

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
LE 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' ELECTRONIQUE*

# *Mémoire*

*Présenté pour obtenir*

**LE DIPLOME DE MASTER**

**FILIERE : ELECTRONIQUE**

**Spécialité : INDUSTRIE ELECTRONIQUE**

Par

**ZBILEH Abdelkarim**

*Intitulé*

**Investigation des propriétés optoélectronique d'un alliage semi-conducteur ternaire  $Al_xGa_{1-x}N$  sous l'effet du désordre.**

*Soutenu le : 03 / 07 / 2023*

*Devant le Jury composé de :*

<i>Nom &amp; Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
<b>F.Khaled</b>	<b>MCB</b>	<b>Président</b>	<b>Univ-BBA</b>
<b>F.Fares</b>	<b>MCA</b>	<b>Encadreur</b>	<b>Univ-BBA</b>
<b>S. Meguellati</b>	<b>MAA</b>	<b>Examineur</b>	<b>Univ-BBA</b>

*Année Universitaire 2022/2023*

# Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à :

\* A mon père.

\* A ma mère.

\* A mes frères et mes sœurs.

\* A toute ma famille.

\* A tous mes amis.

# REMERCIEMENTS

Je remercie Allah tout puissant de nous avoir donné la force et le  
courage

D'établir ce modeste travail. Je tiens à remercier particulièrement  
mon encadreur

« **Dr FARES FAHIMA** », qui a accepté de superviser mon humble  
travail, qui a fourni des conseils judicieux et ainsi de son exigence de  
rigueur. Ses Compétences et ses bonnes directives m'ont aidé à  
achever ce mémoire de master.

Remercie également les membres du jury, Je les remercie très  
sincèrement d'avoir accepté d'évaluer ce travail

Mes remerciements vont également à tous les enseignants du  
département de Physique

Je ne saurais aussi oublier mes amis et mes collègues pour les beaux  
moments.

Ainsi tous ceux qui ont participé de loin ou de près et qui mon aidé  
pour l'élaboration de ce mémoire.

## Table des matières

Dedicaces

Remerciements

Table des matières

Liste des figures

Liste des tableaux

### CHAPITRE 1 : Notions générales sur les semi-conducteurs

Introduction générale .....	1
I.1 Introduction .....	3
I.2 Semi-conducteurs en général.....	3
I.3 Les différents types de semi-conducteur .....	4
I.3.1 Semi-conducteur intrinsèque .....	4
I.3.2 Semi-conducteurs extrinsèques .....	5
I.3.2.1 Les semi conducteurs extrinsèques dopés N .....	6
I.3.2.2 Les semi conducteurs extrinsèques dopés P .....	7
I.4 Semi-conducteurs III-V .....	8
I.4.1 Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V .....	8
I.5 Propriétés de semi-conducteur .....	9
I.5.1 Propriétés structurales .....	9
I.5.1.1 Structure Zinc Blende.....	9
I.5.2 Propriétés Electroniques .....	10
I.5.2.1 Gap direct et Gap indirect.....	10
I.5.2.2 Transition inter bandes : .....	11
I.6 Propriétés Optiques .....	12
I.6.1 L'indice de réfraction .....	12
I.7 La réflectivité .....	14
I.8 La théorie des alliages : .....	14
I.13 Conclusion.....	19

### CHAPITRE 2 : Les méthodes de calcul des bandes d'énergies

II.1 Introduction .....	21
II.2 Equation de Schrödinger .....	21
II.3 Les approximations .....	22
II.3.1 L'approximation Born-Oppenheimer .....	22
II.3.2 Les approximations Hartree .....	23
II.3.3 Les approximations Hartree Fock : .....	24

II.4	La méthode des pseudo potentiels : .....	25
II.5	Les propriétés des pseudo potentiels .....	27
II.1	La méthode empirique du pseudo potentiel local : .....	27
II.7	Conclusion .....	31

### **CHAPITRE 3 : Résultat et discussion**

III.1	Introduction .....	33	<b>Erreur ! Signet non défini.</b>
III.2	Les propriétés électroniques et optique des semi-conducteurs.....	33	
III.2.1	Les propriétés électroniques .....		<b>Erreur ! Signet non défini.</b>
III.2.1.1	Paramètre de réseau .....	42	
III.2.2	Les propriétés optiques et diélectriques.....	47	
III.2.1.1	L'indice de réfraction .....	47	
III.2.2.2	La constante diélectrique.....	49	
III.3	Conclusion.....	50	
	Conclusion générale .....	53	
	Références bibliographiques .....	55	
	Résumés		

## Liste des figures

<b>Figure 1</b> semi conducteurs intrinsèque.....	5
<b>Figure 2</b> semiconducteurs extrinsèques dopés N.....	6
<b>Figure 3</b> Les semiconducteurs extrinsèques dopés P.....	8
<b>Figure 4</b> Réseau cristallin de la structure zinc-blende.....	10
<b>Figure 5</b> Transitions inter bandes a) directe b) indirecte.....	12
<b>Figure 6</b> Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.....	18
<b>Figure 7</b> En haut : orbitale de valence (trait plein) et pseudo-orbitale (tirets), en bas : potentiel coulombien (trait plein) et potentiel modèle (points-tirets).....	26
<b>Figure 8</b> la fonction d'onde et le potentiel.....	30
<b>Figure 9</b> : Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ non confondu.....	43
<b>Figure 10</b> Variation de l'énergie de gap $\Gamma\text{-}\Gamma$ en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .....	37
<b>Figure 11</b> Variation de l'énergie de gap $\Gamma\text{-X}$ en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .....	38
<b>Figure 12</b> Variation de l'énergie de gap $\Gamma\text{-L}$ en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .....	40
<b>Figure 13</b> Variation des énergies de gap direct et indirect ( $\Gamma\text{-}\Gamma$ $\Gamma\text{-X}$ $\Gamma\text{-L}$ ) en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .....	41
<b>Figure 14</b> Structures de bande du composé binaire GaN en fonction de vecteur d'onde $k$ .....	45
<b>Figure 15</b> Structures de bande du composé binaire AlN en fonction de vecteur d'onde $k$ .....	46
<b>Figure 16</b> structures de bande d'alliage $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ en fonction de vecteur d'onde.....	46
<b>Figure 17</b> variation de l'indice de réfraction $n$ du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de composition $x$ du l'aluminium pour les six modèles.....	48
<b>Figure 18</b> variations de la constante diélectrique $\epsilon$ du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction de composition $x$ du l'aluminium.....	50

## Liste des tableaux

**Tableau 1 :** Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques des composés binaires GaN et AlN.

**Tableau 2** présente les Paramètres de réseaux des composés binaires GaN et ALN.

**Tableau 3:** Les Gaps d'énergies calculé pour les binaires GaN et AlN.

**Tableau 4:** Paramètres de réseau de l'alliage semi-conducteur  $Al_xGa_{1-x}N$ .

**Tableau 5 :** les valeurs de l'indice de réfraction de GaN, AlN et  $Al_{0.6}Ga_{0.4}N$  comparés aux donnés théoriques.

**Tableau 6 :** La variation relative de l'indice de réfraction de GaN, AlN.

**Tableau 7 :** les valeurs de la constante diélectrique de GaN, AlN et  $Al_{0.6}Ga_{0.4}N$  comparés aux donnés.

Introduction

Générale



### Introduction Générale

L'avancement de la technologie dans le domaine des semi-conducteurs a ouvert de nouvelles possibilités dans le développement de dispositifs électroniques et optoélectroniques à haute performance. Parmi les composés semi-conducteurs d'intérêt, les alliages ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ont suscité une attention particulière en raison de leurs propriétés optoélectroniques remarquables et de leur large gamme de longueurs d'onde. Ces alliages offrent des opportunités prometteuses pour des applications telles que les diodes électroluminescentes (LED), les lasers, les photos détecteurs et les transistors à haute puissance [1].

Dans cette étude, nous nous concentrons sur l'étude des propriétés électroniques de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  à savoir le gap d'énergie et la structure de bande en utilisant une approche expérimentale combinant la méthode empirique du pseudo potentiel (E.P.M) et l'approximation virtuelle du cristal, ainsi nous allons focaliser nos résultats sur l'influence de l'effet du désordre sur l'alliage le ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . L'approche VCA nous permet de modéliser les propriétés du matériau ternaire en utilisant les propriétés des composés binaires parents, à savoir AlN et GaN. Cette méthode nous permet de prendre en compte les effets quantiques et les interactions électroniques dans le matériau, conduisant à des résultats plus précis par rapport à certaines autres approches théoriques [2].

En combinant l'E.P.M avec l'approche VCA et VCAA, nous pouvons aussi calculer les propriétés optiques à savoir l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence du matériau pour différentes compositions de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec et sans désordre compositionnel. Cette étude est essentielle pour la conception et l'optimisation et conception des dispositifs optiques tels que les guides d'ondes et les résonateurs [2].

Le premier chapitre est consacré aux concepts de base régissant le fonctionnement des matériaux semi-conducteurs, quelques généralités sur les matériaux nitrures d'éléments III (III-N) notamment les binaires AlN et GaN, détaillant toutes leurs propriétés électroniques et optiques et soulignant leurs qualités par rapport à d'autres matériaux. Nous allons souligner tout d'abord la possibilité d'exploiter les fonctions de ces matériaux semi-conducteurs dans le domaine de la technologie, en révélant les différents types de semi-conducteur et certaines propriétés intrinsèques ou extrinsèques, la structure cristalline, la structure de bande d'énergie et quelques propriétés optiques et diélectriques. Vu que notre étude est basée sur l'alliage

## Introduction générale

---

ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , nous allons, également exposer quelques notions de la théorie des alliages et les approximations du cristal virtuel VCA et VCAA [1].

Dans le deuxième chapitre, nous allons exposer la méthode des pseudos potentiels empirique (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA) en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel VCAA pour étudier les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs. La méthode des pseudos potentiels est une approche largement utilisée pour représenter l'interaction entre les électrons et les noyaux d'un matériau. Elle permet de réduire considérablement la complexité du calcul en remplaçant les interactions électron-noyau complètes par des pseudopotentiels qui capturent les propriétés essentielles de l'interaction [3].

Le troisième chapitre est dédié aux résultats de la simulation obtenus, nous présentons les résultats qui concernent l'Investigation des propriétés optoélectronique d'un alliage semiconducteur ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  sous effet du désordre et l'influence des différents paramètres optimisés.

Enfin, une conclusion générale s'impose à la fin de ce manuscrit, elle englobera les différentes remarques et constations émanant de toute cette étude.

## I.1. Introduction

Les semi-conducteurs ont grandement contribué au développement de l'électronique numérique, qui constitue la base de nombreux systèmes, notamment dans le domaine informatique [4]. Par exemple, la mémoire des ordinateurs repose sur des cellules indépendantes implantées sur un substrat en silicium, l'un des semi-conducteurs les plus utilisés [5]. Les semi-conducteurs sont également utilisés dans de nombreux autres systèmes, tels que les capteurs d'images et les cellules photovoltaïques des panneaux solaires, qui exploitent leurs propriétés de photoémission [4].

Ces matériaux, situés entre les conducteurs et les isolants en termes de conductivité, ont permis des avancées considérables en miniaturisation des circuits et en conversion de la lumière en signaux électriques. Ainsi, les semi-conducteurs ont joué un rôle essentiel dans l'évolution de l'électronique et ont trouvé de nombreuses applications dans notre vie quotidienne [3].

## I.2 Semi-conducteurs en général

Un semi-conducteur est un matériau qui présente des caractéristiques électriques intermédiaires entre celles d'un isolant et celles d'un métal. Bien qu'il soit considéré comme un isolant, un semi-conducteur offre une probabilité non négligeable qu'un électron contribue à la conductivité électrique [6]. En d'autres termes, sa conductivité est plus faible que celle des métaux, mais plus élevée que celle des isolants. Les semi-conducteurs se positionnent ainsi dans une zone intermédiaire, offrant des possibilités uniques pour la manipulation du courant électrique [2].

La théorie des bandes d'énergie est couramment utilisée pour modéliser le comportement électrique des semi-conducteurs. Selon cette théorie, les semi-conducteurs ont une bande interdite relativement étroite, ce qui permet aux électrons de la bande de valence de passer facilement à la bande de conduction [7]. Lorsqu'un potentiel électrique est appliqué aux bornes du semi-conducteur, un faible courant électrique se produit [7]. Ce courant est causé par le mouvement à la fois des électrons qui se déplacent vers la bande de conduction et des "trous" laissés derrière dans la bande de valence [8]. Ainsi, les semi-conducteurs permettent la conduction électrique grâce à la mobilité des électrons et des trous induits par l'application d'un potentiel électrique [4].

Le contrôle de la conductivité électrique des semi-conducteurs peut être réalisé par dopage, c'est-à-dire en ajoutant de petites quantités d'impuretés dans le matériau pour créer un excès

ou un déficit d'électrons [9]. En mettant en contact des semi-conducteurs dopés différemment, des jonctions peuvent être formées, ce qui permet de réguler la direction et l'intensité du courant électrique qui circule à travers le dispositif. Cette caractéristique fondamentale est utilisée dans le fonctionnement des composants de l'électronique moderne tels que les diodes, les transistors, et bien d'autres. Ainsi, le dopage et la création de jonctions dans les semi-conducteurs jouent un rôle essentiel dans le contrôle et l'exploitation du courant électrique pour la conception de divers dispositifs électroniques.

### I.3 Les différents types de semi-conducteur

#### I.3.1 Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur qui n'a pas été intentionnellement dopé avec des impuretés. Ces semi-conducteurs sont extrêmement purs et possèdent une structure cristalline très bien ordonnée, avec un réseau périodique parfait. De plus, leur taux d'impuretés est très faible, avec moins d'un atome d'impureté pour  $10^{13}$  atomes de l'élément semi-conducteur [2]. Cela garantit que les propriétés électriques du matériau intrinsèque sont principalement déterminées par sa structure cristalline et les caractéristiques des électrons présents dans sa bande de valence et sa bande de conduction. Les semi-conducteurs intrinsèques sont utilisés comme référence pour étudier les propriétés fondamentales des semi-conducteurs et pour évaluer l'effet des dopants sur leur conductivité et leurs propriétés électroniques. [2]

Le comportement d'un semi-conducteur intrinsèque est idéalisé, représentant un matériau sans défauts structurels ni impuretés chimiques. Cependant, dans la réalité, les semi-conducteurs ne sont jamais parfaitement intrinsèques, bien que certains, comme le silicium monocristallin pur, s'en approchent. À très basse température, ils agissent comme des isolants, mais leur conductivité augmente avec l'élévation de la température. Le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre de trous dans la bande de valence [11]. Cette corrélation est due à la tendance des atomes à compléter leur dernière orbite en acquérant 8 électrons. Cependant, dans la plupart des substances, la dernière orbite n'est pas complète, ce qui rend les atomes réactifs et prêts à interagir avec d'autres atomes pour obtenir les 8 électrons nécessaires. Pour ce faire, les atomes peuvent perdre, gagner ou partager des électrons de valence avec d'autres atomes. Dans les semi-conducteurs, les liaisons se forment par le partage d'électrons de valence, ce qui crée des liaisons covalentes [2].

Lors de la formation d'une liaison covalente, chaque atome apporte une contribution égale d'électrons de valence, qui sont ensuite partagés entre les atomes impliqués dans la liaison. La technique du dopage est une technique utilisée pour augmenter la densité des porteurs de charge à l'intérieur du matériau semi-conducteur [2]. Si elle augmente la densité d'électrons, il s'agit d'un dopage de type N. Si elle augmente celle des trous, il s'agit d'un dopage de type P. la figure ci-dessous donne un résumé global des semi conducteurs intrinsèques du point de vue structure de bandes et distributions des charges. [10].

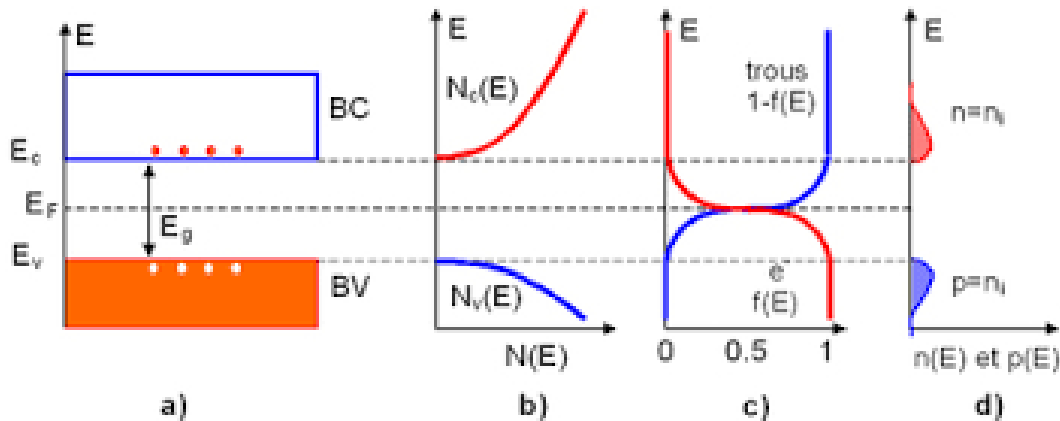


Figure 1 semi conducteurs intrinsèque.

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

### I.3.2 Semi-conducteurs extrinsèques

Dans les semi-conducteurs intrinsèques ou purs, la concentration de porteurs d'électrons et de trous à des températures normales est très faible. Par conséquent, pour obtenir une densité de courant appréciable à travers le semi-conducteur, un champ électrique important doit être appliqué. Ce problème peut être surmonté en ajoutant des impuretés appropriées dans les semi-conducteurs intrinsèques. Les semi-conducteurs extrinsèques sont ceux dans lesquels des impuretés en grande quantité sont présentes [2].

En général, les impuretés peuvent être soit des éléments du groupe III, soit des éléments du groupe V. Sur la base des impuretés présentes dans les semi-conducteurs extrinsèques, ils sont classés en deux catégories, Semi-conducteurs de type n et semi-conducteurs de type p [8].

I.3.2.1 Les semi conducteurs extrinsèques dopés N

Le dopage de type N consiste à augmenter la densité en électrons dans le semi-conducteur intrinsèque. Pour ce faire, on inclut un certain nombre d'atomes riches en électrons dans le semi-conducteur. Pour que le cristal de silicium conduise l'électricité, nous devons introduire un atome d'impureté tel que l'arsenic, l'antimoine ou le phosphore dans la structure cristalline. Ces atomes ont cinq électrons externes dans leur liaison covalente la plus externe à partager avec d'autres atomes et sont renvoyés aux impuretés pentavalentes. Cela permet à quatre des cinq électrons de se lier avec ses atomes de silicium voisins, entraînant un électron libre de se déplacer lorsqu'une tension électrique est appliquée. Comme chaque atome d'impureté donne un électron, les atomes pentavalents sont généralement appelés donneurs. L'antimoine (Sb) est fréquemment utilisé comme additif pentavalent car elle possède 51 électrons disposés en 5 coquilles autour du noyau [11]. Le matériau semi-conducteur a résulté en un excès d'électrons porteurs de courant, chacun avec une charge négative, et est donc appelé matériau de type n avec les électrons appelés porteurs majoritaires et les trous résultants porteurs minoritaires [2]. Le schéma fonctionnel du dopage d'impuretés de type n et le diagramme de bande correspondant sont illustrés à la figure

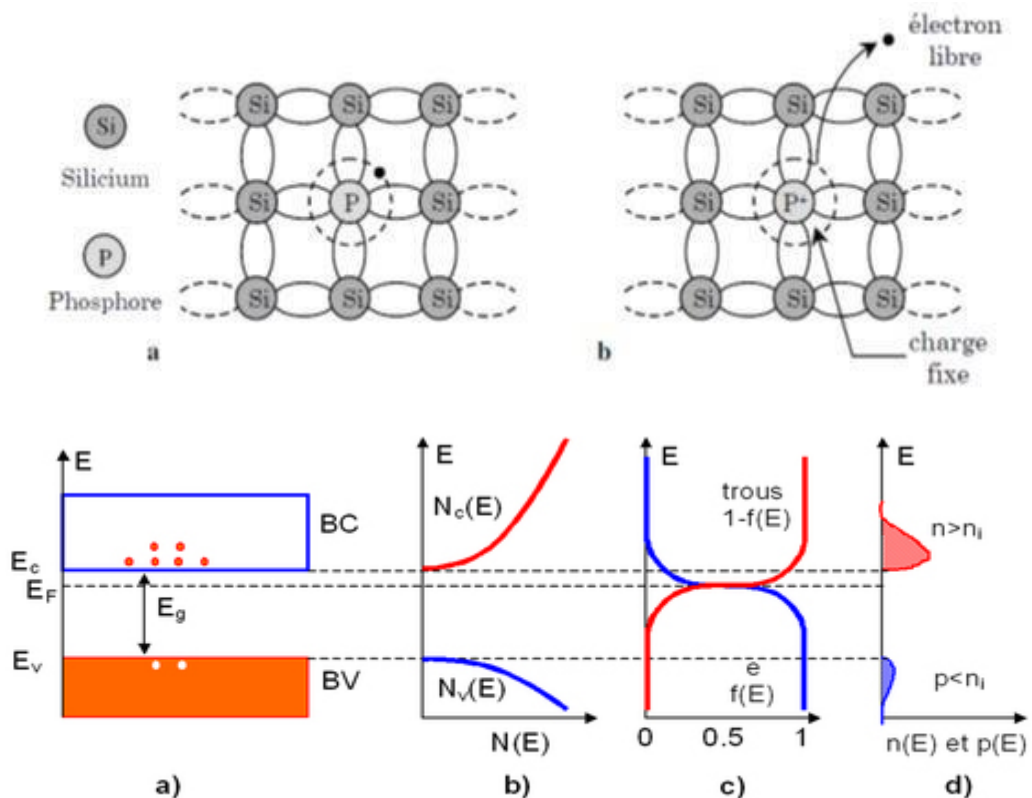
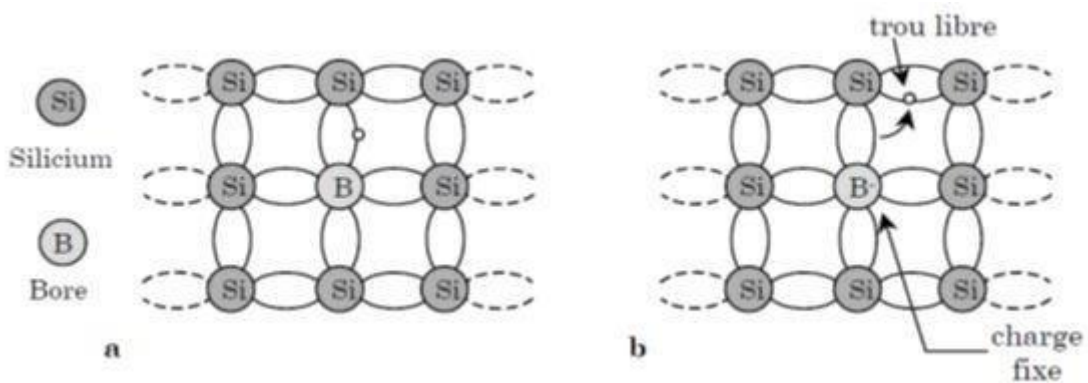


Figure 2 semi conducteurs extrinsèques dopés N.

**I.3.2.2 Les semi conducteurs extrinsèques dopés P**

Contrairement aux semi-conducteurs de type n, si nous introduisons une impureté trivalente (3 électrons) dans la structure cristalline, telle que l'aluminium, le bore ou l'indium, seuls trois électrons de valence sont disponibles dans la liaison covalente la plus externe[12]. Ce qui signifie que la quatrième liaison ne peut pas être formée. Par conséquent, une connexion complète n'est pas possible, donnant au matériau semi-conducteur une abondance de porteurs chargés positivement appelés trous dans la structure du cristal[13]. Comme il y a un trou, un électron libre adjacent est attiré par celui-ci et essaiera de se déplacer dans le trou pour le remplir. Cependant, l'électron remplissant le trou laisse un autre trou derrière lui et donne l'impression que les trous se déplacent comme une charge positive à travers la structure cristalline (flux de courant conventionnel). Comme chaque atome d'impureté génère un trou, les impuretés trivalentes sont généralement appelées accepteurs car elles acceptent continuellement des électrons supplémentaires. Le bore (B) est fréquemment utilisé comme additif trivalent car il ne possède que 5 électrons disposés en 3 coquilles autour du noyau [2]. L'addition du bore provoque une conduction composée principalement de porteurs de charge positifs, ce qui donne un matériau de type p et les trous positifs sont appelés porteurs majoritaires tandis que les électrons libres sont appelés porteurs minoritaires



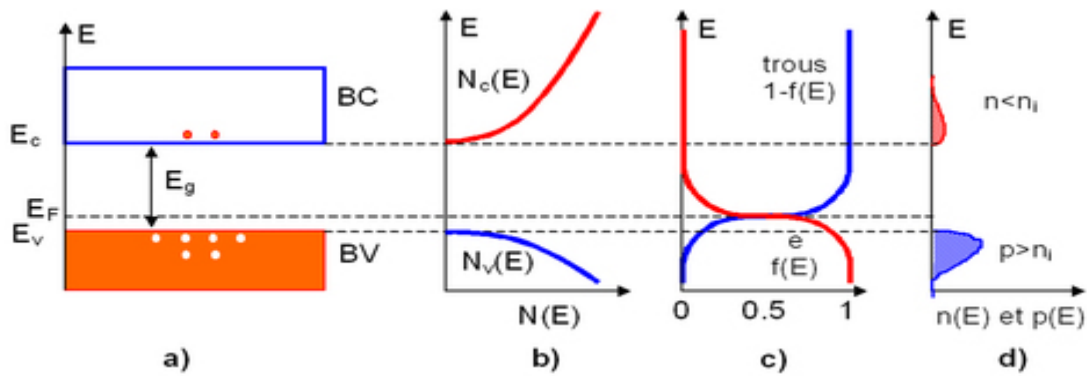


Figure 3 Les semi conducteurs extrinsèques dopés P.

#### I.4 Semi-conducteurs III-V

Les avancées réalisées par les chimistes, les physiciens des matériaux et les technologues ont joué un rôle crucial dans la recherche et la fabrication de nouveaux matériaux, notamment les alliages [4]. De nombreux alliages binaires, ternaires et quaternaires ont été créés grâce à leurs efforts. Ces avancées sont rendues possibles grâce au transfert de charges électroniques entre les atomes des groupes III et V, ce qui confère à ces matériaux des propriétés uniques [2].

Cette étude se focalise sur l'analyse des propriétés électroniques des composés semi-conducteurs III-V en utilisant la méthode des pseudo potentiels locaux. Ces composés sont formés par des éléments des groupes III et V du tableau périodique et présentent généralement des propriétés similaires à celles des semi-conducteurs du groupe II-VI et IV [1]. La plupart des semi-conducteurs III-V se distinguent par une bande interdite (gap énergétique) supérieure à 1 eV [2]. Dans cette perspective, les semi-conducteurs III-V tels que GaAs, ainsi que leurs alliages, se révèlent potentiellement plus performants et plus résistants aux rayonnements cosmiques que le silicium, et ce pour deux raisons évidentes : leur gap est direct et plus étendu [14].

##### I.4.1 Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V

Sont les suivants

- Grâce à leur nature semi-isolante (substrat SI), ces composés sont idéaux pour la fabrication de circuits intégrés hyperfréquences.
- Leur capacité à résister aux radiations est une autre caractéristique notable.
- Leur capacité à fonctionner à des températures élevées, ce qui revêt une grande importance dans les applications militaires.



- Leurs performances en termes de vitesse et de consommation sont nettement supérieures à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium, ce qui les rend idéaux pour les applications numériques.
- Un autre avantage important réside dans la capacité du semi-conducteur III-V à générer des ondes térahertz (THz) dans la région infrarouge lointaine du spectre électromagnétique. Cette capacité, unique et précieuse, permet de produire des ondes THz dans un dispositif compact et à température ambiante.

## I.5 Propriétés de semi-conducteur

### I.5.1 Propriétés structurales

#### I.5.1.1 Structure Zinc Blende

Le sulfure de zinc se présente sous deux formes cristallines principales, ce qui illustre souvent le polymorphisme. Dans ces deux formes, les atomes de zinc et de soufre adoptent une géométrie tétraédrique. À température ambiante, la forme la plus stable est la sphalérite, également appelée anciennement blende [8]. Cette structure cristalline peut être visualisée de deux manières : soit comme deux mailles cubiques à faces centrées (CFC), l'une composée de zinc et l'autre de soufre, imbriquées et décalées d'un vecteur  $(a/4 ; a/4 ; a/4)$ , soit comme une maille CFC classique d'un des éléments (par exemple le soufre), avec quatre des huit sites tétraédriques occupés par des atomes de l'autre élément (dans cet exemple, le zinc).[2] Cette structure cristalline a donné son nom à la configuration dite "blende", qui est présente dans de nombreux composés III-V, dont beaucoup sont des semi-conducteurs tels que GaAs, GaP, InAs, etc.

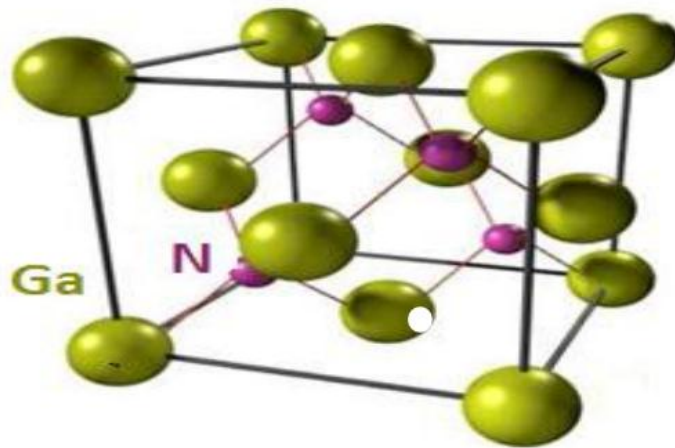


Figure 4 Réseau cristallin de la structure zinc-blende

## I.5.2 Propriétés Electroniques

La structure de bandes des semi-conducteurs joue un rôle crucial dans leurs propriétés électroniques, et la largeur de la bande interdite définit leur niveau de conductivité. Au fil des décennies, des efforts considérables ont été déployés pour déterminer avec précision, tant sur le plan théorique qu'expérimental, les structures de bandes des différents matériaux semi-conducteurs. Ces études visent à comprendre en détail les niveaux d'énergie des électrons et des trous dans les bandes de valence et de conduction, ainsi qu'à évaluer les propriétés de conduction et les caractéristiques électroniques spécifiques des semi-conducteurs [15]. La détermination de la structure de bandes d'énergie d'un semi-conducteur est un défi extrêmement complexe. Cela est principalement dû à l'absence d'une expression analytique permettant de calculer l'énergie potentielle de manière directe.

### I.5.2.1 Gap direct et Gap indirect

Dans 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 ( $k$ ) [10]. Si ces deux extrémités correspondent à la même valeur de  $k$  dans l'espace réciproque, le semi-conducteur est dit avoir un gap direct. En revanche, si le maximum et le minimum se situent à des valeurs de  $k$  différentes, le semi-conducteur est dit avoir un gap indirect, comme c'est le cas du silicium et du germanium. Cette distinction entre les semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante, en particulier dans les applications optoélectroniques qui impliquent à la fois des électrons et des photons [2].

Lorsqu'un électron effectue une transition de la bande de valence vers la bande de conduction ou lorsqu'il y a recombinaison électron-trou, il est nécessaire de conserver à la fois l'énergie (relation scalaire) et l'impulsion (relation vectorielle). Dans les semi-conducteurs à gap direct, la transition d'énergie minimale entre ces deux bandes peut se produire sans changement du vecteur d'onde, ce qui facilite l'absorption et l'émission de lumière de manière beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect. Cette différence oriente le choix des matériaux pour les applications optoélectroniques [10].

### **I.5.2.2 Transition inter bandes :**

Les propriétés optiques des matériaux, telles que l'émission, l'absorption et la diffusion de la lumière, sont déterminées par l'interaction entre le rayonnement électromagnétique et la matière, en particulier par l'interaction entre les photons et les électrons. Cette interaction joue un rôle essentiel non seulement dans les matériaux en vrac, mais aussi dans les matériaux nanostructures [10].

L'analyse de l'interaction entre le rayonnement et la matière contribue à la compréhension des transitions électroniques interbandes au sein des nanostructures quantiques...

Les nanostructures peuvent confiner les fonctions d'onde des électrons libres et des trous, ce qui entraîne une discrétisation plus marquée des bandes de conduction et de valence en niveaux d'énergie distincts. Lorsqu'un électron reçoit de l'énergie, il modifie les niveaux d'énergie correspondants [2].

Lorsqu'un photon d'énergie proche ou légèrement inférieure à l'énergie de la bande interdite est absorbé, il peut conduire à la formation d'un état de pair électron-trou excitée faiblement liée. Cela est dû à l'interaction de Coulomb entre l'électron excité et le trou, dont les états se situent juste en dessous de la bande de conduction et au-dessus de la bande de valence, respectivement. En d'autres termes, il s'agit d'une paire électron-trou spatialement délocalisée et liée [8].

Lorsqu'un électron passe de la bande de conduction au vide, en comblant un trou dans la bande de valence, un processus de recombinaison se produit où la paire électron-trou disparaît. Cette recombinaison libère de l'énergie sous forme de photon.

Dans les semi-conducteurs, la recombinaison se produit lorsque des électrons passent d'un état énergétique occupé à un état énergétique vide, entraînant la libération d'une certaine quantité d'énergie qui correspond à la différence entre ces deux états [8].

La recombinaison radiative bande à bande prédomine dans les matériaux à bande interdite directe, tandis que dans les matériaux à bande interdite indirecte, cette recombinaison radiative est moins probable car elle nécessiterait l'interaction avec des phonons en raison de l'inadéquation de l'impulsion entre les états porteurs situés aux extrémités de la bande [8].

Dans les semi-conducteurs dopés, les niveaux d'impuretés liées sont situés à proximité du bord de la bande. Lorsqu'un photon d'énergie appropriée est absorbé, il peut induire une transition du niveau donneur ou du niveau accepteur vers le niveau de conduction ou le niveau de valence, respectivement. Cela peut être clairement vu dans son Transitions inter bandes dans la figure 5.

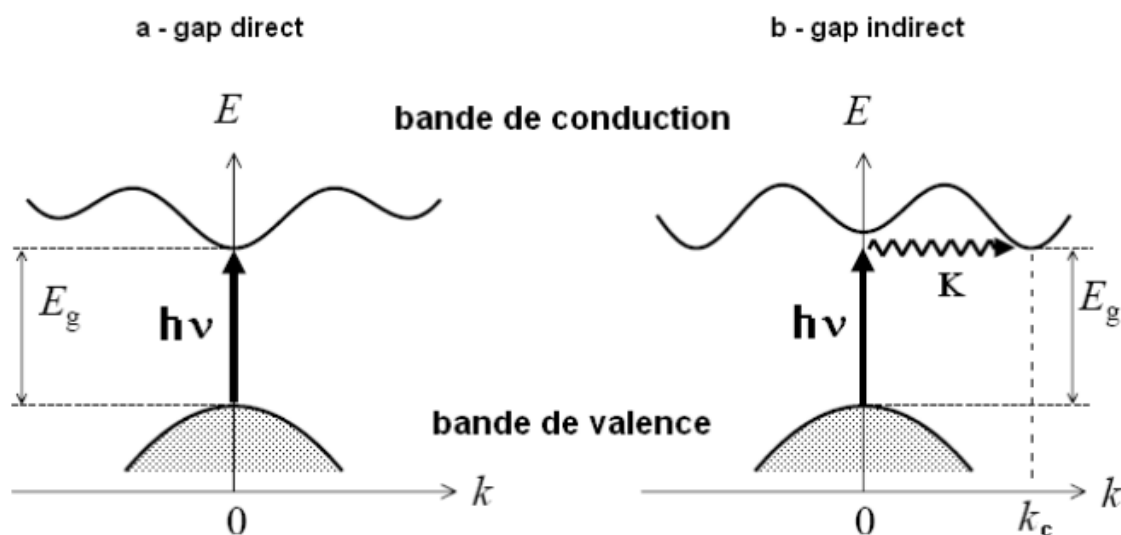


Figure 5 Transitions inter bandes a) directe b) indirecte

## I.6 Propriétés Optiques

### I.6.1 L'indice de réfraction

L'indice de réfraction  $n$  d'un milieu indique comment la vitesse de la lumière (ou d'autres ondes) est réduite dans ce milieu à une longueur d'onde spécifique.

Lorsque la lumière traverse une interface entre deux matériaux différents, elle subit un changement de direction en fonction du rapport des indices de réfraction de ces matériaux.

L'indice de réfraction  $n$  des semi-conducteurs revêt une importance fondamentale dans divers dispositifs électroniques tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les

cellules solaires et les détecteurs. La connaissance précise de cet indice est essentielle pour la conception, la caractérisation et l'optimisation de ces dispositifs. [2].

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

- **La formule de Moss basé sur le modèle atomique :**

$$n = 4 \sqrt{\frac{k}{E_g}} \dots\dots\dots I. 1$$

Où k est une constante de valeur de 108 eV.

- **La relation de Ravindra et ses collaborateurs :**

$$n = \alpha + \beta E_g \dots\dots\dots I. 2$$

Avec  $\alpha = 4,084$  Et  $\beta = -0,62eV$

- **L'expression empirique de Hervé et Vandamme :**

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \dots\dots\dots I. 3$$

Avec : A et B des constantes numériques de valeurs de 13.6 eV et de 3.4 eV respectivement

- **Modèle de Reddy et Anjaneyulu :**

$$Eg^n = 36.6 \dots\dots\dots I.4$$

- **The Ravindra relation :**

$$n = 4.16 - 0.8Eg \dots\dots\dots I.5$$

- **The Reddy and Ahammed empirical relation:**

$$n^4(Eg - 0.356) = 154 \dots\dots\dots I.6$$

**I.7 La réflectivité**

La réflectivité d'un matériau dépend de plusieurs propriétés optiques, notamment de son indice de réfraction, de la rugosité de sa surface et de la longueur d'onde de la lumière incidente [7].

Les matériaux présentant un indice de réfraction élevé ont généralement une réflectivité plus élevée, tandis que ceux ayant un indice de réfraction faible ont tendance à avoir une réflectivité plus faible. Ces facteurs influencent la manière dont la lumière est réfléchi par le matériau [13].

Lorsqu'une onde plane se propage d'un milieu à un autre avec des constantes diélectriques différentes, elle se divise en deux : une onde réfléchi et une onde réfractée. Cela se produit en raison du changement de vitesse et de direction de propagation de l'onde lorsqu'elle passe de l'un à l'autre [13].

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

$$R = \left| \frac{N - 1}{N + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \dots \dots \dots I.7$$

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

$$R = \left| \frac{N - 1}{N + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2}{(n + 1)^2} \dots \dots \dots I.8$$

**I.8 La théorie des alliages :**

Les alliages semi-conducteurs ont suscité un grand intérêt au cours des trois dernières décennies, en particulier pour étudier la variation de leurs gaps énergétiques en fonction de leur composition. Leur utilisation dans les domaines de la microélectronique et de l'optoélectronique a stimulé les chercheurs à approfondir les aspects théoriques et expérimentaux. Ainsi, différentes méthodes de croissance cristalline telles que l'épitaxie à partir des phases vapeur ou liquide, la technique de Bridgman de la zone flottante et la méthode de Czochralski ont été employées [15].

**I.9 La théorie des alliages ternaires**

Les alliages semi-conducteurs ont révolutionné les applications des dispositifs semi-conducteurs en offrant des solutions intrinsèques pour ajuster la largeur de la bande interdite, ce qui permet d'optimiser et d'élargir leurs utilisations. Parmi ces alliages, les semi-conducteurs III-V ont ouvert de nouvelles perspectives et ont été à l'origine de générations avancées de dispositifs au cours des dernières décennies [3], en augmentant considérablement les possibilités pour l'engineering des propriétés matérielles.

Ces derniers temps, les propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs III-V ont suscité un intérêt croissant en raison de leur potentiel dans les applications électro-optiques. Notamment, leur utilisation dans des domaines tels que les diodes luminescentes à haut rendement et les dispositifs à commutation rapide à grande vitesse a été largement explorée [3].

Le gap d'énergie est un paramètre crucial pour les dispositifs optoélectroniques, car il est étroitement lié à la longueur d'onde de fonctionnement. Ainsi, l'étude de la dépendance du gap d'énergie fondamental en fonction de la composition des alliages revêt une importance particulière dans ce contexte.

Dans l'étude des propriétés physiques des alliages ternaires, nous utilisons généralement la VCA (Approximation de la Cellule Unique) avec et sans désordre compositionnel. Cependant, des études récentes, à la fois expérimentales et théoriques, sur divers alliages semi-conducteurs suggèrent que la VCA atteint ses limites lorsque la différence entre les propriétés électroniques des atomes constitutifs dépasse une certaine valeur critique. On attribue généralement cette anomalie à l'effet du désordre compositionnel qui n'est pas pris en compte dans la VCA. Par conséquent, il y a un intérêt croissant pour comprendre les facteurs de "bowing", c'est-à-dire expliquer la déviation de la VCA en termes des propriétés des composants individuels [3].

Cohen et Chelikowsky fournissent davantage de détails à ce sujet. Dans cette étude, la méthode des moindres carrés non linéaire a été utilisée pour optimiser les paramètres des pseudo-potentiels empiriques [15].

Pour le cas de la VCA, les propriétés physiques sont données par l'équation suivante :

$$F_{A_xB_{1-x}C}(x) = x F_{AC} + (1-x) F_{BC} \dots \dots \dots I.9$$

Par exemple le paramètre de réseau de l'alliage ternaire  $A_xB_{1-x}C$  sera :

$$a_{A_xB_{1-x}C}(x) = xa_{AC} + (1-x) a_{BC} \dots \dots \dots \text{I.10}$$

et les facteur de forme :

$$V^{S,A}(G) = x V^{S,A}_{AC}(G) + (1-x) V^{S,A}_{BC}(G) \text{ I.12}$$

En tenant compte de l'effet du désordre, les facteurs de forme du système ternaire sont donnés par l'expression suivante :

$$V^{S,A}(G) = xV_{AC}(G) + (1-x)V \dots \dots \dots \text{I.13}$$

Où le paramètre ajustable p, stimule l'effet du désordre, et a pour valeur 0 dans la VCA seule et il est traite comme un paramètre réglable une fois le désordre compositionnel est pris en considération.

$$F_{A_xB_{1-x}C}(x) = xF_{AC} + (1 - x)F_{BC} \dots \dots \dots \text{I.14}$$

Par exemple le paramètre de réseau de l'alliage ternaire  $A_xB_{1-x}C$

$$a_{A-B_{1-x}C}(x) = xa_{AC} + (1-x) a_{BC} \dots \dots \dots \text{I.15}$$

Et les facteurs de forme :

$$V^{S,A}(G) = xV^{S,A}_{AC}(G) + (1 - x)V^{SAA}_{BC}(G) \dots \dots \text{I.16}$$

En tenant compte de l'effet du désordre, les facteurs de forme du système ternaire sont donnés par l'expression suivante :

$$V^{S,A}(G) = xV^{S,A}_{AC}(G) + (1 - x)V^{S,A}_{BC}(G) - p[x(1 - x)]^{\frac{1}{2}}[V^{S,A}_{AC}(G) - V^{S,A}_{BC}(G)] \dots \dots \text{I.17}$$

Où le paramètre ajustable p, stimule l'effet du désordre, et a pour valeur 0 dans la VCA seule il est traité comme un paramètre réglable une fois le désordre compositionnel est pris en considération.

**I.10 La théorie d'un alliage semi-conducteur ternaire  $Al_xGa_{1-x}N$**

Le matériau  $Al_xGa_{1-x}N$ , un ternaire III-nitride, a connu une révolution récente dans le domaine de l'éclairage ultraviolet, transformant ainsi la technologie de l'éclairage. Une étude systématique du système GaN-AlN, basée sur un algorithme évolutif ab initio, a démontré que



les alliages  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  conservent une structure ordonnée à l'état fondamental dans des conditions ambiantes [1].

Ces composés  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  sont des semi-conducteurs robustes capables de résister à des doses élevées de rayonnement tout en maintenant leurs propriétés optoélectroniques. En ajustant la composition, la bande interdite peut couvrir une large gamme du spectre électromagnétique, allant du visible à l'ultraviolet, ce qui les rend adaptés à une variété de dispositifs optoélectroniques tels que les diodes laser et les diodes.

La structure de bande électronique des alliages  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  varie en fonction de la composition. La dépendance de la bande interdite par rapport à la composition est presque linéaire, s'étendant entre les valeurs des binaires (GaN) et (AlN). Les calculs de la structure de bande électronique de GaN et AlN, réalisés à l'aide de la méthode des pseudo-potentiels à onde plane, montrent que les deux phases présentent une bande interdite directe au point de symétrie le long des lignes de haute symétrie [7].

### I.11 L'effet du désordre

Le désordre engendre des altérations des caractéristiques d'un matériau ou d'un système lorsque des imperfections ou des défauts sont présents. Ces derniers peuvent résulter de diverses sources telles que des impuretés, des défauts de cristallisation, des irrégularités de surface ou encore des variations aléatoires de composition ou de structure à l'échelle nanométrique.

En général, l'impact du désordre (variation dans la composition) est étudié comme une perturbation évaluée à l'aide de l'approche V.C.A. (Approximation d'Auto-Consistance Virtuelle) au second ordre [3]. Ces méthodes sont simples et donnent des résultats rapides et en général fiables.

Le désordre provoque le déplacement de toutes les bandes, entraînant une diminution du minimum des bandes de conduction à un point spécifique, ce qui se traduit par une réduction des écarts fondamentaux.

Pour analyser les propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs, on utilise une approche combinant la méthode des pseudo-potentiels empiriques locaux et l'approximation du cristal virtuel. Cette méthode considère l'effet du désordre comme un potentiel effectif. [3]

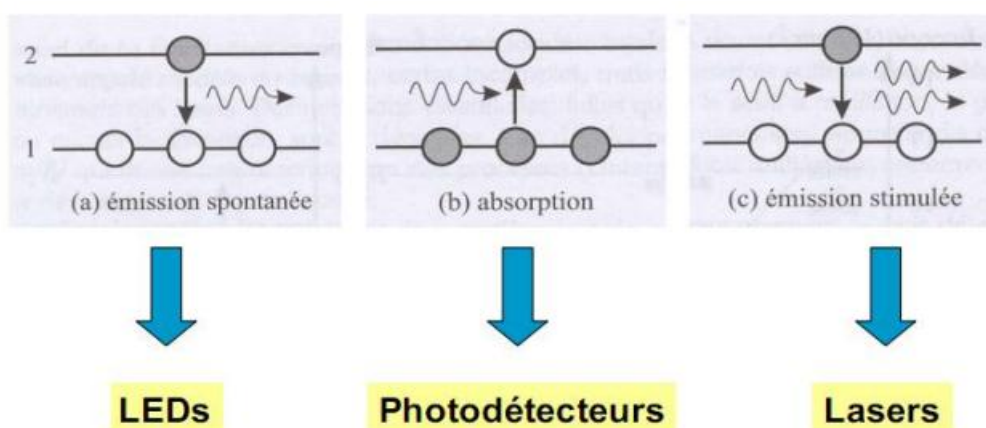
À une pression donnée, les facteurs de forme des pseudo-potentiels pour l'alliage étudié sont obtenus en utilisant l'approche VCA qui prend en compte l'effet du désordre compositionnel. Parallèlement, la constante de réseau du composé  $ZnS_xSe_{1-x}$  est estimée en utilisant la loi de Vegard [15].

Lors de leurs études sur les densités de charge calculées des bandes de valence pour les alliages III-V, ils constatent que la présence de l'effet du désordre affecte les bandes de valence [3].

### I.12 Les applications optoélectroniques

L'optoélectronique, également connue sous le nom d'optronique, se concentre sur l'étude et l'utilisation de dispositifs et de systèmes électroniques qui manipulent, détectent et contrôlent la lumière. Cela englobe un large éventail d'applications dans le domaine de la photonique. En effet, la lumière prise en compte dans ce contexte englobe non seulement la lumière visible, mais aussi d'autres formes de rayonnement généralement invisibles, telles que les rayons gamma, les rayons X, les ultraviolets et les infrarouges [3].

Les matériaux semi-conducteurs interviennent dans la construction de détecteurs de rayonnement lumineux et de sources de radiation spontanée ou stimulée, la figure 6 ci-dessous montre les trois phénomènes ainsi que leurs domaines d'applications



**Figure 6** Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.

**I.13 Conclusion**

Ce chapitre a pour objectif de rappeler les notions générales concernant les semi-conducteurs. De plus, nous fournirons un aperçu des propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs. Nous nous concentrerons principalement sur la revue de la structure cristalline Zinc Blende et des semi-conducteurs inorganiques de classe III-V tels que le GaAs. Dans ce chapitre, nous aborderons deux types de théories des alliages, à savoir la théorie des alliages ternaires et la théorie d'un alliage semiconducteur ternaire spécifique,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .

# Chapitre 2

## II.1 Introduction

Pour comprendre le comportement des propriétés physiques des semi-conducteurs dans diverses conditions externes complexes, il est nécessaire d'approfondir les concepts théoriques des bandes d'énergie, en allant au-delà du niveau macroscopique.

Les bandes d'énergie décrivent les niveaux d'énergie possibles d'un électron en fonction de son vecteur d'onde. L'étude de l'électron libre, qui existe sans aucune interaction, constitue la base du modèle utilisé pour reproduire le comportement réel d'un semi-conducteur. Lorsque des atomes identiques se rapprochent pour former un solide, une interaction se produit entre les électrons des atomes du cristal, ce qui divise chaque niveau d'énergie discret en un ensemble d'états très proches les uns des autres une bande d'énergie électronique. Ainsi, dans un cristal, les orbitales liantes forment la bande de valence (la plus élevée complètement occupée), tandis que les orbitales anti-liantes forment la bande de conduction (la première vide). La plus haute énergie de la bande de valence et la plus basse de la bande de conduction sont séparées par une région énergétique interdite appelée gap. La description de ces phénomènes est essentiellement basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger, qui permet de décrire l'état stationnaire des électrons et des noyaux atomiques du matériau.

## II.2 Equation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger, formulée par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1925[thèse], est une équation fondamentale de la mécanique quantique. Elle distingue les solides des liquides et des corps amorphes en raison de leur arrangement périodique d'atomes, de molécules ou d'ions [11]. La base de cette équation repose sur l'ensemble des états de position, dépendant d'une fonction scalaire appelée fonction d'onde, introduite par Schrödinger. Cette équation décrit l'évolution temporelle d'une particule massive non relativiste et joue un rôle équivalent à la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique [2]. Ainsi, elle aboutit à l'expression célèbre de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi(R, r) = E\psi(R, r) \dots \dots \dots \text{II. 1}$$

Où : R les coordonnées des noyaux, r celles des électrons, E l'énergie totale du système et  $\psi(r,R)$  la fonction d'onde du système [11]. Où H représente l'hamiltonien du système cristallin,  $\psi$  sa fonction propre et E l'énergie propre. La fonction d'onde  $\psi$  dépend de toutes les particules de cristal.

$$H = E_e + E_n + V_e + V_n + E_{en} + E_{nn} \dots \text{II. 2}$$

Avec :  $E_e$  l'énergie cinétique des électrons,  $E_n$  l'énergie cinétique des noyaux,  $V_e$  l'énergie de répulsion électron - électron,  $V_{en}$  l'énergie d'attraction électron - noyau,  $V_{nn}$  l'énergie de répulsion noyau - noyau

### II.3 Les approximations

#### II.3.1 L'approximation Born-Oppenheimer

La mécanique quantique offre une description des molécules en termes d'interactions entre les noyaux et les électrons, tandis que la géométrie moléculaire est déterminée par les arrangements qui minimisent l'énergie des noyaux. Toutes les méthodes de la mécanique quantique sont ultimement basées sur l'équation de Schrödinger. Cette équation peut être résolue exactement pour l'atome d'hydrogène, qui est un système à un électron [11]. Cependant, pour des systèmes plus complexes tels qu'un atome d'hélium ou une molécule d'hydrogène à deux électrons, cette équation ne peut pas être résolue analytiquement (ou du moins, cela n'a pas encore été réalisé). Par conséquent, des approximations doivent être introduites pour développer des méthodes pratiques de résolution [8].

Pour simplifier l'équation de Schrödinger des systèmes moléculaires, on utilise l'approximation de Born-Oppenheimer, qui tient compte de la grande différence de masse entre les électrons et les noyaux. Cette approximation suppose que les électrons peuvent répondre presque instantanément aux mouvements des noyaux, tandis que les noyaux restent pratiquement immobiles [8]. Bien sûr, les noyaux bougent réellement, mais leur mouvement est considéré comme " lent " par rapport à celui des électrons. Ainsi, au lieu de résoudre simultanément l'équation de Schrödinger pour toutes les particules, on considère les noyaux comme étant fixes dans leur position et on résout l'équation de Schrödinger pour les électrons [15].

Dans cette hypothèse, l'énergie potentielle négative est représentée par le potentiel électrostatique attractif d'un ion fixe situé au point  $R_0$  du réseau de Bravais. Cela simplifie l'équation de Schrödinger car les termes  $E_n$  et  $V_n$  deviennent nuls. Par conséquent, l'hamiltonien peut être exprimé de la manière suivante :

$$H_e = E_e + V_e + E_{en} \dots \text{II. 3}$$

En désignant par  $\psi_e$  la fonction d'onde des électrons. Cette fonction d'onde doit dépendre des coordonnées des électrons et celles des noyaux immobiliers.

L'équation de Schrödinger peut s'écrire donc :

$$H_e \psi_e(R, r) = E_e \psi_e(R, r) \dots \dots \dots \text{II. 4}$$

Dans cette approximation adiabatique, les coordonnées (R<sub>i</sub>) des noyaux sont traitées comme des constantes plutôt que des variables. L'équation de Schrödinger devient :

$$\left[ \sum_i \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{r_i - r_j} - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,n} \frac{Ze^2}{|r_i - R_n|} \right] \psi_e = E_e \psi_e \dots \dots \dots \text{II.5}$$

Pour une approximation plus adéquate, il est préférable de tenir compte du mouvement des noyaux. Soit H<sub>n</sub> l'hamiltonien nucléaire défini par :

$$H_n = E_n + V_n + E_n(R) \dots \dots \dots \text{II. 6}$$

Les fonctions d'ondes du cristal peuvent se mettre sous la forme d'un produit entre les fonctions d'ondes électroniques et les fonctions d'ondes nucléaires.

$$\psi(R, r) = \psi_n(R) \psi_e(R, r) \dots \dots \dots \text{II. 7}$$

Où :

$\psi_e(R, r)$  et  $\psi_n(R)$  dans l'équation précédente représentent la fonction d'onde électronique et la fonction d'onde nucléaire respectivement. Ces deux fonctions d'ondes sont déterminées à partir des équations suivantes :

$$H_e \psi_e = E_e \psi_e \dots \dots \dots \text{II. 8}$$

$$H_n \psi_n = E_n \psi_n \dots \dots \dots \text{II. 9}$$

Dans l'approximation de Born-Oppenheimer, la fonction d'onde des électrons est déterminée par la position instantanée des noyaux (représentée par le terme V<sub>e</sub> dans l'expression H<sub>e</sub>), tandis que la fonction d'onde des noyaux est déterminée par le champ moyen des électrons (représenté par le terme E<sub>e</sub> dans l'expression H<sub>n</sub>).

### II.3.2 Les approximations Hartree

L'approximation de Born-Oppenheimer a été initialement introduite par Douglas Hartree en 1928[8]. Étant donné que l'équation de Schrödinger électronique représente un problème à

N corps en raison du terme d'interaction électron-électron, elle ne peut pas être résolue exactement, sauf dans les cas avec un seul électron. Afin de simplifier le problème, on le réduit à celui d'une seule particule, considérant les électrons comme indépendants [2]. Ainsi, chaque électron se déplace dans un champ moyen créé par les noyaux et les autres électrons.

Le problème se réduisant à une particule seulement, l'équation (8-9) peut s'écrire comme suit :

$$H_i \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \dots \dots \dots \text{II. 10}$$

Où  $H_i$  ; est l'Hamiltonien mono-électronique défini :

$$H_i = -\frac{1}{2} \Delta_i + V_{\text{ext}}(r) + V_i(r) \dots \dots \dots \text{II. 11}$$

Où  $V_{\text{ext}}$  est le potentiel dû aux interactions noyaux-noyaux et celles des autres électrons-noyaux

$V_i(r)$  est le potentiel de Hartree détermine les fonctions d'ondes mono électroniques  $\psi_i(r)$ .

- La principale limitation de la méthode de Hartree est son incapacité à prendre en compte le principe de Pauli.,
- La fonction d'onde  $\psi_i$  ne possède pas la propriété d'antisymétrie par rapport à l'échange des coordonnées de deux électrons.
- Cette méthode traite les électrons comme des particules discernables et néglige complètement la corrélation électronique et les effets d'échange.

### II.3.3 Les approximations Hartree Fock :

Hartree et Fock ont étendu ce concept en respectant le principe de Pauli en exprimant la fonction d'onde sous la forme d'un déterminant de Slater. Cela conduit aux équations de Hartree-Fock pour un système à une seule particule. Cependant, même ces équations sont difficiles à résoudre lorsque le système contient plusieurs électrons. Dans cette approximation, les électrons sont considérés comme indépendants, se déplaçant dans le champ moyen créé



par les autres électrons et les noyaux. Le problème est ainsi réduit à celui d'une seule particule [15], et l'équation peut être écrite de la manière suivante :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E(k) \psi(r) \dots \text{II. 12}$$

Où :  $V(r)$  est le potentiel cristallin, terme possédant la périodicité du réseau. Le caractère non local du potentiel d'échange est le majeur problème dans les approximations de Hartree Fock, en plus elles ne tiennent pas compte des interactions entre électrons de spins anti parallèles.

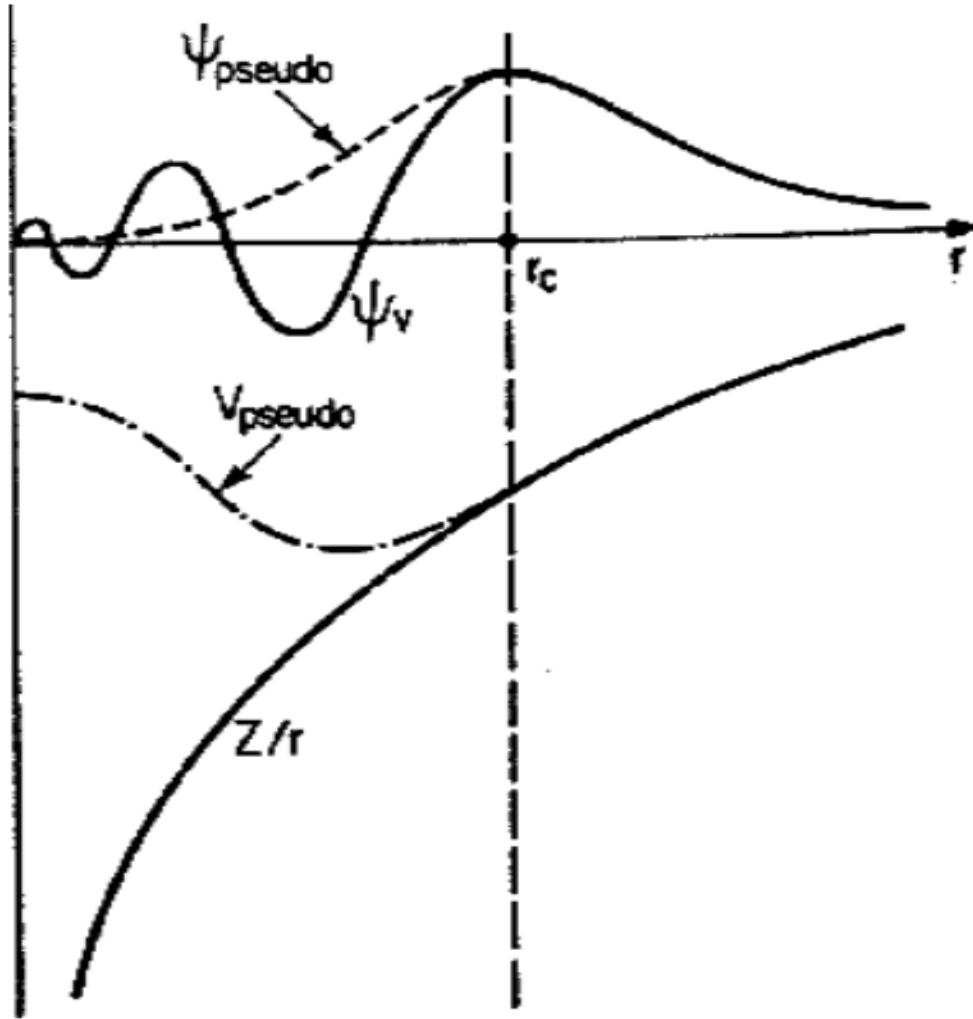
#### II.4 La méthode des pseudos potentiels :

En 1934, Fermi a introduit une méthode visant à décrire les états atomiques de haut niveau en remplaçant les effets complexes des électrons du noyau par un potentiel effectif représenté par des pseudo-ondes des électrons de valence [2]. Peu de temps après, Hellmann a développé le concept de pseudo-potentiel (PSP) et l'a utilisé pour décrire les niveaux d'énergie des atomes alcalins. Bien que cette approche ait connu un succès initial [3], il a fallu attendre le milieu du XXe siècle pour que la méthode du plan d'ondes orthogonalisées (O.P.W) soit proposée par Herring, [2] permettant ainsi le calcul efficace des fonctions d'onde des métaux et des semi-conducteurs en utilisant le PSP.

Dans le domaine de la chimie, l'un des concepts fondamentaux est que seuls les électrons de valence sont chimiquement actifs, tandis que les électrons du cœur sont considérés comme inactifs et jouent un rôle de spectateurs lors des réactions chimiques (approximation du cœur gelé).

Pour simplifier le traitement des interactions électroniques, il est possible d'utiliser des pseudos potentiels qui permettent de remplacer l'effet des électrons du cœur sur un système de valence, que ce soit dans un atome, une molécule ou un système infini [3].

Toutefois, il est important de noter que les calculs utilisant des pseudos potentiels sont moins précis que ceux qui prennent en compte tous les électrons.



**Figure 7** En haut : orbitale de valence (trait plein) et pseudo-orbitale (tirets), en bas : potentiel coulombien (trait plein) et potentiel modèle (points-tirets).

La théorie consiste à remplacer le potentiel auto-cohérent  $V(r)$  dans l'équation mono-électronique par un pseudo potentiel qui présente des caractéristiques similaires à longue distance tout en étant peu profond dans le cœur ionique. Les états propres des électrons de conduction,  $\Psi_{\mathbf{k}}(r)$ , sont définis comme étant orthogonaux aux états du cœur. Pour cela, on utilise une décomposition en ondes planes orthogonales (OPW) [16]. Ainsi, on peut exprimer cette idée de la manière suivante :

$$\Psi_{\mathbf{i}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{\mathbf{k}}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{\mathbf{q}}} a_{\vec{\mathbf{q}}}(\vec{\mathbf{k}}) \underbrace{\langle (1 - \hat{P}) | \vec{\mathbf{k}} + \vec{\mathbf{q}} \rangle}_{\text{OPW}} = (1 - \hat{P}) \chi_{\vec{\mathbf{k}}}(\vec{r}) \dots \text{II.13}$$

En utilisant l'opérateur de projection  $P$  sur les états du cœur, la pseudo-fonction d'onde  $\chi_{\mathbf{k}}(r)$  est construite pour être identique à la fonction d'onde réelle en dehors du cœur ionique,

tout en présentant une diminution des oscillations à l'intérieur des cœurs. Sur la base de cette décomposition, Phillipps et Kleinman ont proposé une reformulation de l'équation mono-électronique de la manière suivante :

$$\left[ T + \underbrace{V(\vec{r}) + (E_{\vec{k}} - H)\hat{p}}_{W(\vec{r})} \right] \chi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}} \chi_{\vec{k}}(\vec{r}) \dots \dots \text{II.14}$$

Nous pouvons constater que ce réarrangement purement formel des termes de l'équation mono-électronique revient à introduire un potentiel d'orthogonalisation  $(E_{\vec{k}} - H) P$ . Ce dernier permet de définir un pseudo potentiel  $W(r)$  tel que la pseudo fonction d'onde  $\chi_{\vec{k}}(r)$  soit solution de la pseudo-équation de Schrödinger :

$$[T + W(\vec{r})] \chi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}} \chi_{\vec{k}}(\vec{r}) \dots \dots \dots \text{II.15}$$

Dont les valeurs propres  $E_{\vec{k}}$  correspondant aux états de valence

## II.5 Les propriétés des pseudos potentiels

Si l'on devait explicitement inclure tous les électrons d'un système et utiliser un ensemble de base d'ondes planes construit à partir du potentiel coulombien complet des noyaux, le coût de calcul serait prohibitif. Les oscillations rapides des fonctions d'onde près du noyau et la nécessité d'une condition d'orthogonalité entre différents états exigeraient une très grande énergie de coupure et donc un ensemble de base volumineux. Heureusement, les études en Physique et en Chimie ont montré que les électrons du cœur des différents atomes sont pratiquement indépendants de l'environnement atomique environnant, tandis que seuls les électrons de valence jouent un rôle prépondérant dans les interactions entre atomes. Ainsi, on peut supposer que les états des électrons du cœur restent fixes, et il est possible de construire un pseudo potentiel pour chaque espèce atomique qui prend en compte les effets combinés des électrons du cœur et du noyau.

### II.1 La méthode empirique du pseudo potentiel local

Cette approximation a été largement utilisée depuis son introduction par Chelikowsky et Cohen [1]. L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux  $V(G)$  du pseudopotentiel  $V_{PS}(r)$  qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques [5].

Les paramètres du pseudopotentiel  $V^S(G)$  et  $V^A(G)$  sont déterminés en comparant les gaps d'énergies aux points de hautes symétries avec les données expérimentales des transitions optiques en utilisant la méthode des moindres carrés. Ces paramètres sont variés jusqu'à ce que l'on ait un bon accord avec le nombre maximum possible de transitions optiques (Méthode d'ajustement) [6].

$$V_{PS}(r) = \sum_{R,\tau} V_{\alpha}(r - R - \tau) \quad \text{II.16}$$

Où :

$R$  : est un vecteur du réseau direct.

$\tau$  : est le vecteur de translation du réseau direct.

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

$$V(r) = \sum_G V_{\alpha}(G) S(G) e^{iGr} \quad \text{II.17}$$

$S(G)$  : est le facteur de structure.

$V(G)$  : est le facteur de forme.

On peut se limiter à quelques facteurs de formes, par exemple, pour les structures diamant et zinceblende, on utilise que trois facteurs de formes  $V(G)$ :  $G^2=3, 8, 11$  en unité de  $(2\pi/a)$

La fonction d'onde  $\psi(r)$  et les valeurs de la bande d'énergie  $E(K)$  sont les solutions de:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{PS}(r) \right] \psi_k(r) = E_k \psi(r) \quad \text{II.18}$$

Où :

$n$  : représente l'indice de la bande.

$V_{PS}$  : est le pseudopotentielpériodique.

$\psi_k$  : Les fonctions de Bloch et peuvent être développées en une série d'onde planes.

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

Pour les semiconducteurs de type diamant ou zincblende :

$$V(G) = V^S(G) \cos(G\tau) + iV^A(G)\sin(Gr) \quad \text{II.19}$$

Où :

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) + V_B(G)] \quad \text{II.20}$$

$$V^A(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) - V_B(G)] \quad \text{II.21}$$

Où :

$$\tau = \pm 1/8(1,1,1)a \quad \text{II.22}$$

$a$  : est la constante du réseau.

$V^S$  et  $V^A$  : sont respectivement les facteurs de forme atomiques symétriques et antisymétriques.

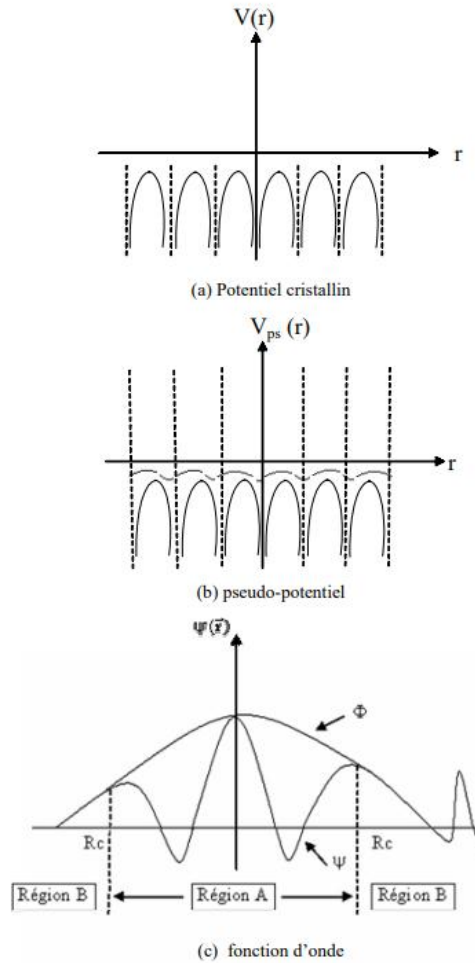


Figure 8 la fonction d'onde et le potentiel.

Le calcul de l'EPM (État Pseudo-Moyen) est réalisé en utilisant le potentiel effectif  $V(G)$  tel qu'illustré dans le diagramme. La structure du système est prise en compte par le facteur de structure, et l'équation de Schrödinger est résolue pour obtenir les valeurs propres d'énergie  $E(k)$  et les pseudo-fonctions d'onde  $\psi_k(r)$  associées aux pseudos potentiels.

Ces énergies sont comparées avec l'expérience et 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. Généralement un petit nombre d'itération suffit pour concorder entre la théorie et l'expérience. [3]

La procédure de calcul de la méthode E.P.M est montrée dans le diagramme suivant :

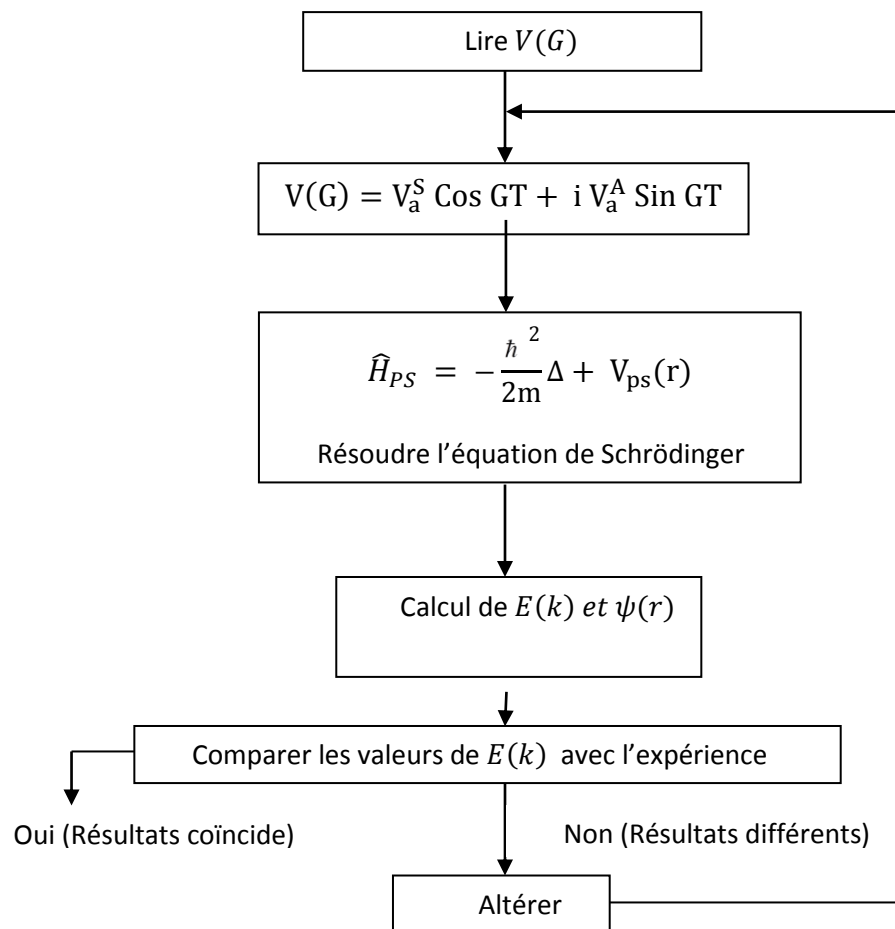


Figure 9 L'algorithme de fonctionnement de l'EPM local

## II.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exploré différentes méthodes de calcul des bandes d'énergie, bénéficiant des progrès réalisés dans la résolution de l'équation de Schrödinger. Ces méthodes ont été le fruit de nombreuses approximations, dont l'approximation de Hartree-Fock, l'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer et l'approximation des liaisons fortes.

L'utilisation de la méthode des pseudos potentiels empiriques (EPM) repose sur l'idée de se concentrer uniquement sur les états de valence, sans avoir besoin de calculer les états du noyau, qui ne contribuent pas significativement aux propriétés physiques du système. Ainsi, les états réels sont représentés par des pseudo-fonctions d'onde, qui peuvent être décrites dans l'espace de Fourier à l'aide d'un nombre restreint d'ondes planes. Cette approche permet de

simplifier les calculs numériques, tout en conservant les principales caractéristiques des systèmes étudiés



# Chapitre 3

### III.1 Introduction

Dans notre étude, nous avons étudié les propriétés optoélectroniques de l'alliage semi-conducteur ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en utilisant la méthode pseudopotentielle empirique (E.P.M) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCAA), avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.

Nous nous sommes intéressés à l'étude du gap énergétique, la structure de bandes en fonction du vecteur d'onde  $k$ , l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence appropriée à l'alliage semi-conducteur ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Egalement, nous avons étudié l'effet du désordre compositionnel sur la variation de ces propriétés en fonction de la concentration de l'Aluminium.

### III.2 Les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs

Les propriétés des composés binaires sont les plus connues néanmoins elles sont fixes tels que le gap énergétique, le paramètre du réseau etc. Alors que certaines applications exigent des propriétés intermédiaires à celles des composés binaires qu'on peut obtenir, par exemple, par l'utilisation des alliages ternaires ouvrant ainsi la possibilité d'ajuster les propriétés physiques à savoir gap d'énergie, la constante du réseau, etc.... en variant seulement la composition des alliages.

Notre étude est focalisée sur les composés binaires à savoir le Nitrure de Gallium (GaN) de longueur d'onde égale à 373nm et le Nitrure d'Aluminium (AlN) de longueur d'onde égale à 288nm, ainsi que leurs alliages ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  qui disposent de cette variation de gamme d'énergie. Le semiconducteur ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  s'est rapidement révélé essentiel pour la réalisation de composants optoélectroniques fonctionnant dans l'ultra-violet, il suscite donc un intérêt pour les applications en électronique telles que les Diodes électroluminescentes (LED) UV, Laser UV.

#### III.2.1 Les propriétés électroniques

La nature empirique de la méthode des pseudos potentiels (l'E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA), afin de réaliser un accord le plus étroit des niveaux

d'énergies calculés avec les valeurs théoriques. Les facteurs de formes ou les paramètres pseudo potentiels ajustés des matériaux semi-conducteurs GaN et ALN ainsi que les paramètres de réseau sont illustrés dans le Tableau 1 et Tableau 2 ci-dessous :

**Tableau 1.** Facteurs de forme symétriques et antisymétriques des composés binaires GaN et ALN.

Composants	$V_S (3)$	$V_S (8)$	$V_S (11)$	$V_A (3)$	$V_A (8)$	$V_A (11)$
<b>GaN</b>	-0.3096	0.112783	0.067538	0.28	0.33	0.015
<b>AlN</b>	-0.3096	-0.016	0.212	0.160	0.200	0.135

**Tableau 2.** Paramètres de réseaux des composés binaires GaN et ALN

Composé binaire	Paramètre du réseau (Å)
GaN	4.5
ALN	4.37

En injectant les facteurs de forme présentés dans le Tableau 1, dans le code EPM, et après calcul on obtient les gaps d'énergies des composés binaires GaN et ALN qui sont illustrés dans le Tableau 3.

D'après le tableau 3, on remarque les gaps énergétiques des composés binaires GaN et ALN aux points de haute symétrie  $\Gamma$ , X et L sont en très bon accord avec l'expérience reportée par les références [8,9].

**Tableau 3.** Comparaison des gaps énergétiques calculés et référenciés des composés binaire GaN et AlN.

Composés binaires	Gap d'énergie (eV)					
	$E_{\Gamma-\Gamma}$		$E_{\Gamma-x}$		$E_{\Gamma-L}$	
	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp
<b>GaN</b>	3.29533 <sup>a</sup>	3,3 <sup>b</sup>	4.56824 <sup>a</sup>	3.5 <sup>b</sup>	6.03712 <sup>a</sup>	5.590 <sup>b</sup>
<b>AlN</b>	6.00562 <sup>a</sup>	5,94 <sup>b</sup>	4.90801 <sup>a</sup>	4.26 <sup>b</sup>	9.30418 <sup>a</sup>	9.300 <sup>b</sup>

Où :

<sup>a</sup>) : valeur calculée

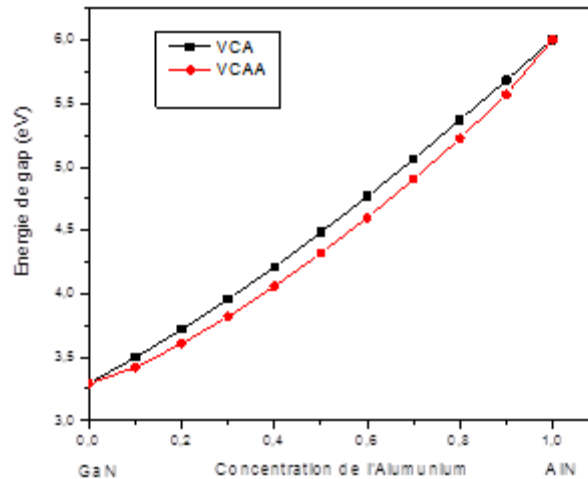
<sup>b</sup>) : valeur expérimentale [1]

### III.2.1.1. Gap énergétique

Le gap d'énergie est connu pour être l'un des paramètres de dispositif les plus importants parce qu'il est fortement relié à la longueur d'onde de fonctionnement des dispositifs optoélectroniques. Pour cela la dépendance du gap d'énergie fondamental en fonction de la composition de l'alliage prend une importance particulière.

Pour avoir une idée générale sur les transitions optiques, on a étudié la variation du gap énergétique direct  $E_{\Gamma-\Gamma}$ , et indirects  $E_{\Gamma-x}$ ,  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la composition  $x$  en utilisant la VCA avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.

La figure 10 montre la variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma-\Gamma}$  en fonction de la composition  $x$  calculé en utilisant la VCA avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.



**Figure 9.** Variation de l'énergie de gap  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec et sans désordre.

Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur les deux courbes nous donne les expressions analytiques de la forme suivantes :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = 0.66818 x^2 + 2.06091 x + 0.66818 \quad \text{III.3 VCA}$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = 1.30009 x^2 + 1.40165 x + 3.28348 \quad \text{III.4 VCAA}$$

Ces expressions analytiques ont la forme générale suivante :

$$E(x) = cx^2 + bx + a$$

Où  $c$  représente le terme quadratique, appelé aussi le bowing optique du gap énergétique.

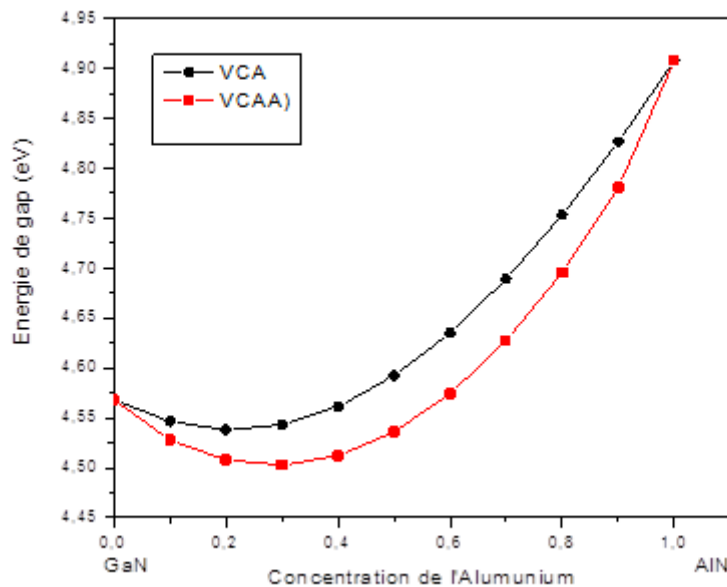
On remarque que le bowing optique dans les deux équations est différent. L'utilisation de la VCA seule, c'est-à-dire on a un facteur de désordre nul ( $p=0$ ), nous donne un bowing optique ( $c$ ) égale à 0.66 eV, c'est une valeur complètement en désaccord avec la valeur expérimentale qui est de 1.3 eV trouvé par certains résultats rapportés par Isomura et al [17].

Cependant quand on utilise la VCA améliorée, c'est-à-dire on tient compte de l'effet du désordre comme un potentiel effectif dans le potentiel total du cristal ( $p \neq 0$ ), un très bon accord est trouvé avec le bowing expérimental qui est de 1.3 eV pour un facteur de désordre  $p = 0.10012$ . La faible valeur de  $p$  suggère que l'effet du désordre compositionnel

sur l'énergie de gap direct  $E_{\Gamma}^F$  dans le cas de notre alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  n'est pas aussi important comparé à d'autres alliages semiconducteurs ternaires III-V.

La Figure 10 montre la variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma-\Gamma}$  en fonction de la concentration  $x$ , en allant de GaN ( $x=0$ ) vers le AlN ( $x=1$ ) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. On remarque que la variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma-\Gamma}$ , pour les deux courbes, augmente d'une façon monotone et linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium et ceci confirmé par les équations III.3 et III.4. On remarque aussi que l'effet de désordre influe légèrement sur la variation de  $E_{\Gamma-\Gamma}$  en fonction de la concentration de l'Aluminium.

La Figure 11 montre la variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma-X}$  en fonction de la composition  $x$  calculé en utilisant la VCA avec et sans désordre.



**Figure 10** Variation de l'énergie de gap  $E_X^F$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec et sans désordre

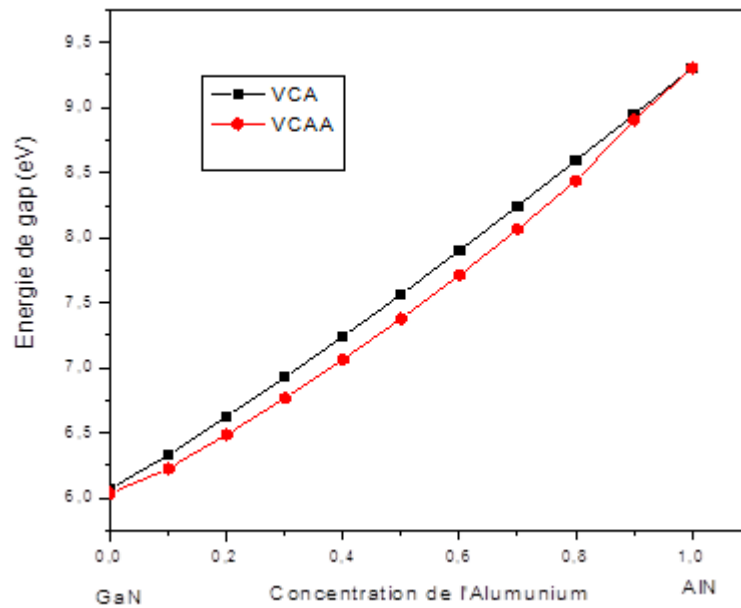
Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur les deux courbes nous donne les expressions analytiques de la forme suivantes :

$$E_X^\Gamma(x) = 0.58369 x^2 - 0.23531 x + 4.56439 \quad \text{III.5} \quad \text{VCA}$$

$$E_X^\Gamma(x) = 0.80114 x^2 - 0.4751 x + 4.57 \quad \text{III.6} \quad \text{VCAA}$$

La variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma-X}$  en fonction de la concentration  $x$ , en allant de GaN ( $x=0$ ) vers le AlN ( $x=1$ ) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel est illustrée sur Figure 11. On remarque que la variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma-X}$ , pour les deux courbes, augmente d'une façon non monotone et non linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium et ceci confirmé par les équations III.5 et III.6. On remarque aussi que l'effet de désordre n'influe pratiquement pas sur la variation de  $E_{\Gamma-\Gamma}$  en fonction de la concentration de l'Aluminium. On remarque aussi que l'effet de désordre affecte la variation de  $E_{\Gamma-X}$  en fonction de la concentration de l'Aluminium.

La Figure 12 montre la variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la composition  $x$  calculé en utilisant la VCA avec et sans désordre.



**Figure 11** Variation de l'énergie de gap  $E_L^\Gamma$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec et sans désordre.

Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur les deux courbes nous donne les expressions analytiques de la forme :

Sans désordre :

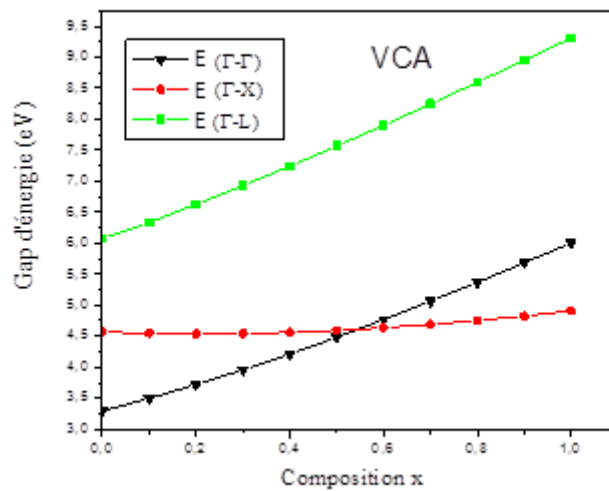
$$E_L^\Gamma(x) = 0.48018 x^2 - 2.77573 x + 6.05917 \quad \text{VCA} \quad \text{III.7}$$

$$E_L^\Gamma(x) = 1.18725 x^2 - 2.09773 x + 6.02609 \quad \text{VCAA} \quad \text{III.8}$$

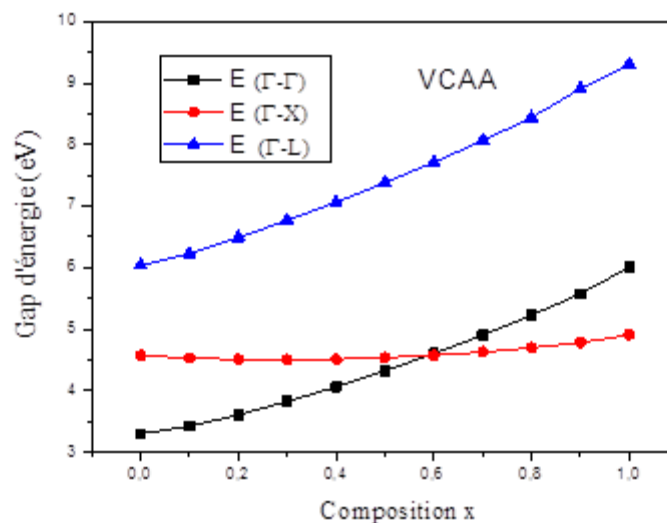
La variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la concentration  $x$ , en allant de GaN ( $x=0$ ) vers le AlN ( $x=1$ ) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. On remarque que la variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma-L}$ , pour les deux courbes, augmente d'une façon monotone et linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium et ceci confirmé par les équations III.7 et III.8. On remarque aussi que l'effet de désordre influe légèrement sur la variation de  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la concentration de l'Aluminium.



Pour connaître la possibilité de l'existence de transitions de gap directes ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) et de gap indirects ( $\Gamma$ -X) et ( $\Gamma$ -L) en fonction de la concentration  $x$ , nous avons tracé les trois courbes précédentes sur les Figures 13-14 et qui représentent respectivement la variation des gaps énergétiques, à savoir  $E_{\Gamma-\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma-X}$  et  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la concentration en Aluminium, allant de GaN ( $x=0$ ) à AlN ( $x=1$ ), en utilisant la méthode VCA et VCAA.



**Figure 12** Variation des énergies de gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et indirects  $E_X^{\Gamma}$  et  $E_L^{\Gamma}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  sans désordre



**Figure 14** Variation des énergies de gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et indirects  $E_X^{\Gamma}$  et  $E_L^{\Gamma}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec désordre

On constate que dans les trois cas, et en passant du composé binaire  $GaN$  au composé  $AlN$  les énergies de gaps direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}(x)$  et indirects  $E_{X}^{\Gamma}(x)$  et  $E_{L}^{\Gamma}(x)$  ne présentent pas le même comportement en fonction de la variation de la composition  $x$ .

Nos résultats montrent qu'il existe une transition du gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  au gap indirect  $E_{X}^{\Gamma}$  pour  $x = 0.55$  et qui correspond à une énergie égale 4.61 eV et ceci en utilisant la VCA ( $p = 0$ ). Par contre, quand on utilise la VCAA ( $p = 0.10012$ ), la transition des gaps se fait à  $x = 0.58$  pour une valeur d'énergie égale à 4.54 eV. On peut conclure que l'effet du désordre de la composition  $x$  n'a pas d'incidence significative sur la valeur de  $x$  qui correspond à la transition des gaps direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ , et indirects  $E_{X}^{\Gamma}$  et  $E_{L}^{\Gamma}$  pour l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}N$ .

Selon notre étude, on peut conclure que l'absorption optiques des gaps dans  $Al_xGa_{1-x}N$  est directe pour des compositions  $x$  qui varient entre  $0 \leq x < 0.58$  et indirecte pour  $0.58 < x \leq 1$ .

### III.2.1.2. Paramètre de réseau

Ces nouveaux matériaux couvrent une large gamme de longueur d'onde. Le paramètre de réseau de l'alliage semi-conducteur, varie avec la concentration de l'Aluminium, cela à un effet important sur la structure de l'alliage étudiée.

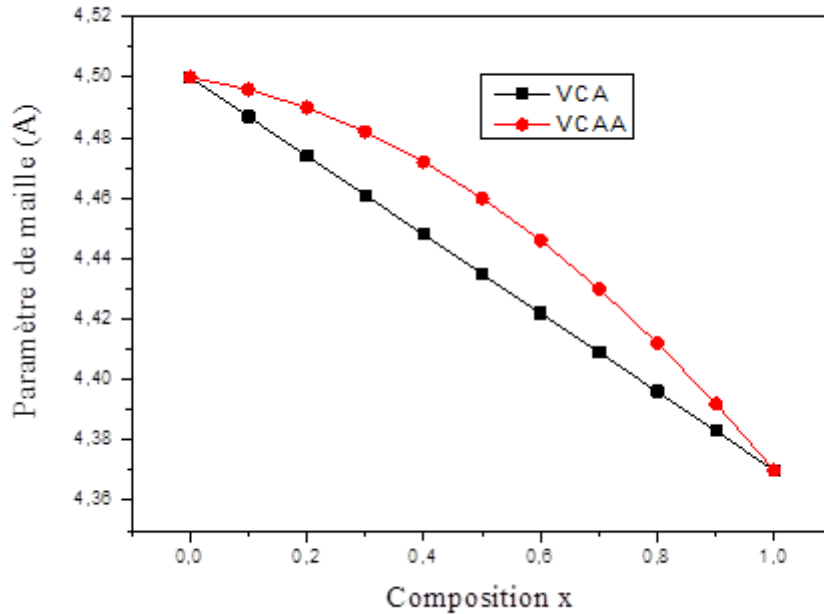
La constante du réseau de l'alliage binaire suit la loi de Vegard, les valeurs sont présentées au le Tableau 4.

**Tableau 4.** Paramètres de réseau de l'alliage semi-conducteur  $Al_xGa_{1-x}N$

x	a (Å°) [VCA]	a (Å°) [VCAA]
0	4.5	4.5
0.1	4,487	4,4960135
0.2	4,474	4,490024
0.3	4,461	4,4820315
0.4	4,448	4,472036
0.5	4,435	4.4600375
0.6	4,422	4.446036
0.7	4,409	4.4300315
0.8	4,396	4.412024
0.9	4,383	4.3920135
1	4.37	4.37

$$a_{\text{alloy}} = (1-x) a_{\text{GaN}}(G) + x a_{\text{AlN}}(G) - p[x(1-x)]^{1/2}(a_{\text{AlN}}(G) - a_{\text{GaN}}(G)) \quad \text{III.9}$$

Avec P : Paramètre ajustable qui simule l'effet de désordre. P=0.10012



**Figure 15** Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

La Figure 15 montre la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  calculé en utilisant la VCA et la VCAA

Une interpolation linéaire par la méthode des moindres carrés sur les courbes ci-dessus nous donne l'expression analytique de la forme :

$$a(x) = -3.44 \cdot 10^{-15} x^2 - 0.13 x + 4.5 \quad \text{VCA} \quad \text{III.10}$$

$$a(x) = -0.1 x^2 - 0.03 x + 4.5 \quad \text{VCAA} \quad \text{III.11}$$

On remarque que la variation du paramètre de maille décroît d'une façon monotone et linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium pour le cas de la VCA, par contre pour le cas de la VCAA, la variation du paramètre de maille décroît d'une façon non linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium et ceci confirmé par les équations III.10 et III-11.

### III.2.1.1.2. Structure de bande d'énergie

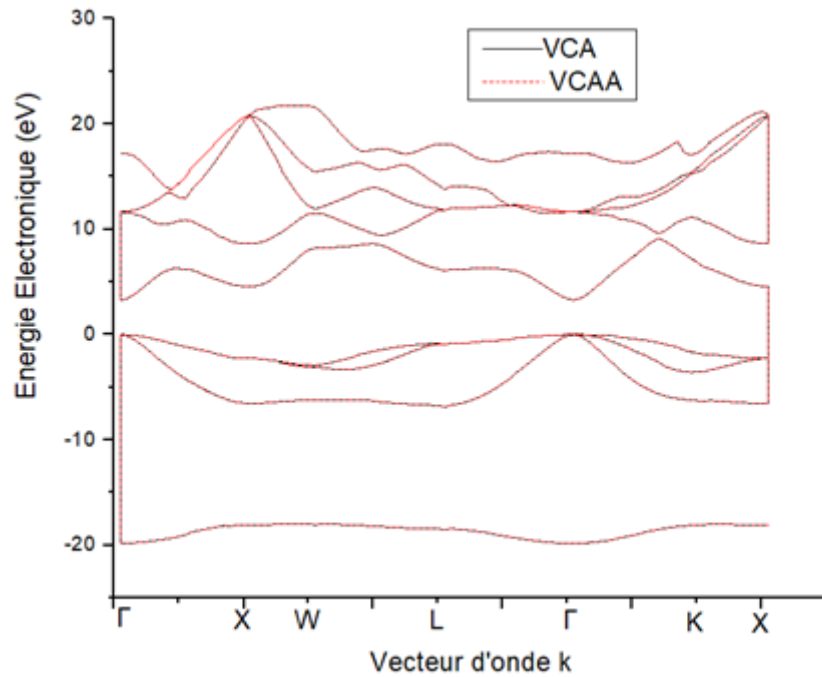
Les propriétés électroniques des matériaux semi-conducteurs revêtent une grande importance dans le domaine du développement des dispositifs électroniques et optoélectroniques de demain.

On trace la structure de bandes d'énergies de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}N$  aux points  $x=0$ ,  $x=1$ , et  $x=0.6$  de haute symétrie de la zone de Brillouin en fonction de quelques valeurs de  $x$  (0 ; 0.6 ; 1) avec et sans tenir compte du désordre.

Les figures 16 et 17 illustrent les structures de bandes d'énergie des composés binaires respectifs. L'alliage ternaire a été calculé aux points de haute symétrie de la zone de Brillouin, ainsi que le long des principales lignes de symétrie, pour différentes valeurs de  $x$ . En raison de la similarité des structures pour différentes valeurs de  $x$ , seule la structure de bande électronique de l'alliage est représentée dans la figure III.18.

Pour l'interprétation des figures qui illustrent les structures de bandes des alliages binaires GaN et AlN respectivement, on note que la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence.

Dans la Figure III.16, on observe que le point  $\Gamma$  correspond à la position du maximum de la bande de valence et également à celle du minimum de la bande de conduction. Cette observation indique que le composé binaire GaN est un semi-conducteur à bande interdite directe, avec une différence énergétique de 3,29 eV entre le minimum et le maximum de la bande.



**Figure 16** Structures de bande du composé binaire GaN en fonction de vecteur d'onde k

En examinant la Figure 17, on peut constater que la structure de bande du composé binaire AlN indique une bande interdite indirecte. Cette caractéristique est associée à la vallée X, où le minimum de la bande de conduction est situé à une distance de 4,9 eV par rapport au maximum de la bande de valence.

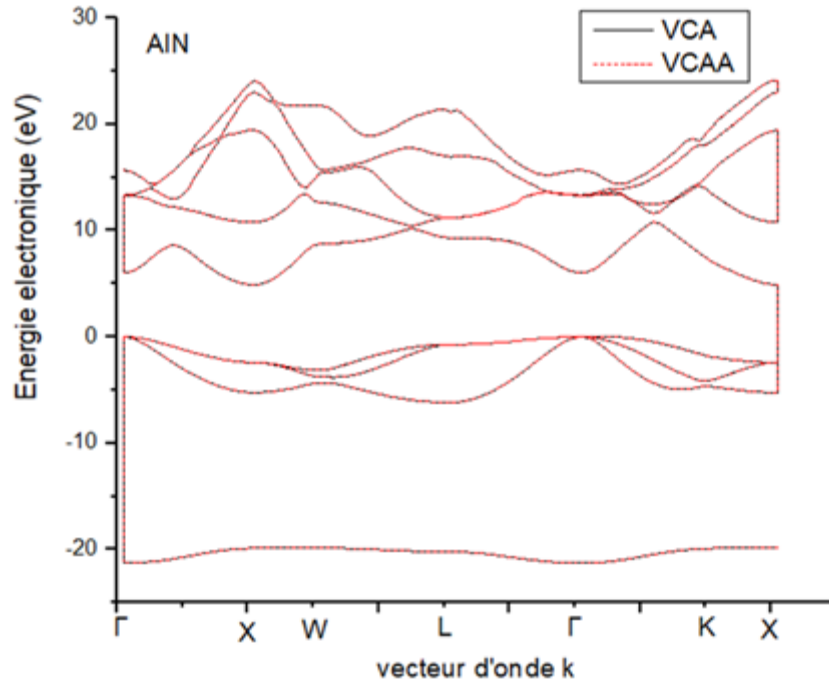


Figure 17 Structures de bande du composé binaire AlN en fonction de vecteur d'onde k

Sur la Figure 18, on peut observer la représentation de la structure de bande d'énergie de l'alliage ternaire  $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{N}$ . Il est remarquable que le comportement du gap d'énergie dans cet alliage est de nature indirecte.

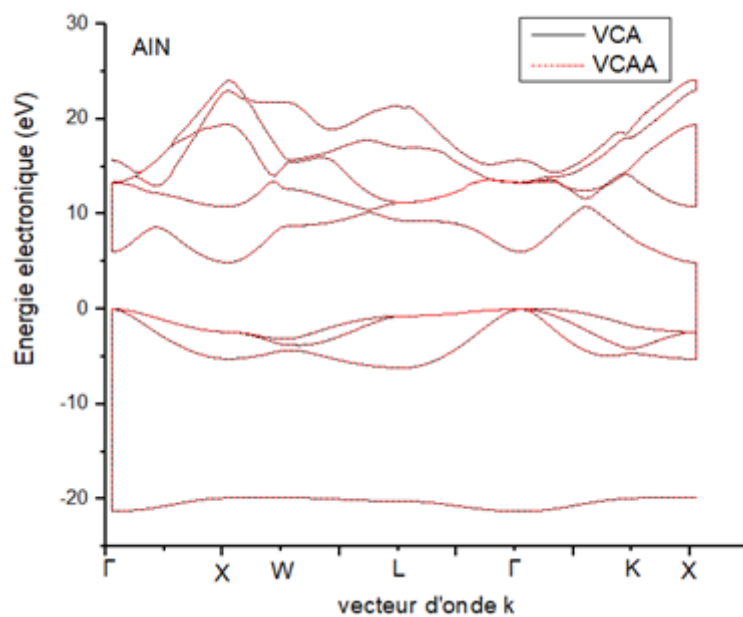


Figure 18 structures de bande d'alliage  $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$  en fonction de vecteur d'onde

L'effet du désordre sur l'énergie de gap d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  dépend de plusieurs paramètres, notamment de la concentration de désordre et de la composition du matériau. En général, le désordre peut induire des états énergétiques localisés à l'intérieur de la bande interdite d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , ce qui peut modifier l'énergie de gap effective du matériau.

Il convient également de souligner que l'effet du désordre peut être contrôlé en ajustant la concentration d'aluminium ( $x$ ) dans l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Des études expérimentales et théoriques sont souvent menées pour comprendre et quantifier l'effet du désordre sur l'énergie de gap d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  dans différentes conditions et compositions.

En résumé, l'effet du désordre peut affecter l'énergie de gap du semi-conducteur ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , conduisant à des modifications de la bande interdite apparente. La compréhension de cet effet est importante pour la conception et la caractérisation des dispositifs optoélectroniques basés sur  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Dans notre cas l'effet de désordre n'a pas d'influence .

## III.2.2 Les propriétés optiques et diélectriques

### III.2.2.1 L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est très important pour déterminer les propriétés optiques des matériaux.

Le Figure 19 représente la variation de l'indice de réfraction pour les 6 modèles en fonction de composition  $x$ . leur variation non linéaire diminue avec l'augmentation de  $x$ . On peut dire que le modèle qui donne les bonnes valeurs de l'indice de réfraction par rapport aux autres modèles est le modèle de Reddy et Anjaneyulu.

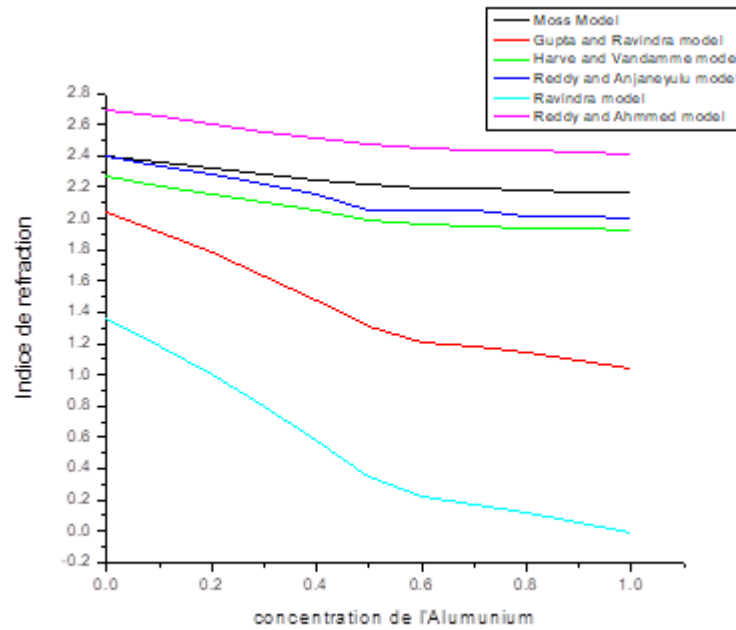


Figure 19 Variation de l'indice de réfraction n du Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N en fonction de composition x du l'aluminium pour les six modèles.

Tableau05 : les valeurs de l'indice de réfraction de GaN, AlN et Al<sub>0.6</sub> Ga<sub>0.4</sub> N comparés aux données théoriques.

Matériaux	n calculé à partir de						Exp
	Modèle de Ravindra et Srivastava	Modèle de Gupta et Ravindra	Modèle d'Hervé Et Vandamme	Modèle de Reddy et Anjaneyulu	Modèle de Ravindra	Modèle de Reddy Et Ahammed	
GaN	2.392	2.040	2.2640	2.3993	1.358	2.6904	2.34 <sup>c</sup>
Al <sub>0.6</sub> Ga <sub>0.4</sub> N	2.181	1.210	1.9659	2.0581	0.220	2.4492	
AlN	2.165	1.041	1.9182	2.0009	-0.011	2.4117	1.99 <sup>c</sup>

<sup>c</sup>) : valeur expérimentale [1]

La variation relative  $\Delta n/n$  est obtenue en divisant la variation de l'indice de réfraction ( $\Delta n$ ) par la valeur initiale de l'indice de réfraction ( $n$ ) du matériau, puis en multipliant par 100 pour obtenir le résultat en pourcentage :

$$\Delta n = \frac{n_{exp} - n_{Calc}}{n_{exp}}$$

Tableau6 La variation relative de l'indice de réfraction de GaN, AlN

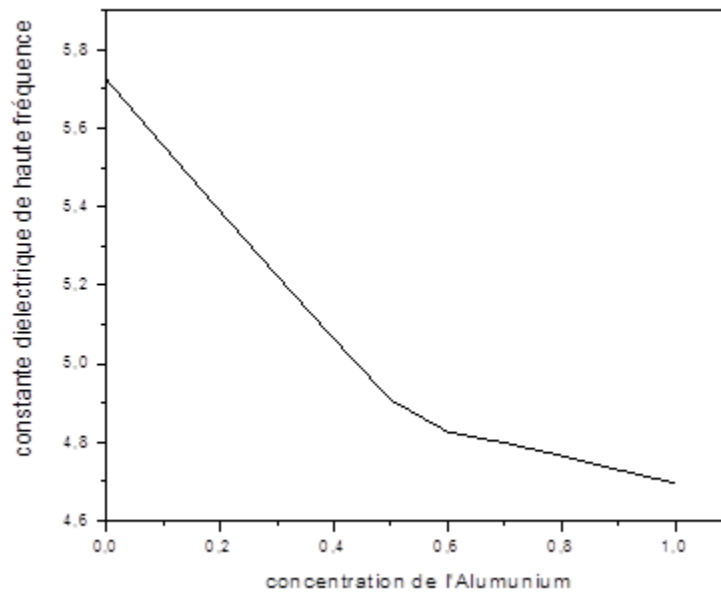


Matériau	$\frac{\Delta n}{n}$
GaN	0.0253
$\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$	
AlN	0.0054

La variation de l'indice de réfraction  $\Delta n$  peut être due à différents facteurs tels que les changements de composition, de température, de pression, de contrainte mécanique ou d'autres effets externes. Cette grandeur est souvent utilisée pour quantifier les changements optiques induits dans un matériau, par exemple lors de l'application d'un champ électrique ou magnétique, ou en présence d'une excitation optique.

### III.2.2.2 La constante diélectrique de haute fréquence

Le calcul de l'indice de réfraction ( $n$ ) d'un alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en fonction de la composition en aluminium ( $x$ ) peut être effectué en utilisant différentes méthodes théoriques ou expérimentales, il s'est avéré que le modèle Reddy et Anjaneyulu est le plus adéquat parmi six modèles différents. La constante diélectrique est calculée pour ce modèle approprié par la relation  $\varepsilon_\infty = n^2$ . Les résultats illustrés dans le tableau 7 montre que  $\varepsilon$  décroît avec l'augmentation de  $x$  en allant du GaN vers AlN. On peut dire que le modèle de Reddy et Anjaneyulu est plus proche de l'expérience par rapport aux autres modèles.



**Figure 20** Variations de la constante diélectrique  $\epsilon_{\infty}$  de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en fonction de composition  $x$  de l'Aluminium.

**Tableau07** : les valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$  de GaN, AlN et  $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$  comparés aux donnés

Matériau	$\epsilon_{\infty}$ calculé	$\epsilon_{\infty}$ Exp
GaN	5.399	5.7 [18]
$\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$	4.235	
AlN	4.003	4.77 [18]

### III.3. Conclusion

Dans ce chapitre, en utilisant la méthode des pseudos potentiels (EPM) avec l'approximation du cristal virtuel (VCA), nous pouvons obtenir des résultats calculés pour les niveaux d'énergie, la structure de bande, l'indice de réfraction, la constante diélectrique, et d'autres propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs ternaires.

L'utilisation de la méthode des pseudos potentiels avec l'approximation du cristal virtuel permet une approche théorique efficace pour étudier les propriétés électroniques et optiques

des semi-conducteurs ternaires, nos résultats montrent que le paramètre de maille a de très petits écarts par rapport aux prévisions de la loi de Vegard.

# Conclusion Générale

### Conclusion générale

En conclusion, cette étude a permis d'approfondir notre compréhension des propriétés optoélectroniques des alliages ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . En combinant des techniques expérimentales et des modèles théoriques avancés, nous avons caractérisé de manière précise et systématique les variations du gap d'énergie et de l'indice de réfraction en fonction de la composition  $x$  de l'alliage.

Les calculs de la structure de bandes électroniques sont basés sur diverses hypothèses, chacune présentant ses propres difficultés, nécessitant une validation expérimentale. Les méthodes utilisées dépendent des propriétés à étudier. Certaines méthodes, telles que les premiers principes, nécessitent des calculs numériques complexes, tandis que l'EPM permet un calcul relativement rapide en utilisant un nombre limité de facteurs de forme pour la structure de bandes. C'est cette praticité qui rend l'EPM attrayante.

Dans cette étude, nous avons utilisé la méthode du pseudo-potentiel avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) et l'absence du désordre pour analyser la structure des bandes électroniques, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .

Les calculs indiquent que le matériau étudié présente un gap direct lorsque la concentration en aluminium est de 0,6 ce qui a des implications significatives dans le domaine de la technologie optoélectronique. Au-delà de cette valeur, il présente une transition vers un gap indirect.

Le modèle de Reddy et Anjaneyulu s'est révélé être le plus approprié parmi les six modèles différents pour le calcul de l'indice de réfraction. La constante diélectrique a été déterminé en utilisant ce modèle adéquat. Nos résultats sont en excellent accord avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

# **Références bibliographiques**

Références bibliographiques

- [1] Boubtana Khayra, et Fedjer Rachida, “Mémoire de Master Etude des propriétés structurale et électronique d’un matériau semi-conducteur III-V(AlGaIn)” Université – Tissemsilt, (2015).
- [2] Kara Mohamed Wahiba, “Thèse de doctorat Etude Les structures de bandes électroniques et les propriétés relatives aux semiconducteurs quasi binaires  $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$ ” Université Mohamed Khider – Biskra, (2011).
- [3] Abderrachid Bechir, “Thèse de Doctorat D’état Effets du désordre et du substrat sur la Structure électronique” Université Mentouri – Constantine, (2006).
- [4] M<sup>me</sup> Laiadi Widad, “Thèse de Doctorat Simulation numérique d’effet de la couche fenêtre  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  sur la résistance aux irradiations spatiales d’une cellule solaire en arsenic de gallium (GaAs)” Université Mohamed Khider – Biskra, (2014).
- [5] Haya Soumia, “Mémoire de Master Etude des propriétés structurales et optiques de nanocristaux semi-conducteurs à grand gap” Université Mentouri – Constantine, (2010).
- [6] Aid Amina, “Mémoire de de Master Académique Etude de quelques propriétés physiques de L’alliage  $\text{B}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  en utilisant les méthodes de premiers principes” Université Mohamed Boudiaf - M’sila, (2018).
- [7] Julien Sellés. “Spectroscopie optique de nanostructures GaN/AlN en microcavités planaires et en microdisques. Physique [physics]” Université de Montpellier, 2015. Français.
- [8] BERBER Mohamed, “Thèse de Doctorat Etude des nanostructures lasers à base de nitrides d’antimoniures  $\text{GaNSb}/\text{AlGaInNSb}$  ” Université Djilali Liabes – Sidi Bel abbes, (2014).
- [9] Nasouri Mesbah. “ Mémoire de Master Etude de simulation des structure  $\text{AlGaIn}/\text{GaN}$  pour le HEMTs”, Université Saad Dahleb-BLIDA, (2011).
- [10] Mr Nassim TOUKA, “ Thèse de Doctorat présenté pour obtenir le diplôme de Doctorat ès-Science en Physique de Dispersion des nano-cristaux semi-conducteurs dans des matrices à large bande interdite : Etude des propriétés optiques” Université Mentouri– Constantine, (2010).

- [11] Dr Kharoubi Abdelmalek, “Cours de physique de semi-conducteur” Université Ibn Khaldoun- Tiaret.
- [12] Nouiri Rima, “Mémoire de Master Prédiction des propriétés physiques des alliages ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ” Université Mohamed Boudiaf - M'sila, (2016).
- [13] Ouloum Aoudé. “Thèse de Doctorat Etude des propriétés excitoniques de GaN par spectroscopies continue et résolue en temps à l'échelle de la femtoseconde. Physique Classique [physics.class-ph]” Université Blaise Pascal- Clermont-Ferrand II, 2006.
- [14] M. Djoudi Lakhdar, “Thèse de Doctorat Étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage Semi-conducteur  $\text{BaInGa}_2\text{N}_6$  : Etude ab-initio” Université Djilali Liabes -SIDI BEL-ABBES, (2013).
- [15] Fella Benmakhlouf, “Thèse de Doctorat Investigation théorique des propriétés électronique et structurales des alliages semiconducteur II-VI A pressions normal et sous pression” Université Mentouri– Constantine, (2006).
- [16] Harchaoui Nadra, “Thèse de Doctorat Contribution à l'étude de la structure ionique des métaux simples et alliage en phase liquide” Université Mouloud Mammeri-TIZI-OUZOU, (2010).
- [17] S. Isomura, F.G.D. Prat, J.C. Woolley, Phys. Status Solidi A 65 (1974) 213.
- [18] S. Berrah<sup>1</sup>, H. Abid<sup>2</sup>, A. Boukortt<sup>3</sup> “Article Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, Valeur expérimentale The first principle calculation of electronic and optical properties of  $\text{AlN}$ ,  $\text{GaN}$  and  $\text{InN}$  compounds under hydrostatic pressure” (2006. V. 9, N 2. P. 12-16.)



## Résumé

Dans ce travail, Nous avons étudié les propriétés électroniques des composés binaires GaN et AlN, ainsi que leur alliage semi-conducteur ternaire à base d'Aluminium  $Al_xGa_{1-x}N$ . Ces matériaux sont importants pour la fabrication des dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes et les diodes laser. Nos calculs sont basés sur la méthode du pseudo-potentiel empirique (EPM) couplé à l'approximation du cristal virtuel (VCA). L'effet du désordre compositionnel a été pris en considération, en utilisant l'approximation du cristal virtuel amélioré (VCAA).

Nos résultats sont en très bon accord avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

**Mots clés :** Alliage ternaire ,pseudo-potentiel empirique,  $Al_xGa_{1-x}N$ , Approximation du cristal virtuel amélioré (VCAA).

## Abstract

In this work, we investigated the electronic properties of the binary compounds GaN and AlN, as well as their ternary semiconductor alloy based on Aluminum,  $Al_xGa_{1-x}N$ . These materials are important for the fabrication of optoelectronic devices such as light-emitting diodes and laser diodes. Our calculations were performed using the empirical pseudopotential method (EPM) coupled with the virtual crystal approximation (VCA).

We have taking into account the effect of compositional disorder using the improved virtual crystal approximation (VCAA).

Our results are in very good agreement with other experimental and theoretical results.

**Keywords:** Ternary alloy, empirical pseudopotential,  $Al_xGa_{1-x}N$ , Improved virtual crystal approximation (VCAA).

## الملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص الإلكترونية للمركبين الثنائيين GaN و AlN وكذلك سبيكة أشباه الموصلات الثلاثية القائمة على الألومنيوم  $Al_xGa_{1-x}N$ . هذه المواد مهمة لتصنيع الأجهزة الإلكترونية الضوئية مثل الثنائيات الباعثة للضوء وثنائيات الليزر. تعتمد حساباتنا على طريقة الإمكانيات الزائفة التجريبية (EPM) إلى جانب التقريب البلوري الافتراضي (VCA). تم أخذ تأثير الاضطراب التركيبي في الاعتبار ، باستخدام التقريب البلوري الافتراضي المحسن (VCAA). نتائجا في اتفاق جيد للغاية مع النتائج التجريبية والنظرية الأخرى.

**الكلمات الرئيسية:** سبيكة ثلاثية التركيب، زائف تجريبي،  $Al_xGa_{1-x}N$ ، تقريب البلورة الظاهرية المحسنة (VCAA)