



Mémoire de fin d'étude

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE MASTER

Filière : Physique
Option: Physique des Matériaux

THÈME

Contribution à l'étude des propriétés
optoélectroniques de l'alliage semi-conducteur
ternaire $Y_x Ga_{1-x} N$

Préparé par : Messaoudi Oumelkhir

Soutenu le :

Devant le jury :

| | |
|------------------|--------------------------------|
| Président | Pr. Kahoul Abdelhalim |
| Encadreur | Dr. Fares Nour El Houda |
| Examineur | Dr Daoudi Salim |

Année Universitaire 2020/2021

Remerciements



Remerciement

Je remercie ALLAH qui est toujours présent avec moi dans le meilleure et dans le pire.

Je remercie beaucoup mes parents, mes sœurs et mes frères vos encouragement ont été ma motivation durant ce travail, c'est l'occasion pour moi de vous remercier très sincèrement.

J'exprime mes profondes gratitude et respectueuse reconnaissance à mon encadreur ***Dr Fares Nour El Houda*** pour son suivi durant la préparation de mon projet de fin d'étude.

Je tiens aussi à remercier les membres de jury ***Pr. Kahoul Abd El Halim*** et ***Dr. Daoudi Salim qui*** m'ont fait *l'honneur* d'accepter de juger mon travail.

A toute ma grande famille, tous mes amies, tous les physiciens.

Dédicaces



Dédicace

Je dédicace ce modeste travail à :

Mes chère parentes.

Mes frères et mes sœurs.

Toute ma famille.

Mes chères amies : Nihad, Meriem, Chaima, Amel,
Imen, Imen, Zoulikha, Amira, Nadhra.

Tous les médecins.

Tous ceux qui ont donné une contribution de loins
ou de près pour la réalisation de ce mémoire.

Résumés



Résumé

Le but de notre travail est d'étudier les propriétés optoélectroniques (optiques et électroniques) de l'alliage semi-conducteur ternaire $Y_x Ga_{1-x} N$ dans la structure Zinc blende. Ces alliages ont un intérêt important dans l'électronique.

Notre calcul est basé sur la Méthode Pseudopotential Empirique (EPM) couplée à l'Approximation Cristal Virtuel (VCA).

Nos résultats pour le gap énergétique, le structure des bandes, l'indice de réfraction et la constante diélectrique sont en très accord avec l'expérience.

Abstract

The aim of our work is to study the optoelectronic properties (optical and electronic) of the ternary semiconductor alloy $Y_x Ga_{1-x} N$ in the Zinc blende structure. These alloys have a significant interest in electronics.

Our calculation are based on the Pseudopotential Empirical Method (EPM) coupled with the Virtual Crystal Approximation (VCA).

Our results for the energy gap, band structure, refractive index and dielectric constant are in good agreement with experience.

المخلص

الهدف من عملنا هو دراسة الخصائص الكهروضوئية (الضوئية والإلكترونية) لسبائك أشباه الموصلات الثلاثية $Y_x Ga_{1-x} N$ في هيكل مزيج الزنك. هذه السبائك لها اهتمام كبير بالإلكترونيات.

يعتمد حسابنا على طريقة الإمكانات التجريبية الزائفة (EPM) إلى جانب التقريب البلوري الافتراضي

(VCA).

تتوافق نتائجنا فيما يتعلق بفجوة الطاقة وهيكل النطاق ومعامل الانكسار مع النتائج التطبيقية

Sommaire



Sommaire

| | |
|-----------------------------|--|
| Remerciements | |
| Dédicaces | |
| Résumés | |
| Sommaire | |
| Liste des tableaux | |
| Liste des figures | |
| Introduction générale | |
| Références bibliographiques | |

| | | |
|---|--|----|
| CHAPITRE I | GENERALITES SUR LES SEMICONDUCTEURS | |
| I. Introduction | | 2 |
| I. 2 LES SEMI-CONDUCTEURS | | 2 |
| I. 2 .1 INTRODUCTION | | 2 |
| I. 2 .2 LES TYPES DE SEMI-CONDUCTEURS | | 3 |
| I. 2 .2.1 SEMI-CONDUCTEUR INTRINSEQUE | | 3 |
| I. 2 .2.2 SEMI CONDUCTEUR EXTRINSEQUE | | 3 |
| I. 2 .2.2 . a SEMI CONDUCTEUR TYPE N | | 4 |
| I. 2 .2.2 . b SEMI CONDUCTEUR TYPE P | | 4 |
| I.3 LES SEMI CONDUCTEURS III-V | | 4 |
| I.4. LES COMPOSES SEMI CONDUCTEURS III-V | | 5 |
| I.5 LES PROPRIETES DES SEMI CONDUCTEURS III-V | | 6 |
| I.5. 1 PROPRIETES STRUCTURALLES | | 6 |
| I.5. 1. a STRUCTURE CRISTALLINE | | 6 |
| I.5. 1. b Zone de Brillouin | | 7 |
| I.6 PROPRIETES ELECTRONIQUES | | 8 |
| I.6.1 STRUCTURE DE BANDE | | 9 |
| I.6.2 NATURE DE GAP | | 10 |
| I.6. 3 LA MASSE EFFECTIVE | | 10 |
| I.7 PROPRIETES OPTIQUES | | 11 |
| I.7.a ABSORPTION RADIATIVE | | 12 |
| I.7.b ÉMISSION SPONTANÉE | | 12 |
| I.7.c ÉMISSION STIMULÉE | | 12 |
| I.7.1 INDICE DE REFRACTION | | 13 |
| I.8. LES ALLIAGES SEMI CONDUCTEURS | | 14 |
| I.8.1 LES DIFFERENTS TYPE D'ALLIAGES SEMI CONDUCTEURS | | 14 |
| I.8.1.1 LES ALLIAGES BINAIRES | | 14 |
| I.8.1.2 LES ALLIAGES TERNAIRES | | 15 |
| I.8.1.3 L'ALLIAGE QUATERNAIRE | | 15 |

Liste des tableaux



Liste des tableaux

| | |
|--|----|
| Tableau I. 1 Extrait de la classification périodique des éléments | 4 |
| Tableau III. 1 Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques des composés binaires GaN et YN | 33 |
| Tableau III. 2 Paramètres de réseaux des composés binaires GaN et YN | 33 |
| Tableau III. 3 : Les Gaps d'énergies calculés pour les binaires GaN et YN | 33 |
| Tableau III. 4 : les valeurs de l'indice de réfraction de GaN, YN et $Y_{0.5}Ga_{0.5}N$ comparés aux données théoriques | 42 |

Liste des figures



Liste des figures

| | |
|--|----|
| Figure I.1 L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas de silicium). | 3 |
| Figure I. 2 Réseau cristallin dans la structure Zinc-blende | 6 |
| Figure I. 3 La premier zone de Brillouin | 7 |
| Figure I. 4 Les structures des bandes énergétiques : Métal, Semi-conducteurs, Isolant | 10 |
| Figure I. 5 Gaps direct et indirect des semi-conducteurs | 10 |
| Figure I. 6 Absorption Fondamental de la lumière | 12 |
| Figure I. 7 Émission spontanée | 12 |
| Figure I. 8 Émission Stimulé | 13 |
| Figure II. 1 la fonction de Heine-Abarenkov | 28 |
| Figure II. 2 la fonction de gauss | 28 |
| Figure II. 3 l'organigramme de la méthode E.P.M locale | 30 |
| Figure III.1 Variation de l'énergie de gap $E_{\Gamma-\Gamma}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_xGa_{1-x}N$ | 34 |
| Figure III.2 Variation de l'énergie de gap $E_{\Gamma-X}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_xGa_{1-x}N$ | 35 |
| Figure III.3 Variation de l'énergie de gap $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_xGa_{1-x}N$ | 36 |
| Figure III.4 Variation de des énergies de gap $E_{\Gamma-\Gamma}E_{\Gamma-X}E_{\Gamma-L}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_xGa_{1-x}N$ | 37 |
| Figure III.5 Structures de bande du composé binaire GaN en fonction de vecteur d'onde k | 38 |
| Figure III.6 Structures de bande du composé binaire YN en fonction de vecteur d'onde k | 39 |
| Figure III.7 Structures de bande d'alliage $Y_{0.5}Ga_{0.5}N$ en fonction de vecteur d'onde | 40 |
| Figure III.8 Variation de la masse effective du $Y_xGa_{1-x}N$ en fonction de composition x | 41 |
| Figure III. 9 Variation de l'indice de réfraction n du $Y_xGa_{1-x}N$ en fonction de composition x du l'Yttrium pour les six modelés | 43 |

Introduction



La technologie moderne et les développements technologiques dans beaucoup de domaines sont basés sur la science des matériaux. Les semi conducteurs sont les plus étudiés grâce à leur importance dans notre société. Ils sont utilisés dans le domaine d'électronique (diode, transistor...), d'informatique, médecine, industrie, télécommunication, optoélectronique, les appareils électroménagers...etc.

La naissance des alliages semi conducteurs par le mélange des éléments à composé binaire, ternaires, quaternaires..., spécialement les alliages de composés semi conducteurs III-V sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leurs paramètres du réseau, gap énergétique, l'indice de réfraction et constante diélectrique pour obtenir des composants optoélectroniques bien désirés.

Les méthodes empiriques sont des outils de base pour le calcul des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs. Dans notre travail on utilise la méthode des pseudopotentiels empiriques (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel pour le calcul des propriétés physiques des alliages. On utilise cette méthode à cause de sa simplicité, ainsi que les résultats sont en bon accord avec les valeurs expérimentales.

Notre mémoire est divisée en trois chapitres :

Dans le premier chapitre on rappelle les propriétés des semi-conducteurs spécialement les alliages ternaires de type III-V ainsi que l'approximation du cristal virtuel pour calculer les propriétés de l'alliage ternaire semiconducteur $Y_x Ga_{1-x} N$.

Dans le deuxième chapitre, on fait un rappel sur la mécanique quantique et l'équation de Schrödinger, on rappelle aussi les principes approximatifs de calcul des structures des bandes énergétiques et spécialement la méthode des pseudopotentiels empiriques (E.P.M) qui sera exposée en détail.

Le troisième chapitre est consacré aux résultats et leurs discussions, on exposera les principaux résultats obtenus avec une interprétation de ceux-ci, ainsi qu'une comparaison avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux.

Finalement, une conclusion générale sera exposée.

Chapitre I

Les semi-conducteurs et leurs alliages



Chapitre I

Les semi-conducteurs et les alliages

I. 1 INTRODUCTION

Les semi-conducteurs sont importants à la technologie moderne parce qu'ils sont des outils indispensables à la fabrication de tous les composants électroniques et optoélectroniques et ceci grâce à leurs propriétés physiques. Les dispositifs électroniques à base de semi-conducteur sont aussi utilisés pour le traitement de l'information et de la communication. Leur importance est née avec la découverte en 1948 du premier transistor [1].

Parmi les semi-conducteurs on a les semi-conducteurs de type III-V particulièrement les composés binaires GaAs et In P qui sont les plus utilisés en électronique et optoélectronique en raison de leurs propriétés intrinsèques remarquables et ils ont de multiples applications technologiques. Ces propriétés leur offrent un large champ d'applications nouvelles dans des domaines très divers incluant la microélectronique rapide digitale et analogique [2].

En effet, le progrès fait par les chimistes, les physiciens des matériaux et les technologues a contribué d'une manière efficace à l'étude et à la fabrication de nouveaux matériaux parmi eux les alliages semi-conducteurs III - V et II - IV [3].

Dans ce chapitre on va voir la théorie des alliages, c'est à dire le mélange de deux ou plusieurs semi-conducteurs. On distingue différents sortes d'alliages à savoir : binaires, ternaires, quaternaires et pentaires, ces derniers sont utilisés spécialement en optoélectroniques à cause de la variation de leur gap énergétique en fonction de composition x .

I. 2 LES SEMI-CONDUCTEURS

I. 2 .1 INTRODUCTION

Un semi-conducteur c'est un corps cristallin situé entre le conducteur et l'isolant. Leur conductivité affecté par plusieurs ordre de grandeur tels que : la température,

l'éclairage, et la présence d'impuretés [4]. Leur résistivité varie entre $10^{-3}\Omega \text{ cm}$ et $10^9\Omega\text{cm}$.

Le semi-conducteur joue le rôle d'isolant si $T=0 \text{ K}$ et son énergie de gap est plus faible que celle d'un isolant, par l'agitation thermique il devient conducteur comme c'est indiqué sur la Figure II-1 qui illustre la variation de la concentration des porteurs libres en fonction de la température dans le cas du silicium [5].

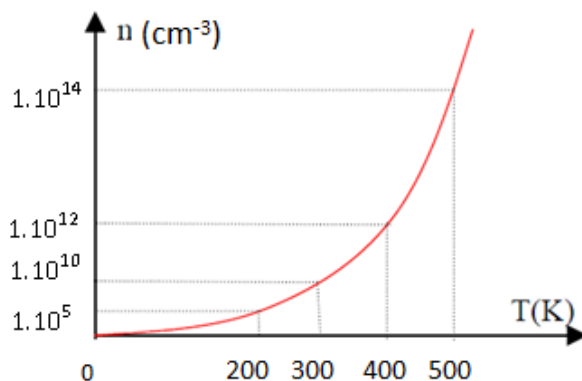


Figure I.1 L'évolution de la concentration des porteurs libres en fonction de la température (cas de silicium).

I. 2 .2 LES TYPES DE SEMI-CONDUCTEURS

Il y a deux types de semi-conducteurs :

I. 2 .2.1 SEMI-CONDUCTEUR INTRINSEQUE

C'est un semi-conducteur très pur et qui présente un réseau cristallin parfaitement périodique avec un taux d'impuretés très faible, il se comporte comme un isolant à très basse température et sa conductivité augmente avec la température. Dans Ce semi-conducteur il y a une égalité entre le nombre d'électrons de la bande de conduction et le nombre de trous de la bande de valence donc $n=p$

I. 2 .2.2 SEMI CONDUCTEUR EXTRINSEQUE

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications

électroniques (diodes, transistors, etc...) et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, etc...). IL y a deux sortes de dopage :

I. 2 .2.2 . a SEMI CONDUCTEUR TYPE N

Considérons le cristal silicium qui a 4 électrons périphériques on introduit le phosphore qui a 5 électrons périphériques. Les quatre électrons de phosphore sont liés par des liaisons covalentes avec les quatre électrons de silicium. L'électron excédentaire ne pourra réaliser aucune liaison et étant faiblement lié à l'atome de phosphore Il reste libre dans le cristal. Par agitation thermique cet électron occupe un état de la bande de conduction donc l'atome de phosphore devient positive à cause de la perte d'un électron. On dit que le phosphore se comporte comme un donneur d'électrons.

I. 2 .2.2 . b SEMI CONDUCTEUR TYPE P

En dopant le silicium avec le bore ce dernier a un électron de valence de moins que le silicium ; il y a donc une liaison covalente qui va avoir tendance à capter un électron. Chaque atome de bore crée un trou dans le réseau cette atome est appelé accepteur. Dans ce cas on a les porteurs majoritaires (trous) plus grand que les porteurs minoritaires (électrons).

I.3 LES SEMI CONDUCTEURS III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés par l'association d'un élément de la troisième colonne et d'un élément de la cinquième colonne de la classification périodique de Mendeleïev [2]. Le tableau au-dessous regroupe un extrait de semi-conducteurs III-V les plus utilisés dans l'industrie tels que GaN, GaAs, et InP.

| S/C III | S/C V |
|----------------|--------------|
| B | N |
| AL | P |
| Ga | As |
| In | Sb |

Tableau1. 1 Extrait de la classification périodique des éléments

I.4. LES COMPOSES SEMI CONDUCTEURS III-V

La classe des matériaux est basée sur le potentiel créé dans un Cristal par :

- La modulation de dopage.
- La variation de composition d'un alliage.
- La combinaison des deux méthodes précédentes [6].

Les classes des semiconducteurs les plus utilisés sont :

I.4.1 Composés binaires : parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée [6]. Les composés contenant du Bore, de l'Aluminium ou de l'Azote entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [7].

I.4.2 Composés ternaire : L'intérêt pratique des alliages III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne [6].

On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, qui sont identifiés de la façon suivant :

- **Ternaires 2+1:** S'il y a substitution de 2 atomes sur la colonne III et un atome de la colonne V soit: $A^{\text{III}}B^{\text{V}}_{1-x}C^{\text{V}}$
- **Ternaires 1+2:** S'il y a substitution d'un atome de la colonne III et deux atomes de la colonne V : AB_xC_{1-x}

I.5 LES PROPRIETES DES SEMI CONDUCTEURS III-V

I.5. 1 PROPRIETES STRUCTURALLES

Un cristal est constitué à partir d'un groupe des particules qui constituent la cellule de base ce groupe est répété périodiquement en un réseau défini par trois vecteurs de translation fondamentaux a , b , c appelés vecteurs primitifs ce dernière constitue la maille élémentaire chaque maille définit par des vecteur primitifs et les angles α , β , γ son valeurs déférents pour chaque structure cristallin a titre d'exemple

Système cubique $\alpha = \beta = \gamma$ et $a = b = c$

Système hexagonale $\alpha = \beta = 90^\circ$ et $\gamma = 120^\circ$ aussi $a = b \neq c$

I.5. 1. a STRUCTURE CRISTALLINE

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure 'Zinc blende'. Cette structure qui s'apparente à celle de diamant contient deux sous réseaux cubiques à face centrées l'un constitué des atomes de l'élément III est l'autre V. Ces réseaux sont décalés l'un par rapport l'autre de $a_0/4$ de la diagonale principale sachant que a_0 est le paramètre de maille. Chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre dont les sommets sont occupés par un autre atome de l'autre espèce.

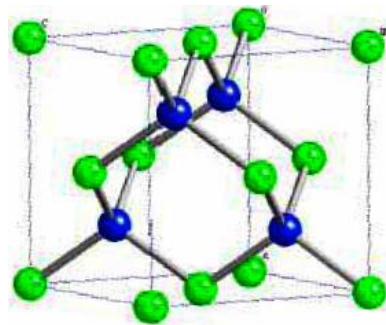


Figure I. 2 Réseau cristallin dans la structure Zinc-blende

Les liaisons atomiques dans les matériaux III-V ne sont pas simplement covalente mais reposent sur le transfert d'électrons des atomes de la colonne V (As) sur ceux colonne III (Ga), dans un cristal composé de l'arséniure de gallium, chaque atome de As est entouré de quatre atome de Ga et chaque atome de Ga est entouré par quatre atomes de As, donc il ya un échange d'électrons. Le cristal construit avec les ions Ga et As qui ont tous quatre électrons périphérique, cette répartition est l'origine de caractère partiellement ionique et

partiellement covalente des liaisons qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier. Cette propriété est en particulier responsable de l'anisotropie optique dans les hétérostructure semi-conductrices III-V qui a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisins [8] [2].

I.5. 1. b Zone de Brillouin

Comme le réseau direct, le réseau réciproque peut être obtenu par juxtaposition de mailles élémentaires construites sur ses vecteurs de base $a_1 a_2 a_3$. Toutefois, surtout en théorie des bandes d'énergie, la symétrie des bandes d'énergie $E(k)$ conduit à utiliser une autre maille élémentaire appelée zone de Brillouin. En particulier, la symétrie d'inversion centre cette Zone sur un nœud du réseau. Elle est formée des points de l'espace réciproque plus proches du nœud central que tout autre nœud du réseau atteints à partir l'origine sans traverser plan de Bragg

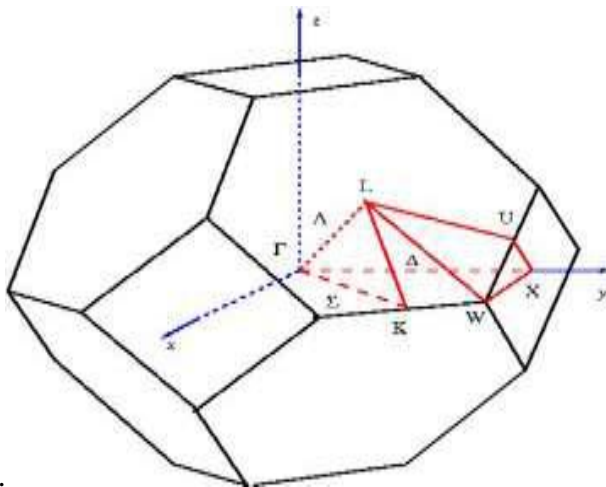


Figure I. 3 La première zone de Brillouin [9]

- **Première zone de Brillouin** : est le plus petit volume sous la forme d'un octaèdre tronqué [3].
- ✓ **Les points de haute symétrie** :

Γ : ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $k_{\Gamma}(0, 0 ; 0)$.

X : ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'une des axes k_x k_y ou k_z avec l'une des faces carrées, donc :

$$K_x = \frac{2\pi}{a} (\pm 1, 0, 0)$$

$$K_y = \frac{2\pi}{a} (0, \pm 1, 0)$$

$$K_z = \frac{2\pi}{a} (0, 0, \pm 1)$$

L : ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont les coordonnées sont : $k_L = \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1)$

W : ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées.

$$\text{Les coordonnées sont : } k_w = \frac{2\pi}{a} (0, \frac{1}{2}, 1)$$

Z : ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre avec les coordonnées : $K_z = \frac{2\pi}{a} (1, \frac{1}{2}, 1)$

✓ **Les lignes de haute symétrie :**

Δ : cette ligne représente la direction $\langle 100 \rangle$, elle relie le centre Γ au point X

Σ : c'est un point appartenant au plan de symétrie $k_x=k_y$ ou $k_y=k_z$ ou $k_x=k_z$

A : cette ligne est la direction $\langle 100 \rangle$ elle relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre.

I.6 PROPRIETES ELECTRONIQUES

Le semi conducteur il a deux bandes permises la bande de valence qui contient les électrons et la bande de conduction qui remplit par les e^- de BV ce bandes séparé par un gap appelé aussi bande interdite sa largeur plus petit que l'isolant par exemple silicium égale 1,12 eV. Par chauffer ou autre facteur les e^- de BV passent vers BC.

La plus part des semi conducteurs III-V ils ont gap direct

Les matériaux semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux Liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétéros structures. Les orbitales de type s et de type p de chaque atome (comme exemple le gallium Ga s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure As), et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type sp^3 : 4 orbitales liantes et 4 orbitales anti liantes [2].

I.6.1 STRUCTURE DE BANDE

Dans un atome isolé, les électrons occupent des niveaux discrets d'énergie. Lorsque la distance entre deux atomes est de l'ordre atomique distance interatomique, ($d=\text{\AA}$), les niveaux d'énergie sont dédoublés.

Dans le cas de plusieurs atomes cas des cristaux ou des particules à caractère massif, la dégénérescence des niveaux d'énergie forme des bandes d'énergie. Dans les semi-conducteurs ces bandes sont appelées bandes de valence(BV) et bandes de conduction (BC) .elles sont séparées par une bande interdite (BI) de largeur E_g .

Les bandes de conduction plus haute

Les bandes de valence plus basse

Dans un semi-conducteur l'écart énergétique qui sépare la bande de conduction et la bande de valence appelé gap énergétique ou largeur de la bande interdite dépend de la température [1], c'est un paramètre essentiel pour déterminer les propriétés électroniques et optiques des semiconducteurs et évaluer, ainsi, leur domaine d'application.

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction. Alors que pour les semi-conducteurs, cette bande est suffisamment petite pour qu'une excitation adéquate, permette aux électrons de la bande de valence de rejoindre la bande de Conduction, ainsi le semi-conducteur peut transporter de l'électricité et donc devenir conducteur. [10].

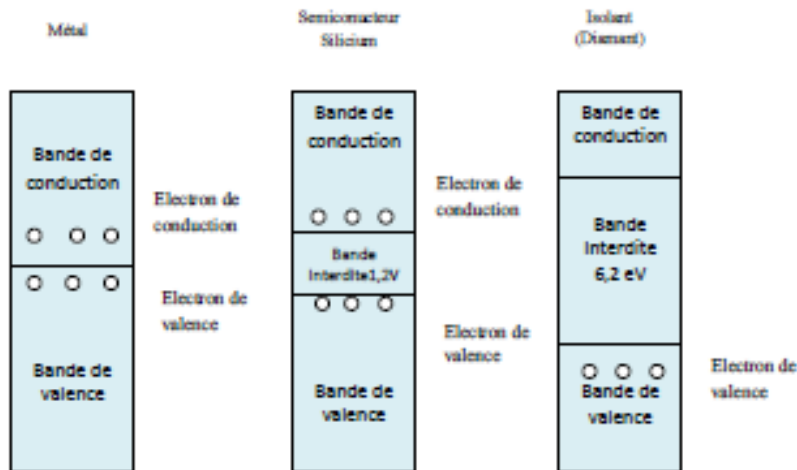


Figure I. 4 Les structures des bandes énergétiques : Métal, Semi-conducteurs, Isolant [10].

I.6.2 NATURE DE GAP

La nature de gap est importante pour les applications optroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons [1]. On dit qu'un gap est direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction correspondent au même point (même vecteur d'onde k) dans la zone de Brillouin. Par contre un gap est indirect lorsque le minimum de bande de conduction et le maximum de la bande de valence se situent à des valeurs distinctes du vecteur d'onde k dans la zone de Brillouin.

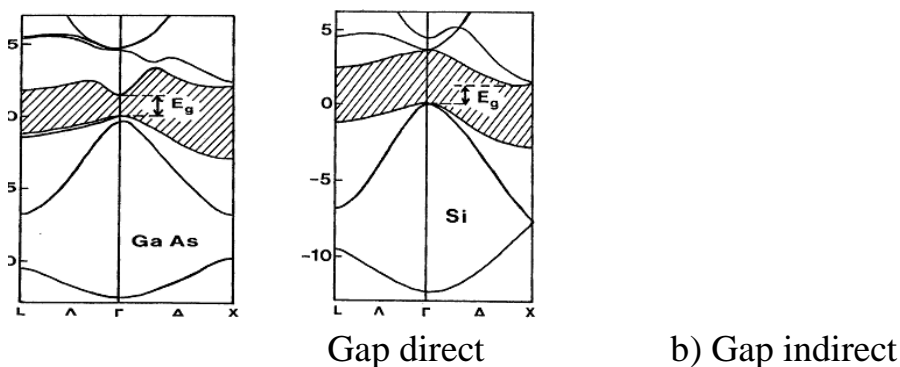


Figure I. 5 Gaps direct et indirect des semi-conducteurs (GaAs ; si) [10].

I.6. 3 LA MASSE EFFECTIVE

Un électron dans la bande de conduction est caractérisé par une fonction d'onde qui est une somme de Bloch d'orbitale anti liante. En termes corpusculaires, c'est une particule dans un potentiel cristallin. On représente cette particule quasi-libre de charge $-e$ et de masse m_0

par une quasi-particule libre de charge $-e$ et de masse m_e qu'on appelle masse effective de l'électron [11].

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

$$E(\mathbf{k}) \approx E(\mathbf{k}_0) + \left(\frac{d^2 E(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}^2} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \quad (\text{I-1})$$

$$(k - k_0)^2 = E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_0) + A (k - k_0)^2 \quad (\text{I-2})$$

Où A est une constante le fait que $E(\mathbf{k})$ soit minimum en $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$ entraîne que $A > 0$ et que le terme linéaire. Du développement soit nul.

La masse effective de l'électron par la relation :

$$\frac{\hbar^2}{2m_e^*} = A = \left(\frac{d^2 E(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}^2} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \quad (\text{I-3})$$

soit

$$\left(\frac{1}{m_e^*} \right) = \frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{d^2 E(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}^2} \right) \quad (\text{I-4})$$

Et écrire :

$$E(\mathbf{k}) \approx E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \quad (\text{I-5})$$

La vitesse de groupe au voisinage de $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$ vaut alors :

$$V_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \approx \frac{\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}{m_e^*} \quad (\text{I-6})$$

La masse effective dépend de l'énergie d'interaction avec son environnement, donc de \mathbf{k} [3].

I.7 PROPRIETES OPTIQUES

L'interaction d'un photon avec les électrons de semi conducteurs faire passer les électrons de BV vers BC a condition de l'énergie d'un photon incident supérieur au l'énergie de liaison.

On classe ces interactions en trois catégories :

I.7.a ABSORPTION RADIATIVE le photon incident $h\nu$ est absorbé par l'électron qui introduit le passage d'électron de bande de valence vers la bande de conduction. ($h\nu = E_1 - E_2$).

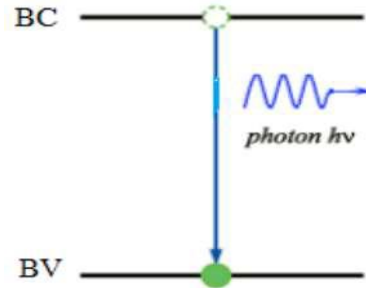


Figure I.6 Absorption Fondamentale de la lumière

I.7.b ÉMISSION SPONTANÉE

Si l'électron de la bande de conduction revient à son état d'équilibre par remplit le trou de la bande de valence avec une émission de photon.

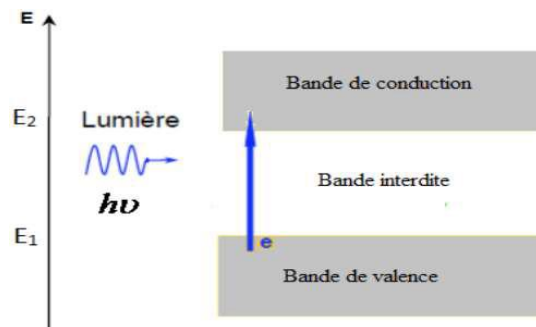


Figure I.7 Émission spontanée

I.7.c ÉMISSION STIMULÉE

Le photon résulte de l'émission spontanée peut exciter autre atome ce dernière revenir à l'état équilibre qui introduit aussi la transition d'électron de BC vers BV avec émission d'un photon de même énergie.

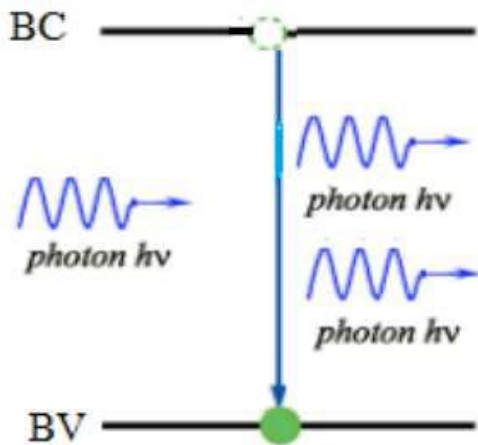


Figure I.8 Émission Stimulé

I.7.1 INDICE DE REFRACTION

Indice de réfraction n est une grandeur sans dimension caractéristique d'un milieu décrivant le comportement de la lumière dans celui-ci il dépend de la longueur d'onde de mesure, est un constante très important dans le domaine optique, liée aux propriétés optiques et cristallographiques de la matière [6].il est dépend du type de matériau utilisé

L'indice de réfraction lié au gap énergétique du matériau c'est à dire lorsque le gap augmente l'indice de réfraction diminué, aussi est dépend de type de matériau.

Connaitre l'indice de réfraction d'un matériau est très important dans la réalisation des dispositifs électronique tels que les guides d'ondes, les cellules solaires ..., plusieurs approches ont touchées cet indice qui est lié au gap énergétique fondamental du matériau [13].il utilise dans la fabrication des lentilles optiques.

La réfractométrie est le nom du domaine de mesure d'indice de réfraction. Ce dernier important de multiples applications.

Pour calculer l'indice de réfraction en utilisant différents modèles :

- a. Modèle de Ravindra et Srivastava [14]

$$n^4 E_g = 108$$

- b. Modèle de Gupta et Ravindra [15]

$$n = 4.084 - 0.62 E_g$$

- c. Modèle d'Hervé et Vandamme [16]

$$n = \left[1 + \left(\frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

d. Modèle de Reddy et Anjaneyulu [17]

$$E_g e^n = 36.3$$

e. Modèle de Ravindra [18]

$$n = 4.16 - 0.85E_g$$

f. Modèle de Reddy et Ahmmed [19]

$$n^4(E_g - 0.365) = 154$$

I.8. LES ALLIAGES SEMI CONDUCTEURS

Les alliages semi conducteurs très important dans le développement de technologie moderne car sont des matériaux essentielles dans la fabrication des nouveaux dispositifs optoélectronique. Spécialement l'alliage semi conducteur ternaire est fréquemment utilisé pour leur structure de bande et spécialement la variation de leur gap énergétique en fonction de la composition [6].

I.8.1 LES DIFFERENTS TYPE D'ALLIAGES SEMI CONDUCTEURS

Les chercheurs classés le type d'alliages semi conducteurs a base de leurs constituants selon la classification suivant :

I.8.1.1 LES ALLIAGES BINAIRES

Tous n'ont pas le même intérêt potentiel

$A^I B^{VI}$: AgCl, CuBr, KBr, Li F, ...

$A^{II} B^{VI}$: Cds, CdSe, CdTe, ZnS, ZnO, ZnSe, HgTe, HgSe.

$A^{III} B^V$: les antimoniures, les arséniures, les phosphures, et les nitrures des Éléments : Aluminium, Gallium, Indium et Bore (GaAs, InSb, BN, AlAs, INP ...).

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

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

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

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

$A^I B^{VI}$: CuS, CuO, Cu₂O, [3].

I.8.1.2 LES ALLIAGES TERNAIRES

- **Ternaires 2+1:** S'il y a substitution de 2 atomes sur la colonne III et un atome de la colonne V soit: $A^{III}B^{V}_{1-x}C^{V}$
- **Ternaires 1+2:** S'il y a substitution d'un atome de la colonne III et deux atomes de la colonne V : AB_xC_{1-x}

I.8.1.3 L'ALLIAGE QUATERNAIRE

- **Quaternaires1+3 :** S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit :
 $A_x A_y A_{(1-x-y)} B$
- **Quaternaires2+ :** S'il y a substitution des 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux soit :
 $A_x A_{(1-x)} B_y B_{(1-y)}$
- **Quaternaires 3+1**

I.9 METHODES UTILISEES POUR CALCULER LES PROPRIETES PHYSIQUES DES ALLIAGES

Un semi-conducteur est supposé uniforme, cependant l'effet des fluctuations du à la composition x sont inévitable, Généralement on considère, ces fluctuations comme une perturbation qui est calculée par le second ordre de l'approche VCA [12].

I.9. 1 APPROXIMATION DU CRISTAL VIRTUEL (V.C.A)

Le cristal ternaire $A_x B_{1-x} C$ est composé des molécules AC avec une fraction molaire x et des molécules BC avec une fraction $(1-x)$ [13] La valeur moyenne de la propriété physique F étant :

$$F(x) = xF_{BC} + (1-x) F_{AC} \quad (\text{I-21})$$

On utilise la loi de Vegard pour calculer la constante de réseau $a(x)$:

$$a(x) = x \cdot a_{AC} + (1-x) \cdot a_{BC} \quad (\text{I-22})$$

Avec: a_{YN} : la constante de réseau du composé YN

a_{GaN} : la constante de réseau du composé GaN

Le gap énergétique d'alliage ternaire donné par :

$$E_g(x) = x \cdot E_{AC} + (1-x) \cdot E_{BC} + b \cdot x \cdot (1-x) \quad \text{Avec:} \quad (\text{I-23})$$

E_{AC} : le gap du composé AC

E_{BC} : le gap du composé BC

b étant le paramètre de courbure (bowing) qui est souvent prouvé par l'expérience.

L'origine du bowing e

1.9.1.1 LE POTENTIEL EFFECTIF DU DESORDRE

L'hamiltonien de system donné par

$$H = -\hbar^2/2m\Delta + V_P(r) \quad (\text{I-24})$$

Et :

$$V_P(r) : V_{vc}(r) + V_{dés}(r) \quad (\text{I-25})$$

Avec :

$V_P(r)$: le pseudo potentiel du cristal.

V_{vc} : potentiel périodique virtuel du cristal

$V_{dés}$: potentiel non périodique, est l'effet désordre du cristal

$$V_{dés}(r) = (1-x) \sum_{jBC} \Delta(r - R_j) - x \sum_{jAC} \Delta(r - R_j) \quad (\text{I-26})$$

Avec:

$$\Delta(\mathbf{r}) = V_{AC}(\mathbf{r}) - V_{BC}(\mathbf{r}) \quad (\text{I-27})$$

j_{AC} et j_{BC} indiquent que la sommation est sur les sites des molécules AC et BC respectivement.

Le VCA considère les approximations suivantes :

$$\sum_A \Delta(\mathbf{r} - R_j) = x \sum_j \Delta(\mathbf{r} - R_j) \quad (\text{I-28})$$

Et

$$\sum_B \Delta(\mathbf{r} - R_j) = (1-x) \sum_j \Delta(\mathbf{r} - R_j) \quad (\text{I-29})$$

Ainsi on obtient $V_{dés} = 0$ En négligeant l'effet du désordre, on aboutit donc a une mauvaise concordance entre les valeurs calculées et celles fournies par l'expérience [8].

Pour remédier à ce problème l'effet du désordre est induit par le potentiel $V_{dés}$ c'est ce qu'on appelle la V.C.A améliorée qui considère les approximations suivants :

$$\sum_A \Delta(\mathbf{r} - R_j) = \alpha x \sum_j \Delta(\mathbf{r} - R_j) \quad (\text{I-30})$$

$$\sum_B \Delta(\mathbf{r} - R_j) = \beta (1-x) \sum_j \Delta(\mathbf{r} - R_j) \quad (\text{I-31})$$

α et β sont les fonctions du désordre

Donc le potentiel du désordre donné par la relation suivant :

$$V_{dés} = (\alpha - \beta) x (1-x) \sum_j \Delta(\mathbf{r} - R_j) \quad (\text{I-32})$$

$$\alpha - \beta = \pm \frac{1}{N[x(1-x)]^{1/2}} \left(\frac{N^2(1-x)}{x} + \sum_{n=0}^N C_n^N x^{N-n-1} (1-x)^{n-1} [n^2 - 2nN(1-x)] \right)^{1/2} \quad (\text{I-33})$$

Avec C_n^N : représente la combinaison avec laquelle les n plus proches sites occupés aléatoirement par un composé binaire YN et GaN.

Après simplification :

$$V_{\text{dés}} = - \left[\frac{x(1-x)}{N} \right]^{1/2} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{I-34})$$

Donc le potentiel de désordre de tout les sites de cristal donné par :

$$V_{\text{dés}} = -P[x(1 - X)]^{1/2} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{I-35})$$

P est le paramètre d'ajustement produisant le bowing

Ou

$$P = \frac{[\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)^2]^{1/2}}{\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)} \quad (\text{I-36})$$

Et

I : indiquent le i^{eme} plus proche voisin

N : peut être étendu pour inclure tous les sites du cristal

D_i : la distance entre le i^{eme} plus proche voisins.

L'addition de ce potentiel de désordre avec potentiel périodique effectif du cristal :

$$V(r) = V_{\text{VCA}}(r) - P[x(1 - X)]^{1/2} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{I-37})$$

Le modèle empirique du pseudo potentiel couplé avec l'approche VCAA, donne une expression générale des facteurs de forme du pseudo potentiel.

$$V(G) = x V_{\text{AC}}(G) + (1-x) V_{\text{BC}}(G) - p[x(1-x)]^{1/2} [V_{\text{AC}}(G) - V_{\text{BC}}(G)] \quad (\text{I-38})$$

Ce sont ces facteurs de formes qui ont utilisés pour le calcul du gap fondamental de l'alliage ternaire semi conducteur $Y_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

I.10. INTERET TECHNOLOGIQUE DES ALLIAGES SEMI CONDUCTEURS

- ✓ Les alliages semi conducteurs très important dans les applications optoélectronique comme les dispositifs a base de silicium qui utilise dans la fabrication de cellule solaire.
- ✓ Ainsi que le développement des fibres optiques de silice avec des caractéristiques de dispersion et d'atténuation intéressantes dans la gamme de

longueurs centrées autour le $1.3\mu\text{m}$ et de $1.5\mu\text{m}$ nécessite composants d'extrémité (émetteur et détecteur de lumière) des dispositifs réalisés à partir des alliages III-V [10]

- ✓ L'utilisation dans le domaine médicale comme les diodes laser a cause de lecture digital des informations aussi le domaine militaire par leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle silicium.
- ✓ Leur propriété semi isolant permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences [2].

I.11. CONCLUSION

Il est important de connaitre les propriétés structurales, électroniques optiques et des semiconducteurs. Les alliages sont des matériaux ayant une vaste utilisation dans l'industrie des nouvelles technologies, couvrant une gamme allant des alliages métalliques, mis au point dans le but de contrôler les propriétés mécaniques et magnétiques des systèmes, aux cristaux semi-conducteurs mixtes, où les propriétés électroniques sont ajustées par la teneur en un composant de l'alliage.

Références bibliographiques



Références Bibliographiques

- [1] C. Kittel, (physique de l'état solide) , Ed. Dunod université (1983)
- [2] N. Baghdadli, Thèse de Doctorat en physique, Université Tlemcen (2013)
- [3] A. Bechiri, Thèse de Doctorat en physique, Université Constantine (2006)
- [4] E. Mooser, (introduction à la physique du solide) 1Ed .Presses polytechnique et universitaires romandes (1993)
- [5] P.Y. Yu, M. Cardona, « Fundamentals of Semiconductors », Graduate Texts in Physics, Ed Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (2010).
- [6] M. Berber thèse de Doctorat en électronique Université Sidi Bel Abbes (2014)
- [7] H. Mathieu physique des semi-conducteurs et composants électronique .Masson (1987)
- [8] M. Benaïcha, mémoire de magister. Université Batna, (2007)
- [9] O. Krebs and P. Voisin P'hys Rev Lett 77, 1829 (1996)
- [10] T.L. Floyd « Electronique : Composants et systèmes d'application », Ed Reynald Goulet inc, (2004).
- [11] F. Mezrag Mémoire doctorat de sciences en physique du solide université Mohamed Khider Biskra (2012)
- [12] H. Mathieu (physique de semi-conducteur et composants électronique) édition Dussod paris (2001)
- [13] L.Tirado-Mejia, j. I Marin- Hartado, H, Ariza-Calderon, phys, stat. SOL.(b) 220 (2000) 255
- [14] N. M. Ravindra, V. K. Srivastava, Infrared Phys. 19 (1979) 603.
- [15] V. P. Gupta, N. M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. B 100 (1980) 715
- [16] P. Hervé, L. K. J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609
- [17] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. B 174 (1992) k91
- [18] N. M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007)
- [19] R. R. Reddy, Y. N. Ahammed, Infrared Phys. Technol. 36 (1995) 825

Chapitre II

**METHODES DE CALCUL DES BANDES
D'ENERGIES**



Chapitre II

Méthodes de calcul des bandes d'énergies

II.1 INTRODUCTION

Les méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques, basées sur le développement des concepts de base de nouveaux algorithmes, ont fait un impact crucial, afin de comprendre les propriétés et les caractéristiques des matériaux et fournir par la suite, des données complémentaires pour les expérimentateurs [1].

On utilise ces méthodes pour faciliter et simplifier les calculs et obtenir des solutions approchées.

II. 2 L'EQUATION DE SCHRÖDINGER

Les lois de mécanique classique ne décrivent pas correctement les propriétés de très petites particules comme les ions et les électrons. Donc les physiciens font appel à la mécanique quantique qui est basée sur l'équation de Schrödinger qui permet de trouver la fonction d'onde associée aux régimes stationnaires d'un système.

Pour le cas d'un cristal, cette équation s'écrit sous la forme suivante :

$$H\Psi (r_i, R_\alpha) = E\Psi (r_i, R_\alpha) \quad \text{(II-1)}$$

Sachant que :

H : Hamiltonien de système

E : l'énergie totale de cristal

R_α : les coordonnées des noyaux

r_i : les coordonnées des électrons

Ψ : la fonction d'onde de système

Cependant la résolution de l'équation de Schrödinger ne peut pas être résolue qu'en faisant certaines approximations [2].

II. 3 L'HAMILTONIEN DU CRISTAL

L'hamiltonien de système devient à cause de l'interaction entre les particules de cristal par des forces attractive ou répulsive.

L'expression de L'hamiltonien total de système donné par :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (\text{II-2})$$

Et :

T_e : l'énergie cinétique totale des électrons

$$T_e = \sum_{i=1}^{N_e} T_i = \sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} \right) \quad (\text{II-3})$$

m : la masse de l'électron

T_n = l'énergie cinétique totale des noyaux

$$T_n = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} T_i = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_\alpha}{2M} \right) \quad (\text{II-4})$$

M : La masse des noyaux

V_{ee} : l'énergie d'interaction des électrons entre eux

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (\text{II-5})$$

V_{en} : l'énergie d'interaction des noyaux entre eux

$$V_{en} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (\text{II-6})$$

AVEC :

$Z_\alpha e$: charge de noyau α

$Z_\beta e$: charge de noyau β

V_{nn} : l'énergie d'interaction noyaux-électrons :

$$V_{nn} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} V_{i\alpha} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{r_i - R_\alpha} \quad (\text{II-7})$$

II. 4 L'APPROXIMATION ADIABATIQUE

Pour la résolution de l'équation de Schrödinger des systèmes complexes on utilise la première approximation dite approximation de Bohr-Oppenheimer

Cette dernière est basée sur le découplage de mouvement des électrons et des noyaux justifié par la différence de masse entre les noyaux et les électrons. les électrons plus léger que les noyaux.

On impose que les noyaux atomiques soient immobiles et l'énergie cinétique des noyaux devient nulle et l'énergie d'interaction des noyaux est considère comme un terme constant, mais l'on peut rendre nulle par un choix convenable de l'origine [3].

Donc on a Lhamiltonien en une partie électronique et en partie nucléaire

Lhamiltonien des électrons donné par :

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (\text{II-8})$$

L'équation de Schrödinger électronique donnée par :

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{II-9})$$

La fonction d'onde des électrons Ψ_e dépend des coordonnées des électrons et celles des noyaux immobiles.

L'approximation adiabatique ne suffit cependant pas à elle seule à résoudre l'équation de Schrödinger cause de la complexité des interactions électro-noyaux [3].

II. 5 L'APPROXIMATION DE HARTREE

Dans cette approximation on suppose que les électrons libres et indépendant c'est adire S'interagissent pas entre eux et chacun se déplace dans le champ moyens des autres électrons et noyaux.

$$H_i \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (\text{II-10})$$

$$H_i = -\frac{1}{2} \Delta + \Omega_i(r_i) + U_{ik} \quad (\text{II-11})$$

V_{ext} = l'énergie de potentiel dans le champ

Ω_i : potentiel de Hartree

Le potentiel de Hartree donné par la forme suivant :

$$\hat{V}_i(r) = \frac{-e \int \rho_i(r')}{|r-r'|} d^3 r \quad (\text{II-12})$$

La densité des électrons $\rho_i(r)$ étant donnée par :

$$\rho_i = -e \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} |\psi_j(r)|^2 \quad (\text{II-13})$$

Cette méthode ignore l'antisymétrie de la fonction d'onde

II. 6 L'APPROXIMATION DE HARTREE FOCK

L'adjonction de trois principes : celui du champ moyens, celui de principe variationnel et celui de l'auto cohérence va nous permettre sous certaines conditions de nous approcher le plus possible de la solution recherchée : ces trois principes résument l'approximation Hartree Fock.

Pour pallier le problème de l'antisymétrie imposant à la fonction d'onde Ψ de changer de signe lors de la permutation de deux électrons. Suppose que chaque électron se déplace indépendamment dans un champ noyau.

Pour la résolution de l'équation de Schrödinger pour N corps

On a

$$H_i = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (\text{II-14})$$

Donc l'équation de solide écrit

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(R) \right] \Psi(r) = E(k) \Psi(r) \quad (\text{II-15})$$

$\Psi(r)$: la fonction d'onde propre

$E(k)$: l'énergie propre du système

II.7 METHODE DU PSEUDOPOTENTIEL

La méthode de pseudo potentiels fut introduite par Fermi en 1934 pour étudier les états atomiques des couches minces. Dans l'année suivante, Hellman proposa que cette méthode puisse être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des métaux alcalins, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Phillips et Kleinman en 1959 qui se sont basés sur la méthode des ondes planes orthogonales [4,5].

On peut faire la distinction entre deux types d'électrons : les électrons de cœur (ceux des couches les plus proches du noyau, et sont peu affectés par les potentiels créés par les noyaux environnants) et les électrons de valence. Les orbitales de cœur sont les plus basses en énergie, elles sont localisées près du noyau, sont très peu sensibles à l'environnement et ne participent pas aux liaisons chimiques. En outre, elles sont difficiles à représenter sur une base d'ondes planes car elles possèdent généralement de fortes oscillations autour des noyaux. En revanche, les orbitales de valence sont peu localisées et s'étendent donc loin du noyau. Ce sont elles qui déterminent au premier ordre les propriétés physico-chimiques [3].

L'effet d'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudo-potentiels [6].

L'avantage de cette approximation est que le nombre d'électrons apparaissant de manière explicite dans les calculs s'en trouve fortement réduit, seuls les électrons de valence sont pris en compte.

II.7.1 FORMALISME MATHEMATIQUE

La fonction mathématique de cette méthode est présentée comme suit : on écrit la fonction d'onde exacte pour un électron de valence Ψ_k comme une combinaison linéaire des fonctions d'ondes O.P.W, et soit Φ_k l'onde plane de ce développement [7].

$$\Psi_k = \Phi_k^v + \sum_c b_c \Phi_k^c \quad (\text{III-1})$$

On a :

$$\langle \Phi_k^c | \Psi_k \rangle = 0 \quad (\text{III-2})$$

$$\rightarrow \Psi_k = \Psi_k^v - \sum_c \langle \Phi_k^c | \Psi_k \rangle \Phi_k^c \quad (\text{III-3})$$

Ψ_k vérifie l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi_k = E_k \Psi_k \quad (\text{III-4})$$

En remplaçant I-3 dans I-4 :

$$H\Phi_K^V - H \sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_k \Psi_k \quad (\text{III-5})$$

On sait que :

$$H\Phi_K^C = E_K^C \Phi_K^C \quad (\text{III-6})$$

Donc :

$$H\Phi_K^V - E_K^C \sum_C \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_k \Psi_k = E_k [\Phi_K^V + \sum_C -\langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C] \quad (\text{III-7})$$

$$H\Phi_K^V + \sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C = E_k \Phi_K^V \quad (\text{III-8})$$

Avec

$$V_R \Phi_K^V = \sum_C (E_K - E_K^C) \langle \Phi_K^C | \Phi_K^V \rangle \Phi_K^C \quad (\text{III-9})$$

On peut écrire :

$$(H+V_R)\Phi_K^V = E_k \Phi_K^V \quad (\text{III-10})$$

On pose :

$V_P = V_C + V_R$ c'est le pseudo potentiel qui est faible.

Tell que :

V_C : potentiel attractif du cœur négatif.

V_R : potentiel répulsif positif.

Le pseudo potentiel d'onde Φ_K^V est important de noter l'énergie ϵ_k n'est pas un pseudo énergie mais la varie énergie correspondante à la fonction d'onde du système.

Donc on peut résoudre l'équation de Schrödinger par la considération du pseudo potentiel comme un terme de perturbation.

II.7.2 LES MODELES DE PSEUDO POTENTIEL

II.7.2.1 MODELE LOCAL

Cette méthode plus simple pour déterminer les fonctions propres et les valeurs propres de l'équation de Schrödinger.

Le potentiel local dépend de la position (r), plusieurs formes du potentiel ont été proposées.

Les modèles les plus simples consistent en un potentiel coulombien loin de la région du cœur, et en une simple constante loin de cette région [8].

La forme de potentiel est :

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & \mathbf{r} > \mathbf{r}_c \\ \frac{-Ze}{r_c} & \mathbf{r} \leq \mathbf{r}_c \end{cases} \quad (\text{III-11})$$

Z : le nombre des électrons

R_c : le rayon de cœur

II.7.2.1.A LE MODELE D'ASHCROFT

Dans ce modèle, le potentiel est toujours similaire et souvent utilisé, appelé aussi (the empty core potential) [8] c'est le potentiel des cœurs inoccupés donne par :

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & \mathbf{r} > \mathbf{r}_c \\ \mathbf{0} & \mathbf{r} \leq \mathbf{r}_c \end{cases} \quad (\text{III-12})$$

Le modèle de Heine Abarenkov est simplifié par Ashcroft, il considère que toutes les constantes A_j à l'intérieur du cœur ionique sont nuls.

II.7.2.1.B LE MODELE DE HEINE ABARENKOV

Ont introduit plus de flexibilité pour cet ajustement par l'introduction d'un potentiel A considère comme constante dans la région du cœur [9]. Dans ce cas la forme du potentiel est :

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & \mathbf{r} > r_c \\ A & \mathbf{r} \leq r_c \end{cases} \quad (\text{III-13})$$

Z : nombre d'électrons de valence.

II.7.2.2 LE MODELE NON LOCAL

Le potentiel (pseudopotentiel) non local dépend de r et de l'énergie. Dans la région de cœur on remplace la constante A par des constantes différentes $A_l(E)$ pour chaque nombre quantique l .

Donc on écrit le pseudopotentiel non local sous la forme [10] :

$$V_{NL}(r) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{III-14})$$

Où :

$A_l(E)$: la constante de la dépendance du potentiel en énergie des états du cœur.

$f_l(r)$: la fonction qui représente l'effet de l'état du cœur.

P_l : L'opérateur de la projection de la $l^{\text{ème}}$ composante des moments angulaires.

II.7.2.2.A LA FONCTION DE HEINE-ABARENKOV

La forme de la fonction de Heine-Abarenkov est carrée et simple, son expression donnée par [11] :

$$f_l(r) = \begin{cases} 1 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \quad (\text{III-15})$$

Avec :

R_c : est le rayon du cœur.

La figure au-dessous représente la fonction de Heine-Abarenkov :

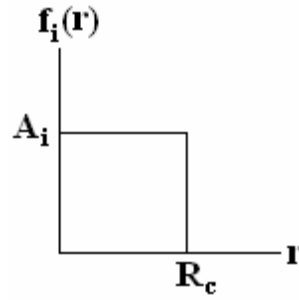


Figure II. 1 la fonction de Heine-Abarenkov

II.7.2.2.B MODELES DE GAUSS

La fonction Gaussienne [5] est donnée par la relation suivante :

$$f_1(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{R_c^2}\right) \quad (\text{III-16})$$

La figure au-dessous représente la fonction de gauss :

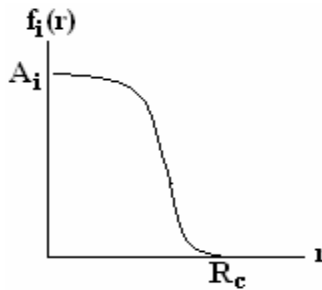


Figure II. 2 la fonction de gauss [19].

II.8 LA METHODE EMPIRIQUE DES PSEUDOPOTENTIELS (E.P.M)

E.P.M utilisée pour la détermination de facteurs de forme et des paramètres pour le calcul de bande électronique. Cette méthode est basée sur les données expérimentales, aussi cette technique appliquée avec succès pour les semi-conducteurs de structure Zinc blende elle a donnée très bons résultats pour le Ge et Si.

Les facteurs de structures peuvent être déterminés de l'analyse des expériences de diffraction de rayons X ou par les neutrons.

II.8.1 L'APPROXIMATION EMPIRIQUE LOCALE

Par l'utilisation de quelques termes de $V(G)$ on peut calculée la structure des bandes.

L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de formes $V(G)$ du pseudopotentiel $V_P(r)$ qui donne la superposition linéaire des potentiels atomiques [8] qui donné par :

$$V_P(r) = \sum_{R,\tau} V_a(r - R - \tau) \quad (\text{III-17})$$

Avec :

R : vecteur de réseau direct.

τ : vecteur de translation du réseau directe.

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

$$V_P(r) = \sum_G S(G)V_a(G)e^{iG.r} \quad (\text{III-18})$$

$V_a(G)$: le facteur de forme.

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

$S(G)$ donné par :

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(iG.r) \quad (\text{III-19})$$

N_a : le nombre d'atomes de base.

Par la solution de l'équation suivante on peut déterminer la fonction d'onde et les valeurs de la bande d'énergie :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_P(r) \right] \Psi_{n,k}(r) = E_n(k) \Psi_{n,k}(r). \quad (\text{III-20})$$

n : l'indice de la bande.

$V_P(r)$: le pseudopotentiel.

$\Psi_{n,k}(r)$: les fonctions de Bloch.

Notre but dans ce calcul est la connaissance des nombre réduit de facteurs de forme et facteurs de structure.

Le calcul par la méthode E.P.M est présenté sur l'organigramme au-dessous, on commence par le choix de facteur de forme $V(G)$ à l'aide des paramètres introduits (facteur de structure), la résolution de l'équation de Schrödinger pour les énergies propres $E(K)$ et les fonctions d'onde $\Psi_{n,k}(r)$ et deux dernières que nous comparons à l'expérience. Si d'accord pas entre la théorie et l'expérience $V(G)$ est altéré le processus est répétée jusqu'à la convergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques.

Nous n'avons pas besoin des grands nombres d'itération pour obtenir l'accord entre la théorie et l'expérience.

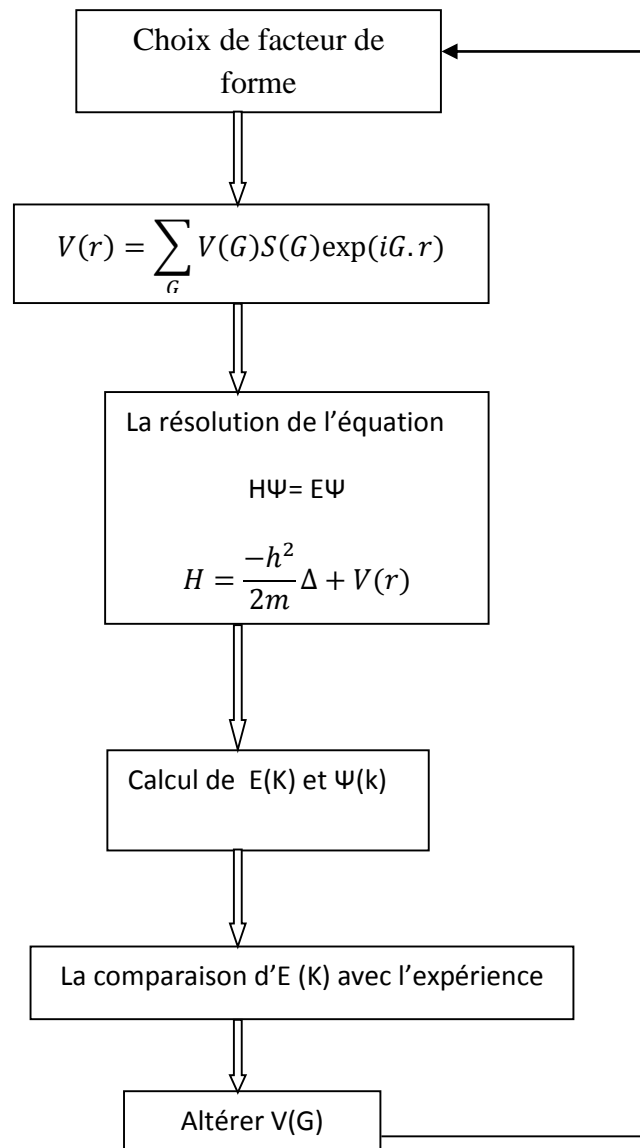


Figure II. 3 l'organigramme de la méthode E.P.M locale [1]

II.9 CONCLUSION

Les calculs de la structure de bandes électroniques reposent sur un grand nombre d'hypothèses présentant chacune des difficultés propres dont il faut tester la validité par un retour à l'expérience.

Ces méthodes sont adoptées selon le type de propriétés que l'on veut étudier, certaines nécessitent un calcul numérique très lourd, comme les méthodes des premiers principes, d'autres comme l'EPM permet de calculer d'une façon relativement économique en terme du temps, des paramètres physiques en se basant sur l'utilisation d'un nombre réduit de facteurs de formes pour le calcul de la structure de bandes et c'est la raison principale qui rend cette méthode pratique.

Références bibliographiques



Références Bibliographiques

- [1] F. Mezrag, Thèse de doctorat en sciences Université Biskra (2012)
- [2] F. Mezrag, Mémoire de magister Université Mohamed Boudiaf de Msila (2003)
- [3] Sebihi Nassima, Thèse de doctorat en science Université de Sétif (2015)
- [4] M.L. Cohen and J.R. Chelikosky, in electronic structure and optical proprieties of semi conducteurs, springer series in solid state sciences Ed springer new York (1988)
- [5] k. Kassali, Thèse de doctorat en sciences, Université de Sétif (2005)
- [6] L. Hannachi, Thèse de doctorat en science Université Setif (2010)
- [7] N .W.Ashroft.Phys.Lett23,48 (1966)
- [8] H. Baaziz, Thèse de doctorat en science Université Batna 2006
- [9] S. Bounab, Thèse de Magister, Univ de Constantine (2002).
- [10] I.V. Abarencov and V.Heine,phil.Mag.12(1965) 529
- [11] H. Nara and T.Kobaysi,J.Phys.Soc.Japan41(1976)1429

Chapitre III

RESULTATS ET DISCUSSIONS



III.1. INTRODUCTION

Dans notre travail on étudie les propriétés optiques et électroniques de l'alliage ternaire semi-conducteur $Y_x Ga_{1-x} N$ par simulation numérique.

Nous nous intéressons à l'étude de la structure des bandes en fonction de vecteur d'onde k ainsi que l'énergie de gap, l'indice de réfraction et la constante diélectrique en fonction de la composition x aussi la masse effective.

Pour faire notre calcul on utilise la Méthode Empirique des Pseudopotentiels (E.P.M) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA).

Le composé YGaN est composé de deux matériaux semi-conducteurs YN et GaN. Le GaN est un matériau semi-conducteur bien connu pour ses propriétés et avec lequel il a été amené à former des hétérostructures ou en alliages avec AlN, InN [1,2], YN [3], entre autres. L'YN est peu connu mais il est d'un grand intérêt pour son comportement semi-conducteur [4]. Leur similitude et une partie de leur intérêt réside dans le fait que les constantes de maille des deux matériaux sont très proches.

En alliant Y avec de l'azote, nous pouvons produire des composés avec d'excellentes combinaisons de propriétés telles que la dureté, l'inertie chimique, la conductivité électrique et thermique [1, 2]. Dans l'industrie, YN peut être important comme contact électrique, barrière de diffusion, couche tampon, entre autres utilisations [3]. En outre, des combinaisons de GaN et YN pourraient également être utiles dans la croissance d'hétérostructures YN/GaN ou d'alliages YGaN [4].

III.2. LES PROPRIÉTÉS OPTOÉLECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS

III.2.1. LES PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES

La nature empirique de la méthode des pseudopotentiels consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser un accord le plus étroit des niveaux d'énergie calculés avec les valeurs théoriques.

Les facteurs de formes ajustés des matériaux semi-conducteurs GaN et YN ainsi que les paramètres de réseau sont illustrés dans le Tableau 1 ci-dessous :

| Composé binaire | Facteurs de forme (Ryd) | | | | | |
|-----------------|-------------------------|----------|-----------|----------|----------|-----------|
| | $V_S(3)$ | $V_S(8)$ | $V_S(11)$ | $V_A(3)$ | $V_A(4)$ | $V_A(11)$ |
| GaN | -0.347 | -0.016 | 0.212 | 0.160 | 0.200 | 0.135 |
| YN | -0.350 | 0.030 | 0.113 | 0.084 | 0.214 | 0.000 |

Tableau III. 1 Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques des composés binaires GaN et YN [2]

Le Tableau 2 présente les Paramètres de réseaux des composés binaires GaN et YN

| Composé binaire | Paramètre du réseau (Å) |
|-----------------|-------------------------|
| GaN | 4.50 ^a |
| YN | 5.19 ^b |

Tableau III. 2 Paramètres de réseaux des composés binaires GaN et YN

^a Référence [5]

^b Référence [3]

Le Tableau 3 ci- dessous illustre les valeurs des gaps énergétiques des composés binaires GaN et YN aux points de haute symétrie Γ , X et L .

| Composé binaire | Gap d'énergie (eV) | | | | | |
|-----------------|-----------------------|--------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| | E_{Γ}^{Γ} | | E_{Γ}^X | | E_{Γ}^L | |
| | Cal | Exp | Cal | Exp | Cal | Exp |
| GaN | 3.29 ^a | 3.299 ^b | 4.57 ^a | 4.52 ^b | 6.04 ^a | 5.59 ^b |
| YN | 5.16 ^a | 4.2 ^c | 5.16 ^a | 4.2 ^c | 6.97 ^a | 6.0 ^c |

Tableau III. 3 : Les Gaps d'énergies calculés pour les binaires GaN et YN.

^a Notre travail

^b Référence [4]

^c Référence [3]

III.2.1.A. GAP ENERGETIQUE

La bande d'énergie comprise entre la bande de conduction et la bande de valence appelée bande interdite ou gap c'est la valeur de l'énergie de cette bande qui va fixer les propriétés électriques du matériau.

Les Figures (III. 1-III. 3) représentent respectivement la variation des gaps d'énergies à savoir $E_{\Gamma-\Gamma}$, $E_{\Gamma-X}$, $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium, allant de 0 à 1, en utilisant la méthode VCA cela veut dire que l'effet de désordre dans notre cas n'est pas tenu en compte.

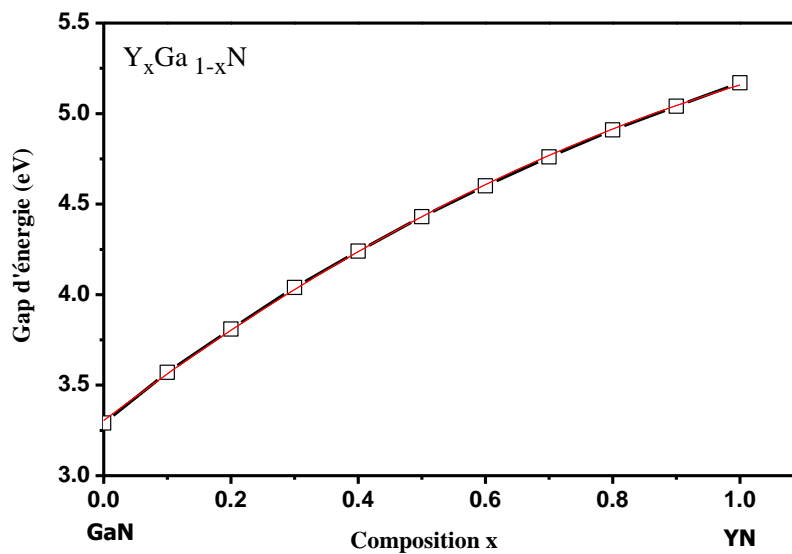


Figure III.1 Variation de l'énergie de gap $E_{\Gamma-\Gamma}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_xGa_{1-x}N$

La figure III. 1 illustre la Variation de l'énergie de gap $E_{\Gamma-\Gamma}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_xGa_{1-x}N$.

Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur la courbe nous donne l'expression analytique suivante :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = -0.79x^2 + 2.65x + 3.31$$

On remarque que si on augmente la concentration de l'Yttrium, l'énergie de gap augmente d'une façon monotone et non linéaire.

La variation du gap $E_{\Gamma-X}$ de l'alliage $Y_xGa_{1-x}N$ en fonction de la composition x est présentée sur la Figure III. 2.

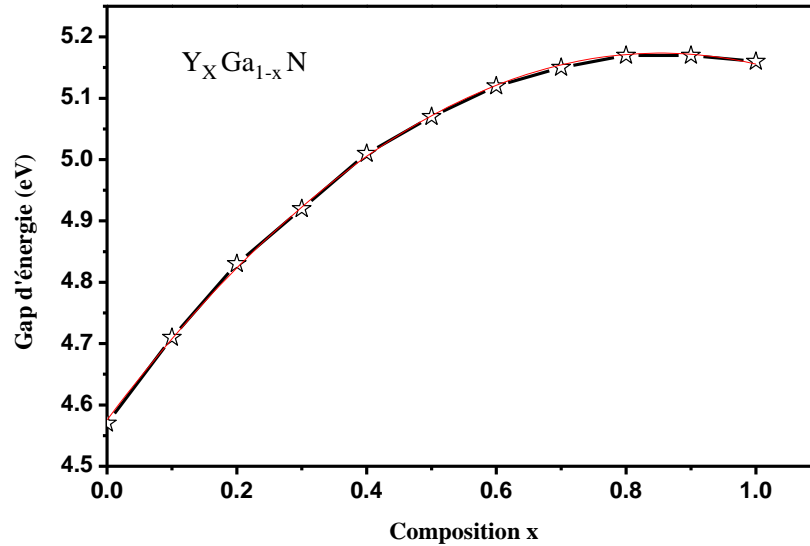


Figure III.2 Variation de l'énergie de gap $E_{\Gamma-X}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_xGa_{1-x}N$

Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur la courbe nous donne l'expression analytique suivante :

$$E_{\Gamma}^X(x) = -0.82x^2 + 1.4x + 4.58$$

On remarque d'après la courbe que la variation est monotone et non linéaire

La variation du gap $E_{\Gamma-L}$ de l'alliage $Y_xGa_{1-x}N$ en fonction de la composition x est présentée dans la figure (III-3).

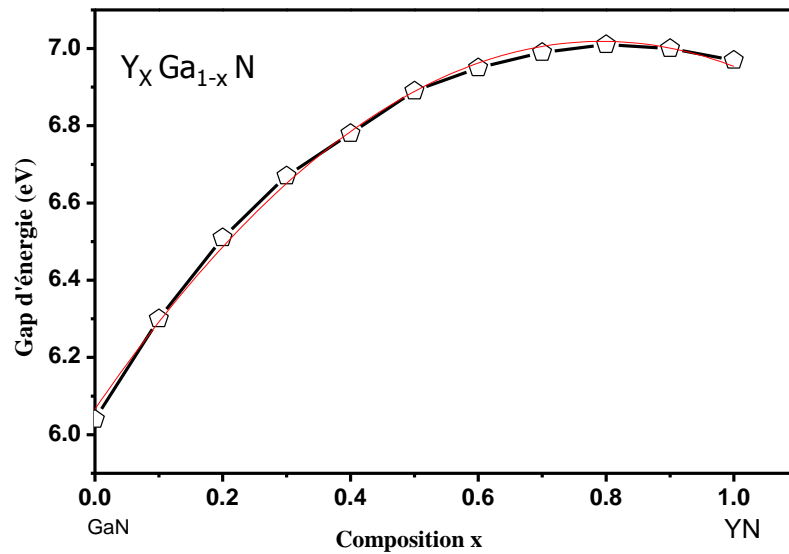


Figure III.3 Variation de l'énergie de gap $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_x Ga_{1-x} N$

Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur la courbe nous donne l'expression analytique suivante :

$$E_{\Gamma}^L(x) = -1.52x^2 + 2.40x + 6.06$$

On remarque d'après la courbe que la variation est monotone et non linéaire

Pour connaître la possibilité d'existence des transitions de gap direct ($\Gamma-\Gamma$) et des gaps indirects ($\Gamma-X$) et ($\Gamma-L$) en fonction de la concentration x , nous avons tracés les trois courbes des gaps énergétiques en fonction de x sur le même Figure III.4.

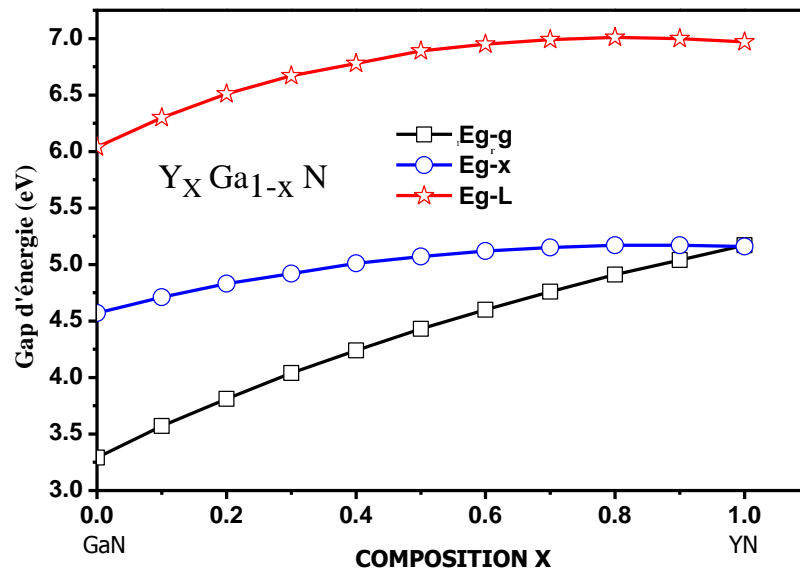


Figure III.4 Variation de des énergies de gap $E_{\Gamma-\Gamma}$, $E_{\Gamma-x}$, $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la concentration de l'Yttrium de l'alliage ternaire $Y_x Ga_{1-x} N$

On remarque sur la Figure III.4 que les trois gaps d'énergies augmentent de façon monotone et non linéaire en fonction de la concentration x . Dans l'intervalle compris entre $x=0$ et $x=1$ le gap est direct, au-delà de $x=1$ on repère un changement de gap, c'est-à-dire le gap énergétique devient indirect.

III.2.1.B. STRUCTURE DE BANDES D'ENERGIE

Les propriétés électroniques des matériaux semi-conducteurs sont importantes pour le développement de futurs dispositifs électroniques et optoélectroniques.

On trace la structure de bandes d'énergies de l'alliage ternaire $Y_x Ga_{1-x} N$ aux points de haute symétrie de la zone de Brillouin en fonction de quelques valeurs de x (0 ; 0.5 ; 1) sans tenir compte du désordre.

Les Figures. (III. 5 - III.6) représentent les structures de bandes d'énergies des composés binaires GaN, et YN respectivement en fonction du vecteur d'onde k . La structure de bande de l'alliage $Y_x Ga_{1-x} N$ est calculée aux points de hautes symétries dans la zone de Brillouin et le

long des principales lignes de symétries, et ceci pour quelques valeurs de x . Vu la similitude de ces structures pour différentes valeurs de x , seule la structure de bande électronique de l'alliage $Y_{0.5}Ga_{0.5}N$ est représentée sur la Figure III.7.

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

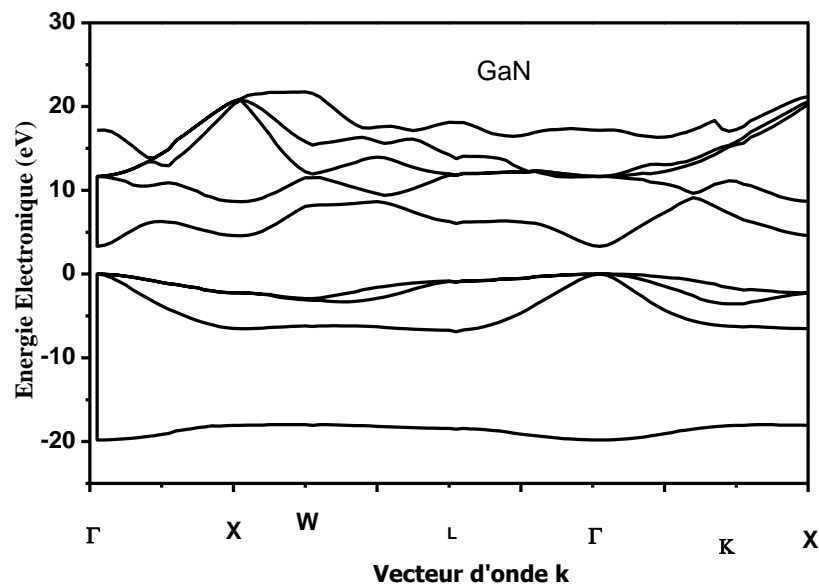


Figure III.5 Structures de bande du composé binaire GaN en fonction de vecteur d'onde k

Dans la Figure III.5 on constate que le maximum de la bande de valence est au point Γ et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ , d'où le composé binaire GaN est un semiconducteur à bande interdite directe, l'écart relevé entre le minimum et le maximum vaut 3.19 eV.

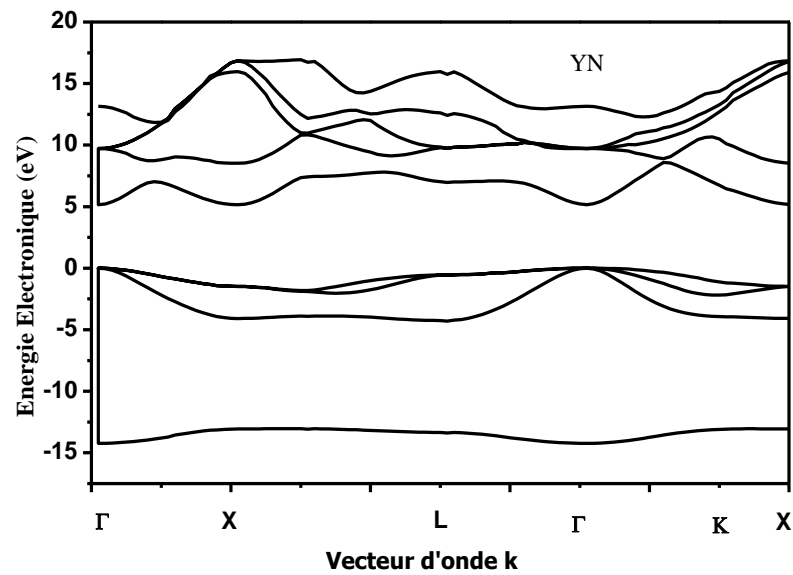


Figure III.6 Structures de bande du composé binaire YN en fonction de vecteur d'onde k

La Figure III.6 représente la structure de bande du composé YN on remarque que YN est à bande interdite directe. Ce comportement direct est associé à la vallée Γ dont le minimum se situe à 5.16 eV du maximum de la bande de valence.

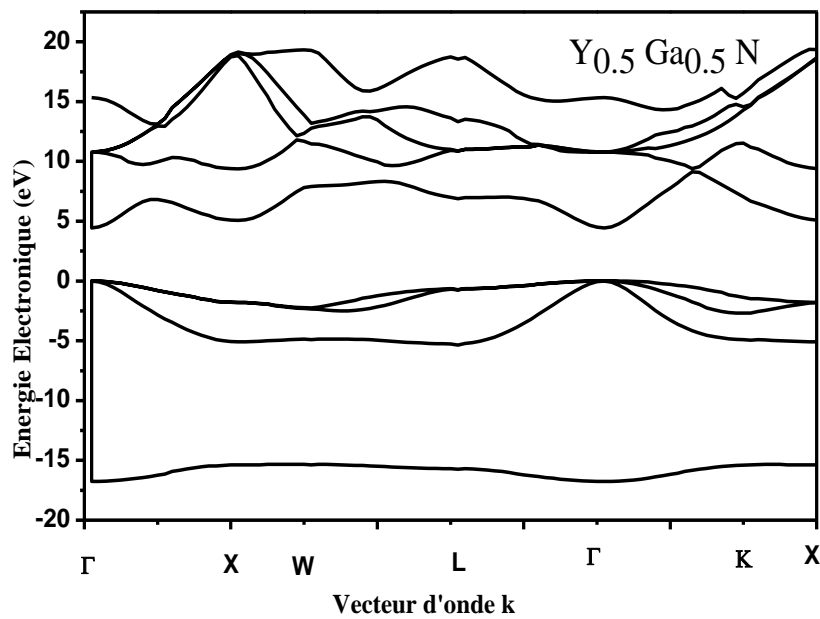


Figure III.7 structures de bande d'alliage $Y_{0.5}Ga_{0.5}N$ en fonction de vecteur d'onde

La structure de bande d'énergie de l'alliage ternaire $Y_{0.5}Ga_{0.5}N$ est schématisée sur la Figure III.7, où le comportement du gap d'énergie est direct.

III.2.1.C. LA MASSE EFFECTIVE

Nos résultats ont montré que la masse effective des électrons pour GaN est de $0.121 m_0$ et pour YN est de $0.20 m_0$, où m_0 est la masse de l'électron libre. Nos valeurs sont raisonnables avec les valeurs expérimentales qui sont $0.13 m_0$ et $0.198 m_0$ rapporté par les références [6] et [7] pour les composés binaires *GaSb* et *AlSb* respectivement.

La Figure 15 illustre la variation de la masse effective de l'électron en fonction de la fraction molaire x .

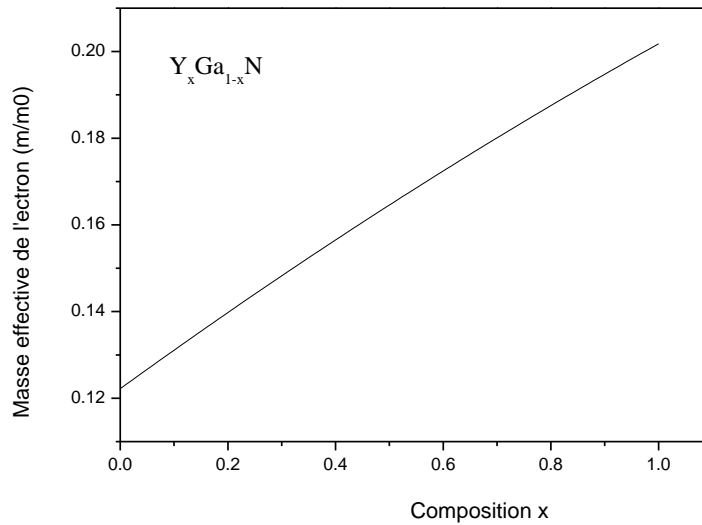


Figure III.8 Variation de la masse effective du $Y_xGa_{1-x}N$ en fonction de composition x

L'expression analytique de l'équation d'interpolation quadratique, en utilisant la méthode des moindres carrés est :

$$\frac{m_e^*(\Gamma)}{m_0} = -0.01039 x^2 + 0,08997 x + 0,1222$$

Au fur et à mesure que la concentration de l'Yttrium, c'est-à-dire, en partant de GaN ($x = 0$) à YN ($x = 1$), la variation de la masse effective des électrons au point Γ , qui croit linéairement, d'après l'équation d'interpolation, on a un paramètre de courbure très faible égal à (0.01039). On peut déduire que la mobilité des électrons peut diminuer avec l'augmentation de la composition x .

III. 2. 2 LES PROPRIETES OPTIQUES ET D'ELECTRIQUES

III. 2. 2. A L'INDICE DE REFRACTION

L'indice de réfraction très important pour déterminer les propriétés électrique et optique des matériaux.

La Figure III. .8 représente la variation de l'indice de réfraction pour les 6 modèles en fonction de la composition x. leur variation est non linéaire et diminue avec 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 Moss.

| Matériau | n calculé à partir de : | | | | | | Exp |
|--|-------------------------|-----------------------------|----------------------------|-------------------------------|--------------------|----------------------------|-------------------|
| | Modèle de de Moss | Modèle de Gupta et Ravindra | Modèle d'Hervé et Vandamme | Modèle de Reddy et Anjaneyulu | Modèle de Ravindra | Modèle de Reddy et Ahammed | |
| GaN | 2.39 | 2.04 | 2.27 | 2.40 | 1.36 | 2.69 2 | 2.3 ^a |
| Y _{0.50} Ga _{0.50} N | 2.22 | 1.34 | 2.00 | 2.10 | 0.39 | 2.48 | |
| YN | 2.14 | 0.88 | 1.88 | 1.95 | -0.23 | 2.38 | 2.52 ^b |

Tableau III. 4 : les valeurs de l'indice de réfraction de GaN, YN et Y_{0.5}Ga_{0.5}N comparés aux donnés théoriques

^aRéf [8]

^bRéf [9]

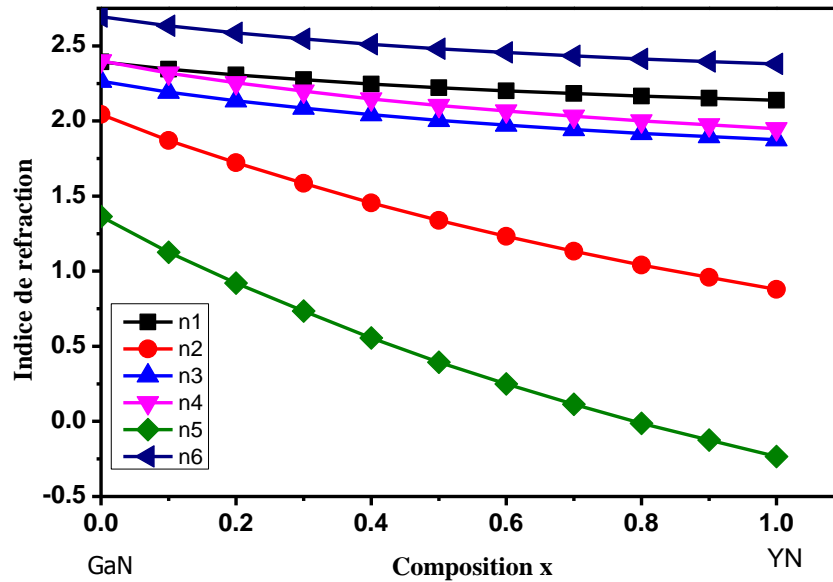


Figure III. 9 variation de l'indice de réfraction n du $Y_x Ga_{1-x} N$ en fonction de composition x du l'Yttrium pour les six modelés

III. 3 CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons utilisé la méthode de pseudopotentiel avec l'approximation (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA) ,sans tenir compte de l'effet du désordre, pour déterminer , la structure des bandes en fonction de vecteur d'onde k , la masse effective et l'indice de réfraction.

Références bibliographiques



Références Bibliographiques

- [1] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer, Berlin, 1988.
- [2] Y Oussaifi, A Ben Fredj, M Debbichi, N Bouarissa, M Said, « Calculations of electronic structure, elastic properties for $Y_xGa_{1-x}N$ and bandoffsets of $Y_xGa_{1-x}N/ScyGa_{1-y}N$ heterointerfaces » Semicond. Sci. Technol. 23 (2008) 095019.
- [3] De Paiva R, Nogueira R A and Alves J L A 2006 Brazilian J. Phys. 36/24 470
- [4] Vurgaftman I and Meyer J R 2003 J. Appl. Phys. 94 3675
- [5] Lei T, Moustakas T D, J Graham R, He Y and Berkowitz S J 1992 J. Appl. Phys. 71 4933
- [6] Fan W J, Li M F, Chong T C and Xia J B 1996 J. Appl. Phys. 79 188
- [7] Bivas Saha, Timothy D. Sands, and Umesh V. Waghmare, Journal of Applied Physics 109, 073720 (2011).
- [8] S. Adachi, « Properties of Group-IV, III-V, and II-VI Semiconductors », Ed Wiley, New york, (2005).
- [9] Bakhtiar Ul Haq a, A. Afaq b, Galila Abdellatif c, R. Ahmed a,†, S. Naseem b, R. Khenata Superlattices and Microstructures 85 (2015)

Conclusion générale



Conclusion générale

Conclusion générale

Dans notre travail, nous avons étudié quelques propriétés électroniques et optiques de l'alliage ternaire $Y_x Ga_{1-x} N$ et leur dépendance de la composition x telle que le gap énergétique, structure des bandes, la masse effective et l'indice de réfraction.

Les calculs sont fait par La Méthode Pseudopotentiels Empirique (EPM) couplée à l'approximation de cristal virtuel VCA.

Les principaux résultats de notre étude se résument ainsi :

Nous avons vu que les gaps énergétiques varient d'une façon monotone et non linéaire avec l'augmentation de la concentration x et ne présente pas de transition de gap pour l'intervalle $[0, 1]$ il est par conséquent un semi-conducteur à gap direct.

L'indice de réfraction à été calculé en utilisant 6 modèles. La variation de celui-ci est monotone et non linéaire aussi.

Un bon accord entre nos résultats et les données expérimentaux a été décelé dans ce mémoire.