obtenir les états propres de l'hamiltonien électronique, qui n'agit que sur les variables électroniques.

Compte tenu de ce que Tz = 0 et Uz = cte ; nous pouvons définir une fonction d'onde ψ_e comme fonction d'onde des électrons, et un nouveau hamiltonien, c'est l'hamiltonien des électrons qui est donnée par :

$$\bullet He = Te + Ue + Uez. \quad (2.9)$$

L'équation de Schrödinger électronique peut s'écrire alors comme suit :

$$\bullet H\psi_e = Ee \psi_e \quad (2.10)$$

$$\left(\sum_{i=1}^{Ne} \frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i, i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^{Ne} \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} \frac{Z\alpha e^2}{|r_i - R\alpha^0|} \right) \psi(r, R\alpha^0) = Ee(R\alpha^0) \psi(r, R\alpha^0) \quad (2.11)$$

Dans cette équation comme dans l'expression de Ψ_e , le R_a^0 figure non plus comme une variable mais plutôt comme un paramètre et E_e représente l'énergie des électrons qui se meuvent dans le champ créé par des noyaux fixes.

Cette approximation réduit de manière significative le nombre de variables nécessaires pour décrire la fonction Ψ . Mais elle ne suffit cependant pas seule à résoudre l'équation de Schrödinger, à cause de la complexité des interactions électron-électron. C'est pourquoi elle est très souvent couplée à l'approximation de Hartree.

2.2.2. Approximation du champ auto-cohérent (self-consistent)

2.2.2.1. Approximation de Hartree

La résolution de l'équation (2.11) est impossible du fait d'un grand nombre de particules mis en jeu. Le traitement consiste à réduire le problème de N_e corps à celui d'une seule particule, ce qui permet de considérer la fonction d'onde du système électronique $\Psi_e(\vec{r}_i)$ comme le produit direct des fonctions d'onde à une particule $\psi_i(\vec{r}_i)$

$$\bullet \quad \Psi_e(r_1, r_2, r_3, \dots) = \prod_i \psi_i(r_i), E_e = \sum_i E_i \quad (2.12)$$

Cette approximation, consiste à traiter l'interaction électron-électron de façon moyenne : un électron donné n'est plus soumis à un potentiel dépendant des positions instantanées de tous les autres électrons, mais uniquement à un potentiel correspondant à la distribution moyennes des électrons. Cette approximation (du champ moyen) se justifie bien dans des cas où l'énergie cinétique des électrons est supérieure à l'énergie potentielle moyenne [31].

L'équation de Schrödinger à une particule (prenant m_e , \hbar et e en unité atomique u.m.a égale à 1), appelée équation de Hartree, s'écrit sous la forme :

$$\bullet \quad h_i \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}). \quad (2.13)$$

Où l'hamiltonien à un électron s'écrit :

$$\bullet \quad h_i = -\frac{1}{2} \Delta_i + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + v_i(\vec{r}) \quad (2.14)$$

Où $v_{\text{ext}}(\vec{r})$: représente à la fois le potentiel dû aux interactions noyaux-noyaux et celles des autres électrons-noyaux dans le système, et :

$$\bullet \quad v_i(\vec{r}) = \int d^3 r' \frac{n_i(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (2.15)$$

$v_i(r)$ est le potentiel de Hartree pour le i ème électron qui remplace l'interaction électrostatique électrons-électrons avec tous les autres électrons.

La densité d'électrons $n_i(\vec{r})$ dans l'équation (2.15) est donnée par :

$$\bullet \quad n_i(\vec{r}') = \sum_{j=1}^{N_e} |\psi_j(\vec{r}')|^2 \quad (2.16)$$

Où la somme est faite sur les N_e états mono électroniques occupés.

En substituant les équations (2.14), (2.15) et (2.16) dans (2.13), on trouve les équations de Hartree pour un système mono électronique :

$$\bullet \quad \left(-\frac{1}{2}\Delta_i + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \right) \psi_i(\vec{r}) + \sum_{j \neq i, j=1}^{N_e} \int d^3 r' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.17)$$

Le potentiel de Hartree $v_i(\vec{r})$, qui détermine les fonctions d'ondes mono électroniques $\psi_i(\vec{r})$ est exprimé en terme de ces mêmes fonctions d'ondes selon l'équation de (2.15). C'est la raison pour laquelle cette approche est appelée approximation du champ auto cohérent [32].

Mais, trouver une solution auto cohérente avec la formulation de Hartree est une tâche très dure, surtout si le nombre d'électrons N_e mis en jeu est très grand. Très souvent on suppose que la densité mono électronique $n_i(\vec{r})$ est égale à la densité électronique totale $n(\vec{r})$.

$$\bullet \quad n_i(\vec{r}) = n(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_e} |\psi_j(\vec{r})|^2 \quad (2.18)$$

Cependant, cette approximation comporte différents problèmes : le Hamiltonien de départ n'est qu'une approximation de champ moyen et les électrons ne sont pas traités comme des fermions, où le principe d'exclusion de Pauli n'est pas respecté.

2.2.2.2. Approximation de Hartree-Fock

Un système électronique dans l'approximation de Hartree est incomplet. On peut ainsi introduire la différence entre l'énergie du système multiélectronique réel et l'énergie obtenue par l'approximation de Hartree comme étant celle représentant le reste des interactions électroniques. L'une des interactions qui manque dans le modèle de Hartree est l'échange. L'échange est d'origine purement quantique. C'est cet effet qui exprime l'antisymétrie de la fonction d'onde par rapport à l'échange des coordonnées de n'importe quels deux électrons menant à décrire le système à N corps (électrons) par l'égalité :

$$\bullet \quad \psi e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_{ne}) = -\psi e(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{ne}) \quad (2.19)$$

Dans la quelle ont été permutées les positions de i et j. Cette fonction est la fonction d'onde du système à N corps résultante de la combinaison linéaire de fonctions mono-électronique. Une telle description obéit donc au principe d'exclusion de Pauli qui impose à deux électrons de mêmes nombres quantiques de ne pouvoir occuper simultanément le même état quantique, ainsi qu'à l'indiscernabilité des électrons. Or, dans la formulation de Hartree de la fonction d'onde, cela n'est pas le cas, car l'électron i occupe précisément l'état i. Le système électronique dans l'approximation de Hartree est non complètement décrit, en 1930, Fock a montré que la fonction d'onde de Hartree viole le principe d'exclusion de Pauli parce qu'elle n'est pas antisymétrique par rapport à l'échange de deux électrons. Il a remplacé la fonction d'onde par un déterminant de Slater :

$$\bullet \quad \psi e(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1, \vec{r}_2\vec{\sigma}_2, \dots, \vec{r}_{ne}\vec{\sigma}_{ne}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1) & \psi_1(\vec{r}_2\vec{\sigma}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_{ne}\vec{\sigma}_{ne}) \\ \psi_2(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1) & \psi_2(\vec{r}_2\vec{\sigma}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_{ne}\vec{\sigma}_{ne}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{ne}(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1) & \psi_{ne}(\vec{r}_2\vec{\sigma}_2) & \dots & \psi_{ne}(\vec{r}_{ne}\vec{\sigma}_{ne}) \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Où σ représente le spin.

La fonction Ψ donnée par l'équation (2.20) conduit aux équations de Hartree- Fock [32] pour un système à une particule :

$$\bullet \quad \left(-\frac{1}{2} \Delta_i + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \sum_{j \neq i}^{N_e} \int d^3 r' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \right) \psi_i(\vec{r}) - \sum_{j \neq i}^{N_e} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \int d^3 r' \frac{\psi_j(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.21)$$

Ces équations de Hartree-Fock sont difficiles à résoudre quand le système étudié comporte un grand nombre d'électrons.

On constate dans ce chapitre que L'approximation de Hartree-Fock constitue la base de la majorité des méthodes de chimie quantique, ab-initio et semi-empiriques, grâce à ces réussites confirmées dans ce domaine depuis plusieurs décennies. Tout comme dans l'approche de Hartree, la fonction d'onde d'un système à N électrons est décrite par une combinaison linéaire des fonctions mono-électroniques avec l'ajout de la prise en compte de l'antisymétrie de l'ensemble. Ceci ne peut être obtenu qu'avec un produit de fonctions.

Une généralisation permettant d'incorporer l'antisymétrie est assurée par le remplacement des fonctions d'ondes de Hartree par un déterminant de Slater. Ce déterminant

comprend des fonctions d'ondes mono-électroniques construites comme combinaison linéaire de tous les fonctions de Hartree dans laquelle des permutations sont effectuée de manière à obéir la règle d'exclusion de Pauli.

Malheureusement ces équations de Hartree-Fock sont difficiles à résoudre quand le système étudié comporte un grand nombre d'électrons. Les interactions électrons-électrons produisent des termes d'énergie supplémentaires en plus de ceux de l'approximation de Hartree-Fock (AHF), qui sont appelés termes d'énergie de corrélation.

2.2.2.3. Approximation de Hartree –Fock –Slater

Contrairement à l'AHF, Slater [33] approxime le terme d'échange en supposant qu'il possède un caractère local. Ce potentiel d'échange s'écrit sous la forme :

$$\bullet \quad v_x(\vec{r}) = -6\alpha \left[\frac{3n(r)}{8\pi} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (2.22)$$

Où : α est un paramètre sans dimension et $n(\vec{r})$ la densité de charge. Dans ses calculs, Slater pose $\alpha=1$, ce qui correspond à un gaz homogène sans interaction. Cette méthode de Slater soulève la simplicité de ce potentiel par rapport à l'AHF (due au fait qu'il est local) ; ainsi, il donne une forme simple du terme d'échange-corrélation. Cependant le choix de ce potentiel pratiquement intuitif conduit à des résultats pas toujours satisfaisants.

2.2.3. La méthode de pseudo-potentiel

2.2.3.1. Théorème de Bloch

En 1928, Felix Bloch [28] a discuté des conséquences de la symétrie du solide sur les calculs de fonctions d'onde. Le théorème de Bloch dit que dans un solide périodique, chaque fonction d'onde peut être écrite comme le produit d'une onde plane $\exp(ik.R)$ et d'une fonction $u_{i,k}(r)$ ayant la périodicité du réseau de Bravais, c'est-à-dire on peut écrire :

$$\bullet \quad \psi_i(\vec{r}) = u_i(\vec{r})\exp(ik\vec{r}) \quad (2.23)$$

Avec

$$\bullet \quad u_i(\vec{r}) = u_i(\vec{r} + \vec{R}) \quad (2.24)$$

k est le vecteur d'onde, i est l'indice de bande, \vec{R} est le vecteur du réseau direct. Pour la fonction $u_i(\vec{r})$ on peut toujours écrire :

$$\bullet \quad u_i(\vec{r}) = \sum_G C_{iG} \exp(iG\vec{r}) \quad (2.25)$$

Où \vec{G} est un vecteur du réseau réciproque défini par $G.R = 2\pi m$ (m est un entier). En remplaçant $u_i(\vec{r})$ par son expression, la fonction d'onde peut être mise sous la forme d'une somme d'ondes planes.

$$\bullet \quad \psi_{ik}(\vec{r}) = \sum_G C_{i,k+G} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} \quad (2.26)$$

Les états électroniques sont permis seulement à un ensemble de points \mathbf{k} déterminés par les conditions aux limites. Le nombre infini d'électrons dans le solide est pris en compte par un nombre infini de points \mathbf{k} , et seulement un nombre fini d'états électroniques sont occupés à chaque point \mathbf{k} . Les états occupés à chaque point \mathbf{k} contribuent dans le calcul de la densité $n(\mathbf{r})$ et par suite du potentiel électronique et de l'énergie totale. A cause du nombre infini de points \mathbf{k} , un nombre infini de calculs est nécessaire pour obtenir ces derniers ($n(\mathbf{r})$, $V(\mathbf{r})$, E).

Les fonctions d'ondes sont identiques à des points \mathbf{k} identiques, et par conséquent, il est possible de représenter les fonctions d'onde électroniques dans une région de l'espace \mathbf{k} par une fonction d'onde en un seul point \mathbf{k} . Dans ce cas, le calcul du potentiel électronique, et par suite l'énergie du solide demande la détermination des états électroniques à un nombre fini de points \mathbf{k} .

Plusieurs méthodes ont été proposées pour avoir une bonne approximation du potentiel électronique et d'énergie totale, en calculant les états électroniques seulement à un petit nombre de points spéciaux \mathbf{k} dans la zone de Brillouin. Suite à l'insuffisance de points \mathbf{k} , l'erreur commise dans le calcul de l'énergie totale peut être réduite à l'aide de l'utilisation d'un ensemble dense de points \mathbf{k} .

2.2.3.2. Une base d'onde plane

Suite au théorème de Bloch, la fonction d'onde en chaque point \mathbf{k} peut être représentée en utilisant une base discrète d'ondes planes. En principe pour représenter la fonction d'onde on a besoin d'un très grand nombre d'ondes planes. Cependant, les coefficients $C_{i,k+G}$ pour les ondes planes de petite énergie cinétique $\frac{\hbar^2}{2m} |K + G|^2$ sont plus importantes que ceux associés aux ondes planes avec une grande énergie cinétique [34]. En conséquence, la base d'ondes planes peut être limitée aux ondes planes qui ont une énergie cinétique inférieure à une valeur critique "cutoff energy" E_{cut} .

La limitation de la base d'ondes planes conduit à des erreurs dans le calcul de l'énergie totale. L'ordre de grandeur de cette erreur peut être réduit en augmentant la valeur de l'énergie critique. En principe la valeur de l'énergie critique doit être augmentée jusqu'à ce que l'énergie totale converge, ce qui signifie que le choix d' E_{cut} détermine le degré d'exactitude du calcul. Autres avantages des ondes planes :

- ❖ il n'y a pas de problèmes de superposition de bases puisque les ondes planes décrivent de façon uniforme l'espace.
- ❖ La convergence des calculs sur les propriétés physiques obtenues peut être contrôlée, tout simplement, en augmentant le nombre d'ondes planes ;

Mais l'utilisation des fonctions d'ondes planes mène à quelques désavantages : La représentation de la fonction d'onde dans une base d'onde plane, présente deux problèmes majeurs, même avec l'utilisation de l'énergie critique. Premièrement, les calculs deviennent de plus en plus coûteux (en temps) au fur et à mesure que la taille des atomes augmente. Deuxièmement, le fait que les orbitales de Kohn-Sham doivent être orthogonales entre elles ; induit une augmentation importante de l'énergie cinétique maximale. Dans ce cadre, certains éléments du tableau périodique vont pouvoir être modélisés avec beaucoup d'efficacité, tandis que d'autres, comme les éléments lourds ou les métaux de transition, vont nécessiter des moyens de calculs extrêmement puissants.

Le premier problème peut être évité en utilisant l'approximation du cœur gelé "Frozen core approximation", et le deuxième peut être limité par l'utilisation de la méthode de pseudopotentiel.

2.2.3.3. L'approximation du cœur gelé

En physique du solide, il est bien connu que la plupart des propriétés physiques et chimiques des solides dépendent beaucoup plus des électrons de valence que de ceux du cœur. D'autre part, les électrons de cœur ne participent pas directement dans les liaisons chimiques, et ils sont peu affectés par les modifications de l'environnement atomique.

Alors il est raisonnable d'approximer la configuration de ces électrons de cœur dans le solide à celle d'un atome isolé. Cette considération permet alors de les regrouper avec les noyaux, pour constituer des ions rigides : **c'est l'approximation du cœur gelé [35]**. Avec cette approximation, le problème de traiter les électrons de cœur est considéré comme résolu,

et l'étude est limitée maintenant à la recherche du comportement des électrons de valence dans le potentiel partiellement écranté par les électrons de cœur. Ainsi tous les systèmes peuvent être traités sur un pied d'égalité, quel que soit le nombre d'électrons des espèces en présence [34,35].

2.2.3.4. Méthode du pseudopotentiel

Cette méthode fut introduite par Fermi en 1939 [36] pour étudier les états atomiques des couches minces. Dans l'année suivante, Hellman [37] proposa que cette méthode peut être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des matériaux alcalins. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Philips et Kleinman en 1959 [45]. Elle utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et de conduction avec les états du cœur. L'effet d'orthogonalité est incluse dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel [37].

La DFT est une approche puissante pour le traitement du problème à plusieurs corps. Cependant, il est important de faire le choix convenable d'une base de fonctions d'ondes pour la résolution des équations de Kohn-Sham. Il existe plusieurs méthodes qui permettent de résoudre l'équation de Schrödinger. Ces méthodes diffèrent par la forme utilisée du potentiel et par les fonctions d'ondes prises comme base. Parmi elles les méthodes basées sur une combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO) [38], permettent de traiter les métaux de transition. Les méthodes des ondes planes orthogonalisées (OPW) et leurs dérivées [38, 39] applicables aux bandes de conduction de caractère « s-p » des métaux simples. Les méthodes cellulaires du type ondes planes augmentées (APW) [40]. Les méthodes linéarisées mises au point par Andersen [41] : les ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) et les orbitales «muffin-tin» linéarisées (LMTO), permettent de gagner plusieurs ordres de grandeurs dans le temps de calcul. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves: FP-LAPW) [42]. La majeure partie des propriétés physiques et chimiques d'un atome sont dues aux recouvrements des fonctions d'ondes des électrons les moins localisées, essentiellement les électrons situés dans la bande de valence. Par contre, les électrons les plus proches du noyau, appelés électrons du « cœur », extrêmement localisés, ne participent pas aux liaisons chimiques et sont faiblement perturbés par le potentiel effectif de Kohn-Sham. Ces électrons sont décrits par des fonctions d'ondes ayant de grandes variations d'amplitude, nécessitant un grand nombre d'ondes planes et donc

des ressources informatiques importantes. De ce fait on va considérer que les électrons du coeur restent dans leur état fondamental, comme dans l'atome isolé. L'approximation des pseudopotentiels consiste à considérer que les électrons de valence sont en interaction avec le potentiel créé par le noyau et les électrons de coeur.

En pratique, les fonctions d'onde $\Psi(r)$ représentant les électrons de valence sont remplacés par des pseudo-fonctions d'onde $\Psi^{ps}(r)$ (figure 2.1). L'égalité $\Psi^{ps}(r) = \Psi(r)$ est imposée à l'extérieur d'une sphère de rayon r_c autour de l'atome et à l'intérieur de cette sphère, le rayon r_c est le rayon qui délimite la région du coeur, plus ce rayon sera élevé, et plus les pseudo-fonctions d'ondes et le pseudopotentiel seront lisses.

La construction d'un pseudopotentiel se fait à partir d'un atome isolé et on impose que les énergies propres obtenues avec le pseudopotentiel soient égales aux énergies atomiques réelles. Par la suite, on s'appuiera sur ces résultats pour définir les fonctions d'onde des électrons de coeur, qui ne seront plus calculées [44]. Ces pseudo-fonctions d'onde ainsi obtenues offrent l'avantage d'être représentées dans l'espace de Fourier par un nombre très réduit d'ondes planes, et cela réduirait considérablement les calculs numériques. Le potentiel subit un traitement similaire. La forme du pseudo-potentiel est choisie de manière à ce que les pseudo-fonctions d'onde et les fonctions d'onde de valence aient les mêmes énergies propres.

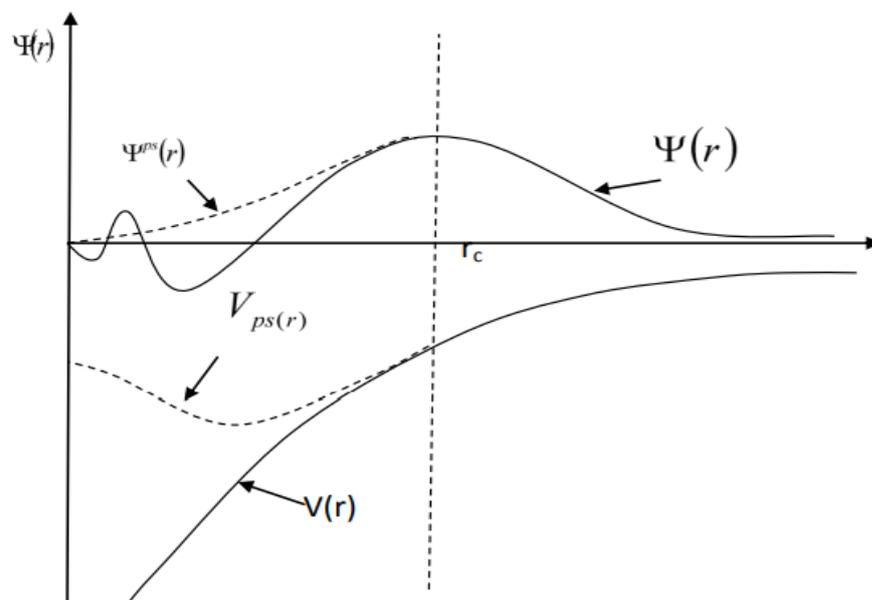


Figure 2.1 : Pseudisation des fonctions d'onde de valence et du potentiel [43]

2.2.4. Conclusion

Nous avons donné la méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie de ces matériaux. L'approche du pseudo-potentiel est actuellement l'approche la plus utilisée pour la détermination des structures des 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

*Chapitre 3: Résultats ET
discussions*

3. Chapitre 3 : résultats et discussions

3.1. Introduction :

Une compréhension approfondie de la structure et des propriétés électroniques des semi-conducteurs nécessite une étude approfondie de l'environnement physique, c'est-à-dire la compréhension de la manière dont les atomes et les molécules sont disposés à l'intérieur des solides.

Le progrès scientifique est étroitement lié au développement de la physique des semi-conducteurs, qui exploite les propriétés des semi-conducteurs pour produire certains dispositifs électroniques et optoélectroniques.

Actuellement, les alliages multi-composants ont reçu une attention considérable pour leur utilisation en tant que substrats, revêtements, éléments actifs et autres applications dans des dispositifs optoélectroniques pour caméras photoniques à grande vitesse. Les propriétés de fonctionnement des dispositifs dépendent des propriétés électroniques des matériaux constitutifs, et la compréhension de ces propriétés est nécessaire pour déterminer leur domaine d'application.

Nos travaux portent sur l'étude des propriétés électroniques et optiques et de la permittivité haute fréquence des semi-conducteurs binaires INSB dans la phase zinc-blende.

3.2. Etude des propriétés électroniques :

Les calculs sont principalement basés sur la méthode empirique du pseudo-potentiel (EPM), en utilisant une approximation de cristal virtuel (VCA) modifiée à partir du modèle de structure de la zinc-blende.

Dans EPM, le potentiel cristallin est représenté par une superposition linéaire de potentiels atomiques qui sont modifiés et ajustés pour avoir la même valeur que la bande interdite d'énergie connue en des points sélectionnés dans la zone de Brillouin.

Pour comprendre les paramètres suivants (structure de bande, bande interdite et l'indice de réfraction), il est d'abord nécessaire d'étudier et de déterminer les propriétés électroniques, optiques et diélectriques des composées binaires InSb alliés.

La nature empirique de la méthode des pseudo-potentiels est d'ajuster le facteur de forme pour que le niveau d'énergie calculé soit le plus proche de la valeur théorique. [46]

$$V_{ps} = V_{ps}^L(r) + V_{ps}^{NL}(r) \quad (3.1)$$

Avec :

$V_{ps}^L(r)$: Partie locale du pseudo potentiel.

$V_{ps}^{NL}(r)$: Partie non locale du pseudo potentiel.

- La partie non locale du pseudo potentiel est négligée.
- La partie locale du pseudo potentiel (appelés aussi facteurs de forme) : elle est donnée en fonction des paramètres du pseudo potentiel (G), et qui ne sont autre que la Transformée de Fourier du potentiel atomique à l'intérieur de la cellule Wigner-Seitz.

$$V_{ps}(r) = V_{ps}^L(r) = \sum_G V(G)e^{iGr} \quad (3.2)$$

Où :

$V(G)$: Facteur de forme.

3.2.1. Les facteurs de forme :

Les facteurs de forme pseudo-potentiels symétriques VS et antisymétriques VA ajustés, ainsi que les paramètres du réseau des composé binaire utilisés, sont donnés dans le tableau (3.1).

Tableau 3.1 Les facteurs de forme pseudo-potentiels de composé InSb.

Composant binaire	Les facteurs de formes						Les constants du réseau a (Å)
	Vs(3)	Vs(8)	Vs(11)	Va(3)	Va(4)	Va(11)	
InSb X=0	-0.201294	0.01	0.28338	0.064495	0.03	0.015	6.49

En injectant les paramètres pseudo potentiels dans le code EPM et dont les valeurs sont mentionnées dans le Tableau(1), on trouve les gaps d'énergies illustrés au Tableau (3.2) et qui sont en très bon accord avec l'expérience rapportée par la référence [b].

3.2.2. Gap énergétique pour le composé binaire InSb

La variation des gaps énergétiques directs (Γ - Γ) et indirects (Γ - X), E (Γ - L) ont été calculé Pour le semi-conducteur binaire InSb, nos résultats sont présentés dans le tableau (3.2).

Tableau 3.2 Les variations des gaps énergétiques d’InSb

composant	(Γ - Γ) ev	(Γ - X) ev	(Γ - L) ev
InSb	0.18111^a 0.18^b	1.63283^a 1.63^b	0.93215^a 0.93^b

Où : ^a: Valeur calculée.

^b: Valeur expérimentale indiquée dans Réf [S. Adachi, J. Appl. Phys. 66, 6030 (1989);].

On remarque que nos résultats des gaps sont en meilleur accord avec l’expérience.

3.2.3. Structure de bandes électroniques

L’étude de la structure de bande électronique de « InSb » est calculée aux points de hautes symétries dans la zone de Brillouin, en utilisant la VCA sans tenir compte de l’effet du désordre compositionnel. Pour pouvoir interpréter la figure (3.1) qui illustre les structures de bandes de composé binaire, on note que la référence zéro d’énergie est le maximum de la bande de valence.

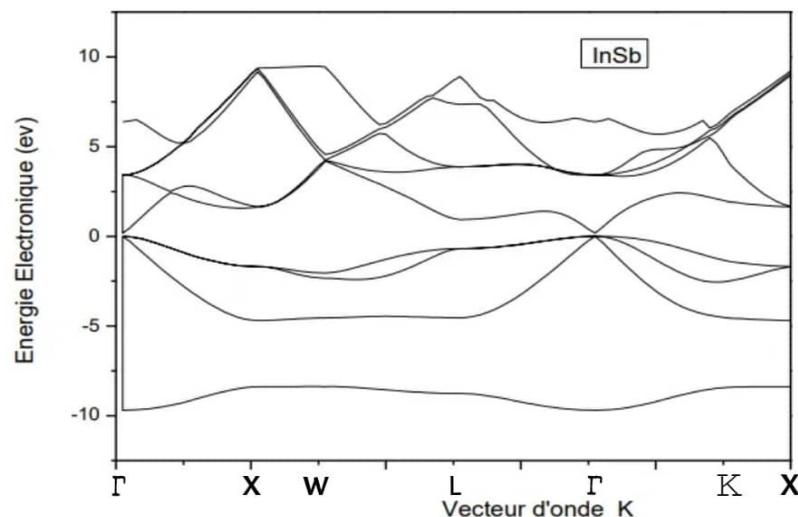


Figure 3:1 Structure de bande électronique du composé binaire InSb

Sur la figure (3.1), nous voyons que la valeur maximale de la bande de valence est au point Γ , et la valeur minimale de la bande de conduction est également au point Γ , donc le composé binaire InSb est un semi-conducteur à gap direct, la différence entre le minimum et le maximum La valeur est de 0,1811 eV, ce qui est cohérent avec la valeur rapportée dans la réf [47].

3.2.4. Densité de charge

La densité de charge électronique joue un rôle très important. Elle fournit une bonne description sur les différentes propriétés chimiques et physiques des solides. A l'aide de la distribution de la densité de charge, nous pouvons déterminer le type de liaisons qui s'établit entre les constituants d'un matériau.

La Figures 3.2 représente la densité de charge électronique, au point Γ , du composé binaire InSb.

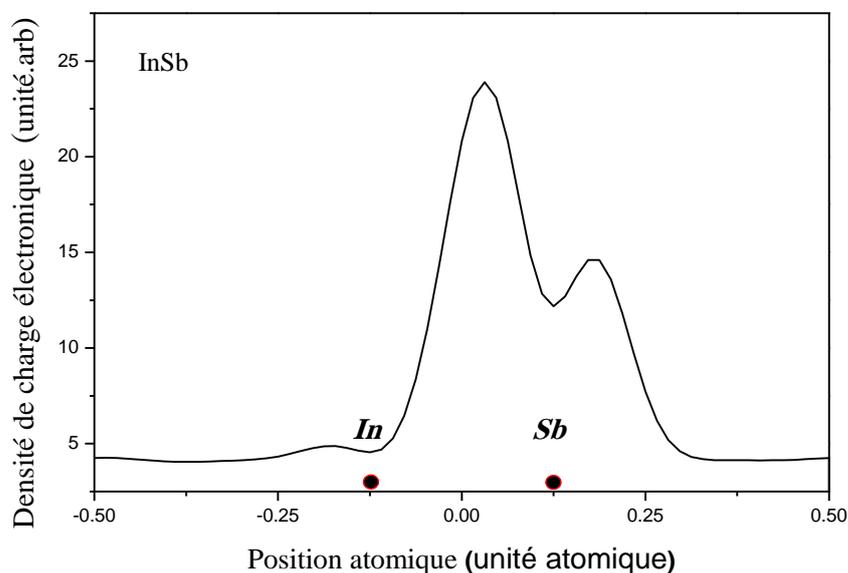


Figure 3.2 La densité de charges électroniques de la bande de valence du composé binaire InSb.

On constate sur le profil de la densité de charges électroniques de la bande de valence du binaire InSb une asymétrie de charges se situe entre les deux sites atomiques, ceci est dû aux liaisons partiellement covalentes et ioniques qui caractérisent les semiconducteurs III-V. Un

déplacement du maximum de la densité de charges vers le côté de l'anion, à savoir l'Antimoniure (Sb). Cette distribution antisymétrique autour des centres des liaisons, ainsi que le transfert important de charge du cation (In) vers l'anion (Sb) indique que cet anion possède un potentiel plus fort que le cation, et ceci est dû au fait que l'anion (Sb) est plus électronégatif que le cation (In). On remarque aussi que pratiquement il n'y a pas de charge dans les régions interstitielles.

Nous avons également calculé la densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point Γ le composé binaire InSb. Nos résultats sont illustrés sur la Figure (3.3).

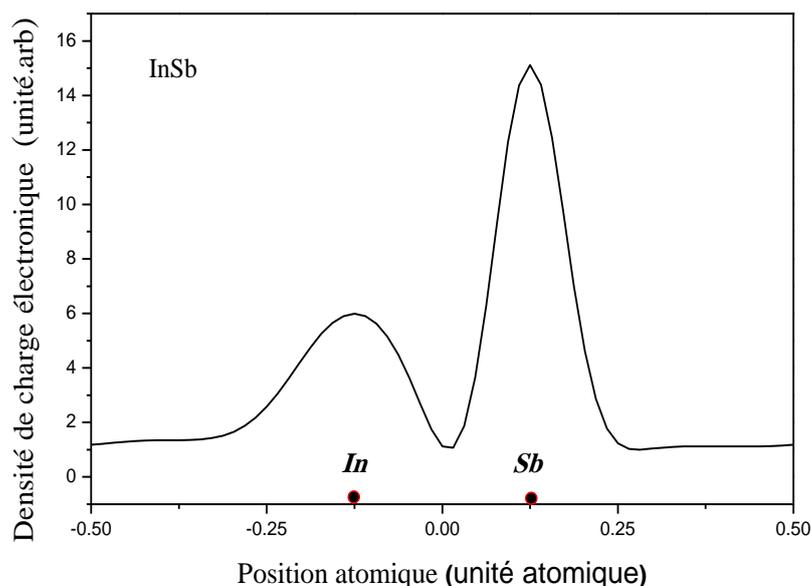


Figure 3.3 La densité de charges électroniques de la première bande de Conduction du composé binaire InSb.

Remarquons que la majorité des charges est localisée autour du site de l'anion (Sb), il atteint son maximum. Par contre la quantité de charges autour du cation (In) est moins prononcée. Ceci suggère que la distribution de charge de la première bande de conduction est anti-liante. Une faible quantité de charge peut être observée dans les régions interstitielles. On peut conclure que le type de liaison est à caractère ionique.

3.3. Etude des propriétés optiques (Indice de réfraction)

L'indice de réfraction n d'un milieu à une longueur d'onde donnée mesure le facteur de réduction de la vitesse de la lumière (ou d'autres ondes) dans le milieu.

La lumière change de direction lorsqu'elle passe d'un matériau à un autre, ce qui implique le rapport des indices de réfraction.

Comprendre l'indice n des semi-conducteurs est essentiel pour les dispositifs électroniques tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs. Dans ce travail, l'indice est calculé à l'aide de six modèles différents, qui sont tous directement liés à l'écart énergétique fondamental, comme suit :

- **La formule de Moss [48]**

$$n = \sqrt[4]{\frac{k}{E_g}} \tag{3.3}$$

- **La relation de Ravindra [49]**

$$n = \alpha + \beta E_g \tag{3.4}$$

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

- **La forme linéaire de Gupta et Ravindra [50]**

$$n = \alpha + bE_g \tag{3.5}$$

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

- **La relation empirique d'Hervé et Vandamme donnée par [51]**

$$n = \sqrt[2]{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)} \tag{3.6}$$

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

- **La relation de Reddy at Anjaneyulu [52]**

$$n = \ln \frac{36,3}{E_g} \tag{3.7}$$

- **La relation empirique de Reddy et Ahmmed [53]**

$$n^4(E_g - 0,365) = 154 \tag{3.8}$$

En utilisant ces six modèles, nous avons calculé l'indice de réfraction de composé binaire InSb à partir de valeur de leur gap d'énergie, les résultats sont représentés dans le tableau 3.3.

Tableau 3.3 l'indice de réfraction pour le composé binaire Insb

Le matériaux	n calculé à partir :						valeur théorique
	Moss (3.3)	Ravindra (3.4)	Gupta et Ravindra (3.5)	Hervé et Vadamme (3.6)	Reddy et Anjneyulu (3.7)	Reddy et Ahmmed (3.8)	
InSb	4.94	4.01	3.97	3.93	5.30		3.97 ^a

^a : Valeur théorique indiquée dans Ref [54]

A titre de comparaison, nous fournissons également la valeur théorique citée dans la référence 54. Comme on peut le voir sur la comparaison, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique pour le composé InSb est donné par la relation de Gupta et Ravindra.

3.4. Etude des propriétés diélectriques

3.4.1. La constante diélectrique de haute fréquence

Basé sur les valeurs calculées de l'indice n obtenu à partir des relations des différents modèles utilisés, le constant diélectrique de haute fréquence, a été estimé en utilisant l'expression suivante :

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \tag{3.9}$$

Tableau 3s.4 la constante diélectrique de haute fréquence pour le composé InSb

Le matériau	la constante diélectrique de haute fréquence calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss (3.3)	Ravindra (3.4)	Gupta et Ravindra (3.5)	Hervé et Vadamme (3.6)	Reddy et Anjneyulu (3.7)	Reddy et Ahmmed (3.8)	
InSb	24.42	16.05	15.77	15.42	28.09		15.68 ^b

^b : Valeur expérimentale indiquée dans Réf [56]

A titre de comparaison, nous donnons également la valeur théorique citées dans la référence 55. Comme on peut le voir sur la comparaison, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique pour le composé binaire InSb est donné par la relation : Hervé et Van Damme.

3.4.2. La constante diélectrique statique ϵ_0

Nous avons également calculé le constant diélectrique statique en utilisant la relation suivante :

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + \nu \tag{3.10}$$

Où ν est donné par la formule suivante :

$$\nu = \frac{a_p^2(1+2a_c^2)}{2a_c^4} \tag{3.11}$$

Avec a_p est la polarité qui a été estimée à partir de la définition Vogl comme suit :

$$a_p = \frac{V_A(3)}{V_S(3)} \tag{3.12}$$

$V_A(3)$ et $V_S(3)$ représentent les facteurs de forme pseudo-potentiels symétrique et antisymétrique respectivement.

a_c est la covalence définie comme suit :

$$a_c = \sqrt{1 - a_p^2} \tag{3.13}$$

En utilisant les six modèles, nous avons calculé la constante diélectrique statique pour le composé binaire InSb, Nos résultats sont indiqués dans le tableau (3.5).

Tableau 3.5 la variation de constant diélectrique statique pour (InSb)

Le matériau	le constant diélectrique statique calculé à partir :						Valeur théorique
	Moss (3.3)	Ravindra (3.4)	Gupta et Ravindra (3.5)	Hervé et Vadamme (3.6)	Reddy et Anjneyulu (3.7)	Reddy et Ahmmed (3.8)	
InSb	28.59	18.73	18.41	17.99	32.92		17.88 ^a

^a : Valeur expérimentale indiquée dans Réf [55]

Nous Notons que le modèle qui donne la valeur la plus proche de la valeur théorique est le modèle d'Hervé et Vandamme.

3.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé binaire InSb, telles que le gap énergétique, l'indice de réfraction et les constants diélectriques statique et de haute fréquence. Nous avons utilisé une méthode empirique de pseudo-potentiel.

**Conclusion
Générale**

Conclusion général

Le calcul de la structure de bande électronique repose sur un grand nombre d'hypothèses, chacune avec ses propres difficultés, dont la validité doit être testée par l'expérience de la régression. Ces méthodes sont prises en fonction du type de bien que l'on souhaite. Pour la recherche, certaines nécessitent des calculs numériques très lourds, comme les méthodes des premiers principes, d'autres comme l'EPM peuvent être calculées de manière relativement économique en termes de temps, en se basant sur l'utilisation d'un nombre réduit de paramètres physiques sous la forme de calcul des facteurs de structure de bande, qui sont la principale raison de rendre cette méthode pratique.

Dans ce travail, nous cherchons à comprendre les propriétés structurales et électroniques, optiques et diélectriques des composés semi-conducteurs binaires InSb.

Le calcul utilise principalement la méthode de pseudopotentiel empirique EPM.

Nos résultats montrent que le dimère InSb est un semi-conducteur à bande interdite directe avec une valeur de 0,1811 eV, ce qui est cohérent avec la valeur rapportée dans la réf [47].

L'écart direct $E(\Gamma-\Gamma)$ s'écarte considérablement de l'écart $E(\Gamma-X)$, $E(\Gamma-L)$ et la transition de l'écart n'est pas remarquée.

L'indice de réfraction a été calculé selon cinq modèles empiriques. Avec le composé InSb, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique est celle donnée par le modèle de Ravindra.

La constante diélectrique de haute fréquence et La constante diélectrique statique ont été calculées pour ce modèle approprié, et nos résultats concordent bien avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques

Les Références

- [1] H.Mathieux, «Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques», 6 Ed. DUNOD (2009)
- [2] K.Singh, R.K. Pathak, Electrochim. Acta 39 (1994) 2693.
- [3] Fabien GUILLOT. Développement de nanostructures à base de semi-conducteurs III-Nitrures pour l'optoélectronique infrarouge. These doctorate. L'université Joseph Fourier – Grenoble I. 2007
- [4] Sadao ADACHI. GUMMA properties of semiconductor alloys : Group semiconductor. University. Gummua. Japan
- [5] S. Adachi, properties of group-IV, III-V, and II-VI semiconductor, wiley chichester, 2005
- [6] M.L.Colien, J.R.Chelikowsky, Electric structure and optical properties of semiconductor, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [7] M.A.Berding, S.Krishnamurthy, A.Sher, A.-B.Chen, J.Appl.phys.67(1990)6175
- [8] G. Olivier, "mécanique quantique approfondie", O.P.U.1983
- [9] Frederic P Miller, Agnes F vandomejhonMcBrewster, "Semiconductor", VDM Publishing House Ltd, 2010
- [10] Bahi Wafa. Les semi-conducteurs binaires utilisés dans la composante optoélectronique
- [11] M. Labidi, Thèse Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011)
- [12] KARA MOHAMED Wahiba les structure de bande électronique et les Propriétés relatives aux semi-conducteurs quasi binaire $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$. Thèse de doctorat université Mohamed khider de Biskra (Algérie).2012
- [13] physique des semi-conducteurs Fondamentaux – Isolant, semi-conducteur , conducteur
- [14] Y.Quéré « physique des matériaux », Ellipses, Paris, 1988
- [15] G. Olivier, "mécanique quantique approfondie", O.P.U.1983
- [16] P.Y.Yu and M.Cardona, "Fundamentals of semiconductors : physics and materials
- [17] Francis Lévy, « physique et technologie des semi-conducteurs », édition première, 1995, lausanne
- [18] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012)
- [19] Etude des propriétés optoélectroniques de l'alliage Semi-conducteur ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$, univ BBA, Zireg loubna, Mohamadi lilia
- [20] S.Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductor »,
- [21] H.Algarni, O. A. Al-hagan, N. Bouarissa, T.F. Alhuwaymel et M.Ajmal Khan

Les références

- [22] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, and M. Shur (Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999
- [23] J.M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287
- [24] N. Bouarissa. Master. Che. phys. 100(2006)41
- [25] S. Aouadi, Thèse doctorat, université de Anaba ? Calcul ab initio des propriétés structurales, Élastiques, Électroniques, optique et dynamiques des semi-conducteurs III-V à base de phosphore, (2009)
- [26] O. BAHI « Les semi-conducteurs binaires utilisés dans les composants optoélectronique. Mémoire Master Académique. Université KasdiMerbah Ouargla
- [27] N. Benahmed Ben abdallah Thèse de Magister, Université Abou bekr Belkaid-Télemcen (2006)
- [28] C. Fong and M. Schlüter, « Electronic structure of some layer compounds, » in Electrons and Phonons in Layered Crystal Structures, ed : Springer, pp. 145-315, (1979).
- [29] J. Wilson and A. Yoffe, « The transition metal dichalcogenides discussion and interpretation of the observed optical, electrical and structural properties, » Advances In Physics, vol. 18, pp. 193-335, (1969).
- [30] Kristin Persson, LBNL Materials Project ; Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, CA (United States) (2014).
- [31] M. D. Segall, P. J. D. Lindan, M. J. Probert, , C. J. Pickard ; P. J. Hasnip, S. J. Clark, M. C. Payne, J. Phys. Condens. Matter, 14, 2717-2743, (2002).
- [32] J. E. Demuth, H. Ibach, Chem. Phys. Lett. 60, 395, (1979)
- [33] J. C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol. 4, McGraw-Hill, New York, (1974)
- [34] M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias, J.D. Joannopoulos. Rev. Mod. Phys., 64, 1045, (1992).
- [35] U. Von Barth, C.D. Gelatt. Phys. Rev. B, 21, 2222, (1980).
- [36] M.L. Cohen and J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Berlin : Springer, (1988).
- [37] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, Solid. Stat. Physic, Ed, Holt, Benchart and Winston philadelphia, (1976).
- [38] J.C. Slater, Volume 2, Ch. 8, (1965).
- [39] C. Herring, Phys. Rev. 57, 1169-1177, (1940).
- [40] J.C. Slater, Phys. Rev. 51, 846-851, (1937).
- [41] O.K. Andersen, Phys. Rev. B 12, 3060-3083, (1975).
- [42] D.R. Hamann, Phys. Rev. Lett. 42, 662-665, (1979).
- [43] Warren E. Pickett, Computer Physics Report 9, 115, (1989).
- [44] Emilie BRUYER, thèse doctorat, UNIVERSITE D'ARTOIS, (2012).

Les références

- [45] P.M.A. Dirac, Proc. Roy. Soc (Londres) 123, 714-733, (1929).
- [46] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012)
- [47] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [48]. T.S. Moss, Proc. Phys. Soc. B 63 (1950) 167.
- [49]. N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, Infrared Phy. 19 (1979) 603.
- [50]. V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.
- [51]. P. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [52]. R.R. Reddy, S.Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. (b) 174 (1992) K 91.
- [53]. N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J.Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21.
- [54]. R.R. Reddy, Y.N. Ahmmed, Infrared Phys. Technol. 36 (1995) 825.
- [55]. C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed. Dunod université (1983).
- [56] Semiconductor Physics: An Introduction Professor Karlheinz Seeger (auth.)

تلخيص

قمنا بدراسة نظرية للخصائص في هذا العمل: الإلكترونيات والبصريات والعوازل الكهربائية للمركبات الثنائية

(InSb).

يعتمد الحساب بشكل أساسي على طريقة تقريب الاحتمالية الزائفة (EPM) للبلورة الافتراضية VCA

نتائجنا، بالنسبة للانحرافات المباشرة وغير المباشرة، وهيكل النطاق، والانكسار الأسي، والسماحية الثابتة والعالية التردد

للمركبات الثنائية InSb التي تتبلور في مرحلة مزيج الزنك تتفق جيدا مع النتائج التجريبية و النظرية الحالية.

وتم توقع النتائج الأخرى بسبب نقص البيانات .

Résumé

Nous rapportons une étude théorique des propriétés dans ce travail Electronique, optique et diélectriques des composés binaires (InSb). Le calcul est principalement basé sur la méthode du pseudopotential Approximation empirique (EPM) du cristal virtuel VCA.

Nos résultats, pour les écarts directs et indirects, structure de bande, exposant Réfraction et permittivité statique et haute fréquence des composés binaires (InSb) cristallisant dans la phase zinc-blende, sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques existants. Et prévision D'autres par manque de données.

Abstract

We report a theoretical study of the properties in this work Electronics, optics and dielectrics of binary compounds (InSb). The calculation is mainly based on the Empirical Pseudopotential Approximation (EPM) method of the VCA virtual crystal.

Our results, for direct and indirect deviations, band structure, exponent Refraction and static and high frequency permittivity of binary compounds (InSb) crystallizing in the zinc-blende phase, are in good agreement with existing experimental and theoretical results. and fore cast Others for lack of data.