

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

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

Faculté des Sciences et de la technologie

Département d'Electronique

## Mémoire

Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : ELECTRONIQUE

Spécialité : MICROELECTRONIQUE

Par :

➤ Bouguerra Fediane Amal

➤ Hammache khalissa

### *Contribution à l'étude des propriétés optoélectroniques de l'alliage semi- conducteur ternaire $Al_xGa_{1-a}Sb$*

Évalué le : .....

Par la commission d'évaluation composée de :

<i>Nom &amp; Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
<i>Mme F.Kherrat</i>	<i>MCB</i>	<i>Président</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>Dr F.Fares</i>	<i>MCB</i>	<i>Encadreur</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>Dr N.Bioud</i>	<i>MCA</i>	<i>Examineur</i>	<i>Univ-BBA</i>

Année Universitaire 2020/2021

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

*Dédicace*

*J'ai l'honneur de dédie ce mémoire à tous ceux que  
j'aime*

*A mes chers parents, ma mère qui m'a encouragé et  
soutenu tout au long de mes années d'études, mon père  
pour sa patience et son soutien, qui m'ont donné la force  
de continuer sans jamais abandonner.*

*A mon frère Sohaib*

*A mes sœurs et ma nièce ma petite princesse Roufane*

*A mon homme Abdelmouniam*

*A tous mes collègues de la promo microélectronique 2021*

*A tous mes proches amies*

*Bouguerra fediane amal*

*Bouguerra fediane amal*

## **Dédicaces**

Je dédie ce modeste travail à celle qui m'a donné  
la vie, qui s'est sacrifiée pour mon bonheur et ma  
réussite, à ma mère ...

A mon père, qui a été mon ombre durant toutes  
les années d'étude, qui a veillé à me donner  
l'aide, à m'encourager et à me protéger, que dieu  
les garde et les protège.

A mes sœurs et mon frère

A mes très chers amis

A tous ceux qui m'aiment

A tous ceux que j'aime

Je Dédie ce travail

A toutes les personnes qui sont chères à mon  
cœur, ceux dont les noms ne figurent pas sur  
cette liste.

**H.Khalissa**

## **REMERCIEMENTS**

*Nous remercions Dieu Tout-Puissant de nous avoir donné force et courage  
D'établir ce modeste travail. Nous remercions tout particulièrement notre  
encadreur*

*«Dr FARES FAHIMA», qui a accepté de superviser notre humble  
travail, Offrir des conseils avisés et leurs exigences de rigueur. Ses bonnes  
compétences et son enseignement nous ont aidés à terminer ce mémoire de  
maîtrise.*

*Remercie également les membres du jury, Nous remercions tous les enseignants  
du département d'électronique en particulier et les enseignants de l'Université  
Mohamed Al-Bachir Al-Ibrahimi en général.*

*Nous ne pouvons pas non plus oublier nos amis et collègues dans les beaux  
moments.*

*Alors tous ceux qui ont participé de loin ou de près et qui m'ont aidé à  
développer ce manuscrit.*

Sommaire

Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale.....	1
<b>Chapitre I : Notions générale sur les semi-conducteurs</b>	
I.1.introduction.....	2
I.2.Définition.....	2
I.3.les différents type de semi-conducteur.....	3
I.3.1.Semi-conducteur intrinsèque.....	3
I.3.2.semi-conducteur extrinsèques.....	3
I.4.Propriétés des semi-conducteurs.....	5
I.4.1.Propriétés Electroniques.....	5
I.4.1.1.Gap direct et Gap indirect.....	5
I.4.1.2.Transitions inter bandes.....	6
I.4.1.3.Masse effective.....	7
I.4.2.Propriétés Optiques.....	7
I.4.2.1.L'indice de réfraction.....	7
I.4.2.1.La réflectivité.....	8
I.5.structure cristalline.....	9
I.5.2.Structure Zinc Blende.....	9
I.6.semi-conducteurs III-V.....	9
I.6.1.Définition.....	10
I.6.2. Les avantage des semi-conducteurs III-V.....	10
I.7.Les applications optoélectroniques.....	11
I.8.Conclusion.....	11
<b>Chapitre II : Méthodes de calcul des bandes d'énergies</b>	
II.1.Introduction.....	12
II.2. Equation de Schrödinger d'un solide cristallin.....	12
II.3 Approximations.....	14
II.3.1 Approximation de Born-Oppenheimer.....	14
II.3.2 Approximation de Hartree.....	14
II.4 Méthodes des pseudos potentiels.....	16

II.4.1 Formalisme mathématique.....	16
II.5. La méthode empirique du pseudo potentiel local.....	19
II.6.conclusion.....	22

**Chapitre III : résultat et discussion**

III.1.Introduction.....	23
III.2.Les propriétés électroniques et optique des semi-conducteurs.....	23
III.2.1.les propriétés électroniques.....	23
III.2.1.1. Paramètre de réseau.....	24
III.2.1.1.1.Gap énergétique.....	26
III.2.1.1.2. Structure de bande d'énergie.....	30
III.2.1.1.3. Masse effective.....	33
III.2.2.Les propriétés optiques et diélectriques.....	34
III.2.2.1.L'indice de réfraction.....	34
III.2.2.2.La constante diélectrique.....	35
III.3.Conclusion.....	36

**Conclusion générale**

Conclusion générale.....	37
--------------------------	----

### Liste des figures :

**Figure01** : Silicium dopé au Phosphore

**Figure02** : Silicium dopé au Bore

**Figure03**: Transitions inter bandes a) directe b) indirecte

**Figure04**: structure zinc blende (zb)

**Figure05**: Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.

**Figure06**: L'approche du pseudo potentiel empirique local.

**Figure07** : **Variation** du paramètre de maille en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$

**Figure08**: Variation de l'énergie de gap  $E_{\Gamma-\Gamma}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .

**Figure09**: Variation de l'énergie de gap  $E_{\Gamma-X}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .

**Figure10**: Variation de l'énergie de gap  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .

**Figure11**: Variation des énergies de gap direct et indirect ( $E_{\Gamma-\Gamma}$   $E_{\Gamma-X}$   $E_{\Gamma-L}$ ) en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .

**Figure12**: Structures de bande du composé binaire GaSb en fonction de vecteur d'onde  $k$ .

**Figure13**: Structures de bande du composé binaire AlSb en fonction de vecteur d'onde  $k$ .

**Figure14**: structures de bande d'alliage  $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{Sb}$  en fonction de vecteur d'onde.

**Figure 15**: variation de masse effective du  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de composition  $x$  du l'aluminium.

**Figure 16**: variation de l'indice de réfraction  $n$  du  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de composition  $x$  du l'aluminium pour les six modèles.

**Figure 17** variation de la constante diélectrique  $\epsilon$  du  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de composition  $x$  du l'aluminium.

### Liste des tableaux :

**Tableau 01:** Extrait de la classification périodique des éléments.

**Tableau 02:** Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques des composés binaires GaSb et AlSb.

**Tableau 03:** Paramètres de réseaux des composés binaires GaSb et AlSb.

**Tableau04 :** Les Gaps d'énergies calculés pour les binaires GaSb et ALSb.

**Tableau05 :** Paramètres de réseau de l'alliage semi-conducteur  $Al_x Ga_{1-x} Sb$ .

**Tableau06:** les valeurs de l'indice de réfraction de GaSb, AlSb et  $Al_{0.6} Ga_{0.4} Sb$  comparés aux donnés théoriques.

**Tableau07:** les valeurs de la constante diélectrique de GaSb, AlSb et  $Al_{0.6} Ga_{0.4} Sb$  comparés aux donnés théoriques

# Introduction générale

## Introduction générale

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes IIIb et Vb de la classification périodique des éléments. Dans le but d'utiliser ces matériaux dans les composants électroniques et optoélectroniques nécessitent la connaissance de leurs propriétés physiques. A travers les méthodes technologiques. Les chercheurs ont pu préparer des alliages semi-conducteurs qui sont des mélanges de deux ou plusieurs éléments donnant naissances à composés binaires, ternaires, quaternaires et pen ternaires.

Les semi-conducteurs III-Sb ont attirés beaucoup d'attention pour leur application potentielle dans des dispositifs optiques infrarouges qui sont requises pour les systèmes de communication à fibres optiques, comme le laser à puits quantiques multiples à base de GaSb/AlGaSb et la photo détecteur GaInSb/InAs.

Devant l'impossibilité de résoudre l'équation de Schrödinger pour un système de  $n$  particules, on a recours à des méthodes d'approximation. Les méthodes de calcul des structures de bandes électroniques peuvent être classées en : méthodes empiriques, ab-initio et semi empiriques.

Notre travail présente l'investigation des propriétés Optoélectroniques de l'alliage ternaire semi-conducteur à savoir  $Al_x Ga_{1-x} Sb$  dans la phase Zinc-blende en utilisant la méthode des pseudos potentiels couplés à l'approximation du cristal virtuel.

Ce manuscrit est organisé en trois chapitres :

Des généralités sur les semi-conducteurs III-V à savoir les propriétés structurales, électroniques et optiques ainsi que la théorie du cristal virtuel appliquée aux alliages semi-conducteurs III-V, sont détaillés au premier chapitre. Le deuxième chapitre présente un rappel sur les lois de la mécanique quantique, en expliquant les propriétés électroniques des systèmes en interaction. Ainsi il décrit en détail la méthode des Pseudo potentiels Empirique. Le dernier 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.

# Chapitre I

**I.1.Introduction :**

L'importante croissance des semi-conducteurs au niveau mondial est liée au fait que ces matériaux forment la base de la révolution technologique de ces quarante dernières années dans le domaine de l'électronique qui, au sens large représente le marché mondial le plus important à l'heure actuelle en même temps que celui qui bénéficie de la croissance la plus rapide.

Par alliage, on entend un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux. Il fut un temps où le mot alliage était uniquement réservé aux métaux, pourtant cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux, notamment le céramique et les polymères.

Peu après le développement des techniques modernes de la croissance cristalline et la purification des semi-conducteurs, il a été réalisé plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires. L'utilisation de ces derniers dans les domaines de la microélectronique et l'optoélectronique a encouragé les chercheurs à développer la recherche théorique mais ainsi le côté expérimental.

**I.2.Définition :**

Un semi-conducteur est un matériau qui a les caractéristiques électriques d'un isolant, mais pour lequel la probabilité qu'un électron puisse contribuer à un courant électrique, quoique faible, est suffisamment importante. En d'autres termes, la conductivité électrique d'un semi-conducteur est intermédiaire entre celle des métaux et des isolants à proprement parler.

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes d'énergie. Selon celle-ci, un matériau semi-conducteur possède une bande interdite suffisamment petite pour que des électrons de la bande de valence puissent facilement rejoindre la bande de conduction. Si un potentiel électrique est appliqué à ses bornes, un faible courant électrique apparaît, provoqué à la fois par le déplacement de tels électrons et celui des « trous » qu'ils laissent dans la bande de valence.

La conductivité électrique des semi-conducteurs peut être contrôlée par dopage, en introduisant une petite quantité d'impuretés dans le matériau afin de produire un excès d'électrons ou un déficit. Des semi-conducteurs dopés différemment peuvent être mis en contact afin de créer des jonctions, permettant de contrôler la direction et la quantité de courant qui traverse l'ensemble.

Cette propriété est à la base du fonctionnement des composants de l'électronique moderne : diodes, transistors, etc.

### **I.3.les différents type de semi-conducteur :**

#### **I.3.1.Semi-conducteur intrinsèque :**

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsqu'il est pur : Il ne comporte aucune impureté et son comportement électrique ne dépend que de la structure du matériau.

Ce comportement correspond à un semi-conducteur parfait, c'est-à-dire sans défaut structurel ou impureté chimique. Un semi-conducteur réel n'est jamais parfaitement intrinsèque mais peut parfois en être proche comme le silicium monocristallin pur.

Dans un semi-conducteur intrinsèque, les porteurs de charge ne sont créés que par des défauts cristallins et par excitation thermique. Le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre de trous dans la bande de valence.

Ces semi-conducteurs ne conduisent pas, ou très peu, le courant, excepté si on les porte à haute température.

La formation des bandes interdites étant due à la régularité de la structure cristalline, toute perturbation de celle-ci tend à créer des états accessibles à l'intérieur de ces bandes interdites, rendant le gap plus « perméable ». Le dopage consiste à implanter des atomes correctement sélectionnés (nommés « impuretés ») à l'intérieur d'un semi-conducteur intrinsèque afin d'en contrôler les propriétés électriques.

La technique du dopage augmente la densité des porteurs à l'intérieur du matériau semi-conducteur. 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. Les matériaux ainsi dopés sont appelés semi-conducteurs extrinsèques.

#### **I.3.2.semi-conducteur extrinsèques :**

On peut modifier de façon considérable la concentration de porteurs de charge d'un semi-conducteur intrinsèque en lui ajoutant de faibles quantités d'atomes astucieusement choisis et que l'on appelle impuretés dopantes ou tout simplement dopants. On obtient alors un semi-conducteur extrinsèque ou dopé.

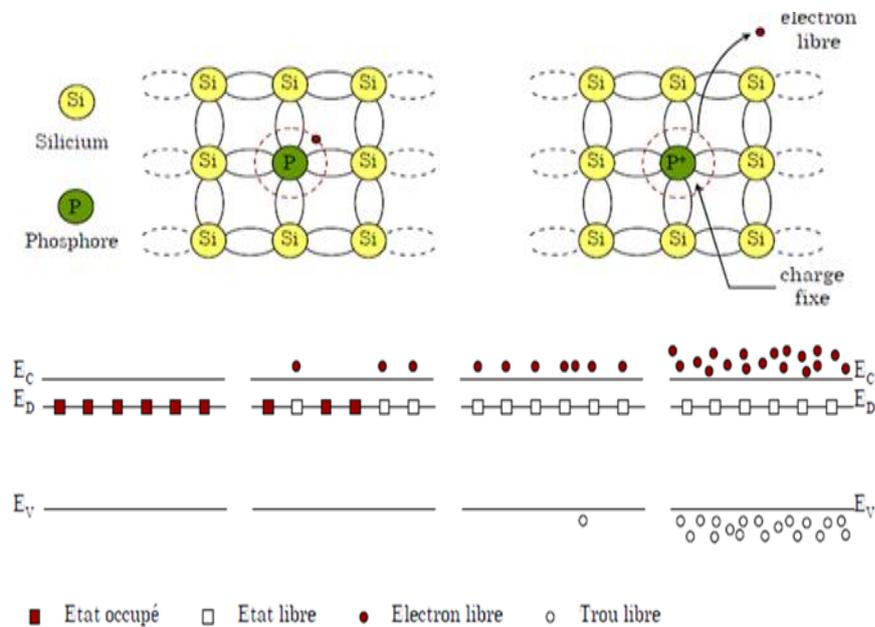
Selon la nature des atomes introduits, soit le nombre d'électrons devient très supérieur au nombre de trous et le semi-conducteur est appelé de type n, soit le nombre de trous devient très supérieur à celui des électrons et le semi-conducteur est appelé de type p.

**Semi-conducteurs extrinsèques type 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.

Par exemple, dans le cas du silicium (Si), les atomes de Si ont quatre électrons de valence, chacun étant lié à un atome Si voisin par une liaison covalente. Pour doper le silicium en N, on inclut un atome ayant cinq électrons de valence, comme ceux de la colonne V (VA) de la table périodique: le phosphore (P), l'arsenic (As) ou l'antimoine (Sb)...

Cet atome incorporé dans le réseau cristallin présentera quatre liaisons covalentes et un électron libre. Ce cinquième électron, qui n'est pas un électron de liaison, n'est que faiblement lié à l'atome et peut être facilement excité vers la bande de conduction. Aux températures ordinaires, quasiment tous ces électrons le sont. Comme l'excitation de ces électrons ne conduit pas à la formation de trous dans ce genre de matériau, le nombre d'électrons dépasse de loin le nombre de trous. Les électrons sont des porteurs majoritaires et les trous des porteurs minoritaires. Et parce que les atomes à cinq électrons ont un électron supplémentaire à « donner », ils sont appelés atomes donneurs.



**Figure01 : Silicium dopé au Phosphore**

### Semi-conducteurs extrinsèques type P

Le dopage de type P consiste à augmenter la densité en trous dans le semi-conducteur intrinsèque. Pour ce faire, on inclut un certain nombre d'atomes pauvres en électrons dans le semi-conducteur afin de créer un excès de trous. Dans l'exemple du silicium, on inclura un atome trivalent (colonne III du tableau périodique), généralement un atome de bore. Cet atome n'ayant que trois électrons de valence, il ne peut créer que trois liaisons covalentes avec ses quatre voisins créant ainsi un trou dans la structure, trou qui pourra être rempli par un électron donné par un atome de silicium voisin, déplaçant ainsi le trou. Quand le dopage est suffisant, le nombre de trous dépasse de loin le nombre d'électrons. Les trous sont alors des porteurs majoritaires et les électrons des porteurs minoritaires.

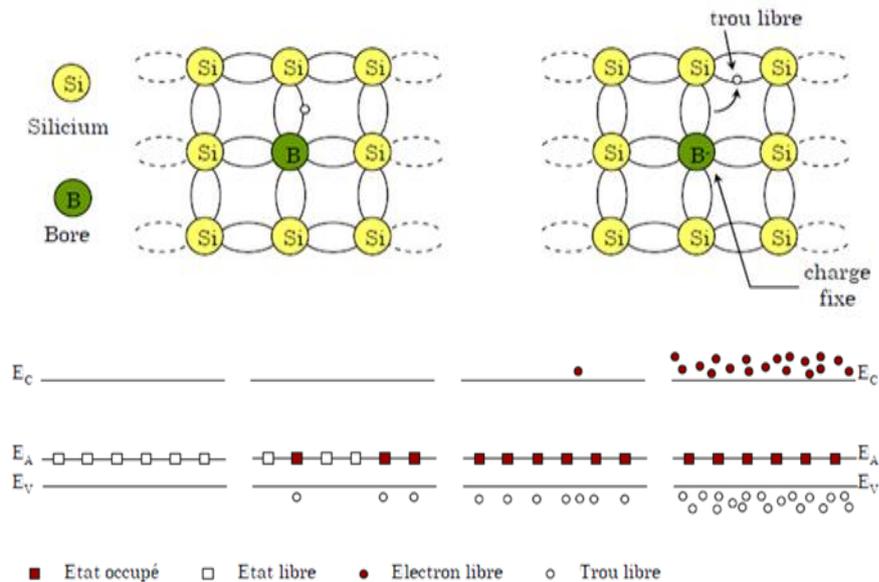


Figure02 : Silicium dopé au Bore

## I.4. Propriétés des semi-conducteurs :

### I.4.1. Propriétés Electroniques :

#### I.4.1.1. Gap direct et Gap indirect :

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

Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de  $\vec{k}$  : on dit que le semi-conducteur est à gap direct. Si au contraire, ce maximum et ce minimum

correspondent à des valeurs de  $\vec{k}$  différentes : on dit que le semi-conducteur est à gap indirect, c'est le cas du silicium et du germanium. Cette distinction entre matériaux semi-conducteurs à gap direct ou indirect est importante, particulièrement pour les applications optoélectroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons.

En effet, lors de la transition d'un électron de la BV vers la BC ou de la recombinaison Electron trou, il faut conserver l'énergie (relation scalaire) et l'impulsion (relation vectorielle).

La transition d'énergie minimale entre ces deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect. Cette différence oriente le choix des matériaux pour les applications optoélectroniques.

#### **I.4.1.2. Transitions inter bandes :**

Au sein d'un semi-conducteur on différencie les transitions radiatives de celles qui sont non radiatives. Les transitions radiatives dites inter-bande sont à leur tour classifiées selon la configuration des bandes du semi-conducteur en transitions directes et indirectes (avec intervention d'un phonon) [1] :

##### **✓ les transitions directes ou verticales :**

Dans le processus d'absorption directe, un photon est absorbé par le cristal avec création d'un électron et d'un trou. Comme le minimum de la bande de conduction est à la même valeur de  $\vec{k}$  que le maximum de la bande de valence (figure 3), la transition optique a lieu sans changement significatif de, car le photon absorbé a un très petit vecteur d'onde.

##### **✓ les transitions indirectes :**

Dans le processus d'absorption indirecte la largeur minimale de la bande interdite fait intervenir des électrons et des trous séparés par un vecteur d'onde non négligeable.

Dans ce cas une transition directe correspondant à la largeur minimale de la bande interdite ne peut satisfaire à la condition de conservation du vecteur d'onde  $\vec{k}$  ce processus fait intervenir en plus de l'électron et du photon, un phonon.

L'énergie du phonon est, en général, bien inférieure à  $E_g$  (0,01 à 0,03 eV). Dans ce processus d'absorption, un photon est absorbé avec création de trois particules : un électron, un trou et un phonon ; ce type de processus est moins probable que celui de l'absorption directe.

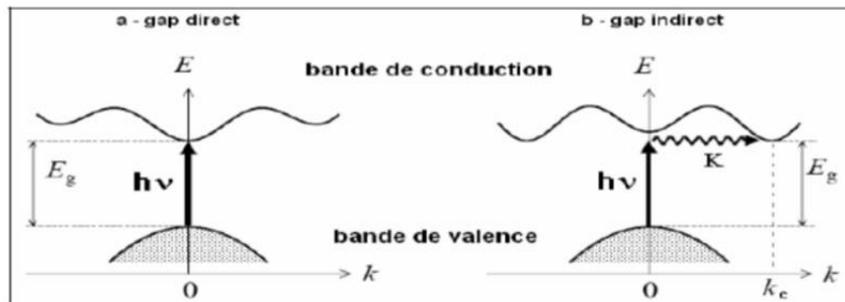


Figure03: Transitions inter bandes a) directe b) indirecte

#### I.4.1.3. Masse effective :

Un électron dans un état de bande est bien décrit, dans son comportement dynamique, par une masse effective  $m^*$ , c'est une propriété importante pour l'étude des phénomènes transport dans les solides. Elle est obtenue directement de la structure de bande du matériau

L'approximation la plus simple, correspond à la dépendance parabolique de  $E(k)$ , pour les semi-conducteurs du type III – V au voisinage du minimum de la bande de conduction au point  $\Gamma(k = 0)$ , la bande de conduction est parabolique et isotopique. La masse effective devient une quantité scalaire et indépendante de la direction.

L'inverse de la masse effective  $\frac{1}{m^*}$  est donc proportionnel à la deuxième dérivée de l'énergie  $E(k)$  par rapport aux composantes du vecteur d'onde  $k = (k_x, k_y, k_z)$ .

Elle est de la forme :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi^2 \delta^2 E(k)}{h^2 \delta k^2} \dots \dots \dots \text{I. 1}$$

#### I.4.2. Propriétés Optiques :

##### I.4.2.1. L'indice de réfraction :

La connaissance du gap d'énergie nous a permis de calculer l'indice de réfraction suivant plusieurs modèles qui ont été envisagées pour apporter le gap énergétique du semi-conducteur à leur indice de réfraction.

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes lasers à hétérojonction, les amplificateurs optiques et les fibres optiques [2].

L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau à posséder pour ralentir et à dévier la lumière. Cet indice de réfraction (noté  $n$ ) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ( $c=299\ 792\ \text{km/s}$ ) et la vitesse de la lumière dans le matériau, on peut exprimer l'indice de réfraction sous une forme complexe comme suite [3] :

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \dots \dots \dots \text{I.2}$$

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

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

L'indice de réfraction  $n$  est calculé selon différents modèles :

1-Modèle de Ravindra et Srivastava [A], basé sur la formule de Moss:

$$n^4 E_g = 108 \dots \dots \dots \text{I.3}$$

2-Modèle de Gupta et Ravindra:

$$n = 4.084 - 0.62 E_g \dots \dots \dots \text{I.4}$$

3-Modèle d'Hervé et Vandamme, l'expression empirique:

$$n = \left[ 1 + \left( \frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2 \right]^{1/2} \dots \dots \dots \text{I.5}$$

4-Modèle de Reddy et Anjaneyulu:

$$E_g e^n = 36.3 \dots \dots \dots \text{I.6}$$

5-The Ravindra relation:

$$n = 4.16 - 0.85 E_g \dots \dots \dots \text{I.7}$$

6- The Reddy and Ahammed empirical relation:

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154 \dots \dots \dots \text{I.8}$$

#### I.4.2.1.La réflectivité :

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

Pour une incidence normale du rayonnement sur la surface d'un solide le coefficient de réflexion s'écrit [4] :

$$R = \left| \frac{N - 1}{N + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \dots \dots \dots \text{I.9}$$

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

$$R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \dots \dots \dots I. 10$$

### I.5.structure cristalline :

#### I.5.2.Structure Zinc Blende :

La plupart des matériaux semi-conducteurs binaire III-V et quelques matériaux II-VI ont une structure Zinc-Blende (ZB). En effet dans cette phase, la maille primitive comporte deux atomes, un cation d'un élément III et un anion d'un élément V en occupant les positions  $(0,0,0)$  et  $(1/4,1/4,1/4)$  respectivement Cette structure est constituée de deux sous réseaux cubique faces centrée (cfc). La première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre tronqué (Figure 4 ,1).

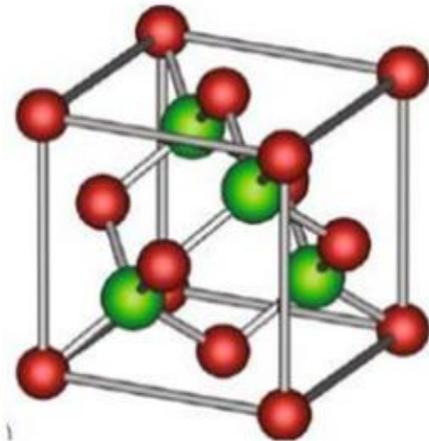


Figure04: structure zinc blende (zb)

### I.6.semi-conducteurs III-V :

Les semi-conducteurs III-V sont des composés formés par les éléments des groupes III et V du tableau périodique, dont les propriétés sont généralement similaires à celles des semi-conducteurs du groupe II-VI et IV. En raison du transfert de charge électronique de l'atome du groupe III à celui du groupe V.

L'interaction de Coulomb entre les ions augmente en même temps que la largeur du gap fondamental. Ainsi, la plupart des semi-conducteur III-V se caractérisent par une bande interdite (gap énergétique) supérieure à 1eV. Les semi-conducteurs III-V à large bande interdite sont adaptés pour des applications telles que les diodes lasers opérant dans la région

visible du spectre, ceux à petite bande interdite sont utilisés dans la fabrication de détecteurs infrarouges [5].

### I.6.1.Définition :

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III<sup>ème</sup> colonne et d'un élément de la V<sup>ème</sup> colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau I.2 regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés [6].

On peut obtenir un semi-conducteur si la somme des électrons des deux espèces est égale à 8 électrons [7].

Tableau 01 : Extrait de la classification périodique des éléments.

III	IV	V
$10.81 \overset{5}{B}$	$12.01 \overset{6}{C}$	$14.01 \overset{7}{N}$
$26.98 \overset{13}{Al}$	$28.09 \overset{14}{Si}$	$30.97 \overset{15}{P}$
$69.74 \overset{31}{Ga}$	$72.59 \overset{32}{Ge}$	$74.92 \overset{33}{As}$
$114.82 \overset{49}{In}$	$118.69 \overset{50}{Sn}$	$121.51 \overset{51}{Sb}$

### I.6.2.Les avantages des semi-conducteurs III-V :

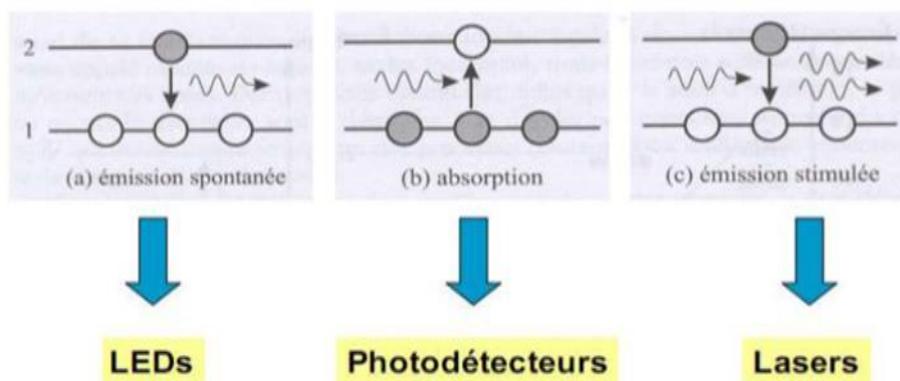
Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants :

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

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium [8].

### I.7. Les applications optoélectroniques :

Les matériaux semi-conducteurs interviennent dans la construction de détecteurs de rayonnement lumineux et de sources de radiation spontanée ou stimulée, la figure 7.1 ci-dessous montre les trois phénomènes ainsi que leurs domaines d'applications [9].



**Figure05:** Les propriétés optiques des semi-conducteurs et leurs applications.

On peut citer plusieurs dispositifs mettant à profit ce phénomène tels que les détecteurs UV, détecteurs photovoltaïques et bien sûr, il y en a plusieurs qu'on ne peut énumérer dans ce contexte.

### I.8. Conclusion :

L'utilisation des matériaux composés apporte de nombreux avantages en termes de propriétés des matériaux. En effet, le but de leur fabrication est de profiter des bonnes propriétés de chaque matériau afin d'en former un qui sera mieux adapté à certaines applications. La combinaison de deux matériaux ou plus, permet donc d'améliorer les propriétés d'un matériau, est cela a fait l'objet de plusieurs étude et l'intérêt de plusieurs chercheurs.

# Chapitre II

### II.1.Introduction :

Les propriétés physiques des matériaux sont rarement décrites avec exactitude cause de la complexité que présenté ces systèmes a plusieurs particules. En effet, la résolution de ces problèmes dit ‘a N corps’, doit inévitablement avoir recours à des approximations, non seulement pour simplifier les calculs mais aussi pour bonne représentation de ce système très compliqué.

### II.2. Equation de Schrödinger d’un solide cristallin :

L’équation de Schrödinger est l’équation de base de la physique théorique des solides, qui a proposé En 1926 par les idées de L. De Broglie, Erwin Schrödinger.

Elle permet de trouver les énergies et les fonctions d’onde associées aux régimes stationnaires d’un système donné.

En théorie quantique, un système constitué d'un ensemble de particules (électrons et noyaux) est décrit par la fonction d’onde  $\psi$ , qui satisfait à l’équation de Schrödinger indépendante du temps suivante :

$$\hat{H}\psi = E\psi \dots \dots \dots II.1$$

Où  $\hat{H}$  est l'opérateur Hamiltonien du système, dont les valeurs propres E désignent les valeurs de l'observable énergie totale. Pour un système constitué de Ne électrons en interaction de coordonnées d’espace  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{Ne}$  plus  $N_n$  noyaux de charge Z, de coordonnées d'espace  $\vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots \vec{R}_{R_N}$  [10].

L'opérateur Hamiltonien H s'écrit comme :

$$\hat{H} = \hat{\Gamma}_e + \hat{\Gamma}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn} \dots \dots \dots II.2$$

Avec :

L'énergie cinétique des électrons :

$$\hat{\Gamma}_e = \sum_{i=1}^{Ne} \hat{\Gamma}_i = \sum_{i=1}^{Ne} \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \dots \dots \dots II.3$$

Où :

$N_e$  : Nombre total des électrons.

$m$  : Masse de l'électron.

L'énergie cinétique des noyaux :

$$\widehat{\Gamma}_n = \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} \widehat{\Gamma}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta i \dots \dots \dots II.4$$

Où :

$N_\alpha$ : Nombre total des noyaux.

$m$  : Masse du noyau.

L'énergie d'interaction entre un électron  $i$  et électron  $j$  :

$$\widehat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \widehat{V}_{ij} \dots \dots \dots II.5$$

L'énergie d'interaction entre un noyau  $\alpha$  et un noyau  $\beta$  :

$$\widehat{V}_{nn} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{R_\alpha - R_\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \widehat{V}_{\alpha\beta} \dots \dots \dots II.6$$

Où :

$Z_\alpha, Z_\beta$ : Charges des noyaux  $\alpha$  et  $\beta$ .

L'énergie d'interaction entre un noyau  $\alpha$  et un électron  $i$  :

$$\widehat{V}_{en} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|\vec{r}_i - R_\alpha|} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \widehat{V}_{i\alpha} \dots \dots \dots II.7$$

En introduisant les équations II.3, II.4, II.5, II.6 et II.7 dans l'équation II.1, l'Hamiltonien aura la forme suivante :

$$(\hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_e + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn})\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots) \dots \dots \dots II. 8$$

Dans l'expression de l'Hamiltonien du système, les mouvements des électrons et des noyaux sont couplés et leurs coordonnées respectives ne peuvent pas être traitées séparément. Le problème est celui d'un système à (Ne+Nn). Corps en interaction, dont la résolution analytique et rigoureuse de l'équation de Schrödinger correspondante est impossible, d'où le recours à quelques approximations [11].

### II.3 Approximations :

#### II.3.1 Approximation de Born-Oppenheimer :

Elle consiste à découpler le mouvement des noyaux de celui des électrons, ce qui est justifiée par le fait que la masse des noyaux est bien supérieure à celle des électrons.

Compte tenu de ce que  $\hat{T}_n = 0$  et  $\hat{V}_{nn} = 0$ , nous pouvons définir une fonction d'onde  $\psi_e$  comme fonction d'onde des électrons, et un nouveau hamiltonien, c'est l'hamiltonien des électrons qui est donnée par :

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} \dots \dots \dots II. 9$$

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

$$\hat{H}_e\psi_e = E_e\psi_e \dots \dots \dots II. 10$$

Cette approximation ne suffit cependant pas à elle seule à résoudre l'équation de Schrödinger, à cause de la complexité des interactions électron-électron. C'est pourquoi elle est très souvent couplée à l'approximation de Hartree [12].

#### II.3.2 Approximation de Hartree :

Cette approximation dite de champ moyen, permet de ramener le problème d'interaction N corps, consiste à substituer le système à Ne électrons en interaction par un système à Ne

électrons indépendants, où chaque électron évolue dans le potentiel effectif généré par les noyaux et les autres électrons (champ moyen). La fonction d'onde électronique du système est alors le produit direct des fonctions d'ondes mono-électroniques :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_n) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_n(\vec{r}_n) \dots \dots \dots II. 11$$

$\vec{r}_i$  : Position des électrons  $i$  avec  $i=1 \dots n$ .

Le problème de la résolution de l'équation de Schrödinger d'un système à  $N_e$  électrons est réduit à celui de la résolution l'équation de Schrödinger à un seul électron :

$$\hat{H}_i \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}) \dots \dots \dots II. 12$$

Avec :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{ext}(\vec{r}) + V_i(\vec{r}) \dots \dots \dots II. 13$$

Où :

$V_{ext}(\vec{r})$  : Potentiel d'interaction électron-noyau.

$V_i(\vec{r})$  : Potentiel de Hartree pour le  $i^{\text{ème}}$  électron, qui a la forme :

$$V_i(\vec{r}) = \frac{-e \int \rho_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' \dots \dots \dots II. 14$$

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

$$\rho_i(\vec{r}) = -e \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} |\psi_j(\vec{r})|^2 \dots \dots \dots II. 15$$

La somme est faite sur les  $N_e$  états mono-électroniques.

L'équation de Schrödinger aura la forme :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} \int \frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' + \hat{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II.16}$$

L'équation II.16 est appelée équation à une particule de Hartree. L'inconvénient de cette méthode, c'est qu'elle ne tient pas compte de l'antisymétrie de la fonction d'onde [13].

#### II.4 Méthodes des pseudos potentiels :

La méthode du pseudo potentiel est utilisée pour calculer les énergies  $E_n(\mathbf{k})$  et d'autres propriétés des semi-conducteurs, basée principalement sur des données expérimentales telles que l'analyse des paramètres cristallins au rayon X, la réflexion et l'absorption des cristaux [14].

Le venu majeur de cette approche est seulement les électrons de valence qui sont considérés, les électrons du cœur sont supposés figés dans la configuration atomique et les électrons de valence se meuvent dans un potentiel périodique d'un seul électron. Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres (N.F.E.M) pour résoudre l'équation de Schrödinger.

##### II.4.1 Formalisme mathématique

La méthode du pseudo potentiel est une extension de la méthode des ondes planes orthogonalité (O.P.W), Cette dernière approche permet de présenter la fonction d'onde d'un électron de valence par la somme d'une onde plane et les états atomiques occupés du cœur.

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \varphi_k^V(\mathbf{r}) + \sum_C \mu_C \varphi_k^C(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II.17}$$

La contrainte d'orthogonalité entre le cœur et la fonction d'onde est défini quant à elle par :

$$\langle \varphi_k^C | \psi_k(\mathbf{r}) \rangle = 0 \dots \dots \dots \text{II.18}$$

La constante  $\mu_C$  de l'équation II.17 est calculée par la condition d'orthogonalité.

$$\mu_C = -\langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle = - \int \varphi_k^{C*} e^{ikr} d^3r \dots \dots \dots \text{II.19}$$

On remplace  $\mu_C$ , et on obtient :

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \varphi_k^V(\mathbf{r}) - \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II.20}$$

La fonction  $\psi_k(\mathbf{r})$  est solution de l'équation de Schrödinger.

$$\hat{H}_{PK} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II.21}$$

Où :

$\hat{H}_{PK}$  : Hamiltonien de Phillips-Kleinman dont l'expression sera explicitée plus loin.

En remplaçant l'équation **II.20** dans l'équation **II.21**:

$$\hat{H}_{PK} \varphi_k^V(\mathbf{r}) - \hat{H}_{PK} \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) = E_k \left[ \varphi_k^V(\mathbf{r}) - \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) \right] \dots \dots \dots \text{II.22}$$

Si on applique l'Hamiltonien  $\hat{H}_{PK}$  sur une fonction de valence et une fonction de cœur, on peut écrire les équations aux valeurs propres suivantes :

$$\hat{H}_{PK} | \varphi_k^V(\mathbf{r}) \rangle = E_V | \varphi_k^V(\mathbf{r}) \rangle \dots \dots \dots \text{II.23}$$

$$\hat{H}_{PK} | \varphi_k^C(\mathbf{r}) \rangle = E_C | \varphi_k^C(\mathbf{r}) \rangle \dots \dots \dots \text{II.24}$$

Où :

$E_V$  et  $E_C$  sont les énergies de valence et de cœur respectivement.

Ainsi, il en découle que :

$$\hat{H}_{PK} \varphi_k^V(\mathbf{r}) - E_k \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) = E_k \varphi_k^V(\mathbf{r}) - E_k \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II.25}$$

$$\hat{H}_{PK} \varphi_k^V(\mathbf{r}) - \sum_C E_k^C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) + \sum_C E_k \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) = E_k \varphi_k^V(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II.26}$$

$$\hat{H}_{PK}\varphi_k^V(\mathbf{r}) + \sum_C (E_k - E_k^C) \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) = E_k \varphi_k^V(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II. 27}$$

On pose :

$$\sum_C (E_k - E_k^C) \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(\mathbf{r}) = V_R \varphi_k^V(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II. 28}$$

Où :

$V_R$ : Potentiel répulsif positif.

$$\hat{H}_{PK}\varphi_k^V(\mathbf{r}) + V_R \varphi_k^V(\mathbf{r}) = E_k \varphi_k^V(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II.29}$$

Ainsi l'équation II.28 aura la forme :

$$(\hat{H}_{PK} + V_R)\varphi_k^V(\mathbf{r}) = E_k \varphi_k^V(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II. 30}$$

Avec :

$$\hat{H}_{PK} = -\frac{\mathbf{p}^2}{2\mathbf{m}} + V_C \dots \dots \dots \text{II. 31}$$

Où :

$V_C$ : Potentiel attractif du cœur.

$$\left( -\frac{\mathbf{p}^2}{2\mathbf{m}} + V_C(\mathbf{r}) + V_R(\mathbf{r}) \right) \varphi_k^V(\mathbf{r}) = E_k \varphi_k^V(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II. 32}$$

On pose  $V_{PS}(\mathbf{r}) = V_C + V_R$  qui représente le pseudopotentiel, l'équation **II.32** sera reformulée de la manière suivante :

$$\left[ -\frac{\mathbf{p}^2}{2\mathbf{m}} + V_{PS}(\mathbf{r}) \right] \varphi_k^V(\mathbf{r}) = E_k \varphi_k^V(\mathbf{r}) \dots \dots \dots \text{II. 33}$$

En posant  $V_{PS}(\mathbf{r}) = V_C + V_R$ , comme étant la somme du potentiel ionique du cœur  $V_C$  et du potentiel répulsif positif  $V_R$ , cette sommation des deux quantités l'une positive et l'autre

négative nous donne un faible potentiel d'où l'appellation du pseudo potentiel, cette approche réduit au maximum les calculs en outils informatique.

La résolution de l'équation de Schrödinger, sera traitée par la méthode des électrons presque libres, du fait que le pseudo potentiel  $V_{PS}(r)$  sera considéré comme une perturbation du système[15].

### II.5. La méthode empirique du pseudo potentiel local

Cette approximation a été largement utilisée depuis son introduction par Chelikowsky et Cohen.

L'E.P.M résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux  $V(G)$  du pseudo potentiel  $V_{PS}(r)$  qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques.

Les paramètres du pseudo potentiel  $V^S(G)$  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)[16].

$$V_{PS}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}, \boldsymbol{\tau}} V_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}) \dots \dots \dots II. 34$$

Où :

$\mathbf{R}$  : est un vecteur du réseau direct.

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

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

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\alpha}(\mathbf{G}) S(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \dots \dots \dots II. 35$$

$S(\mathbf{G})$  : est le facteur de structure.

$V(\mathbf{G})$  : est le facteur de forme.

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

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

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{PS}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{r}) \dots \dots \dots II. 35$$

Où :

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

$V_{\text{PS}}$  : est le pseudo potentiel périodique.

$\psi_{\mathbf{k}}$  : 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 semi-conducteurs de type diamant ou zinc blende :

$$V(\mathbf{G}) = V^s(\mathbf{G}) \cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) + iV^A(\mathbf{G}) \sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) \dots \dots \dots II. 36$$

Où :

$$V^s(\mathbf{G}) = \frac{1}{2} [V_A(\mathbf{G}) + V_B(\mathbf{G})] \dots \dots \dots II. 37$$

$$V^A(\mathbf{G}) = \frac{1}{2} [V_A(\mathbf{G}) - V_B(\mathbf{G})] \dots \dots \dots II. 38$$

Où :

$$\boldsymbol{\tau} = \pm \frac{1}{8(1, 1, 1)a} \dots \dots \dots II. 39$$

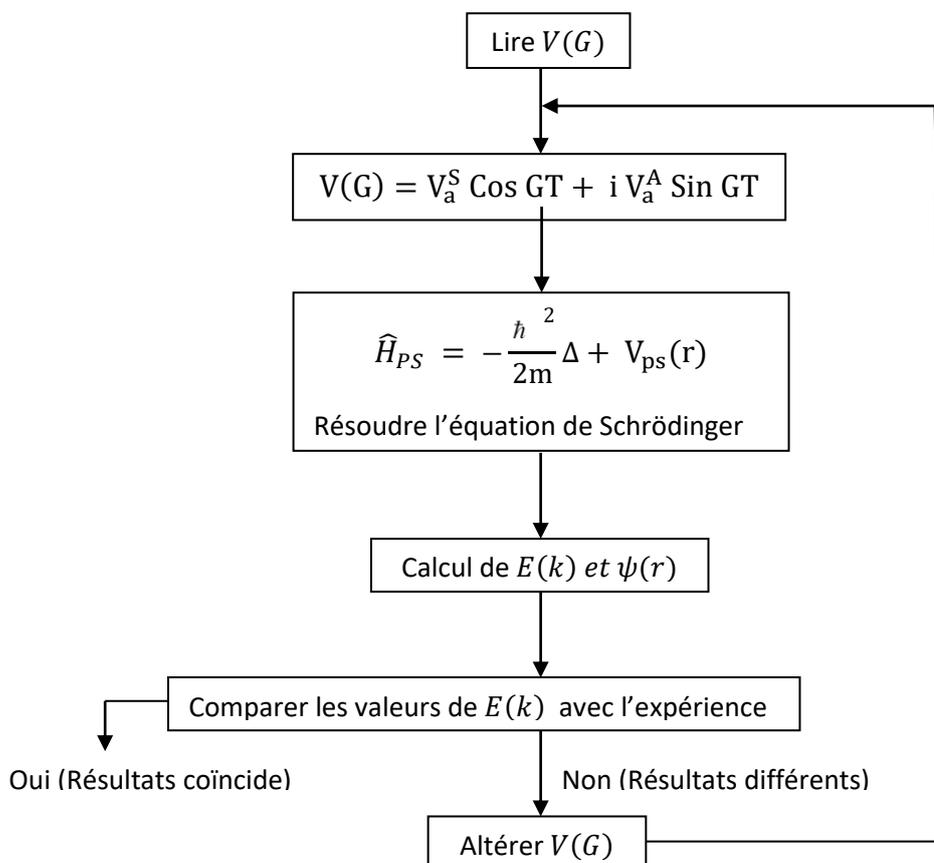
$a$  : est la constante du réseau.

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

Le procédé de calcul de l'E.P.M comme le montre le diagramme suivant est : choisi  $V(G)$ . La structure est incluse par le facteur de structure et l'équation de Schrödinger est résolu pour les valeurs propres  $E(k)$  d'énergie et les pseudos fonctions d'ondes  $\psi_k(r)$  Ces énergies sont comparées avec l'expérience et  $V(G)$  est altéré si on n'obtient pas un bon accord entre l'expérience et la théorie. Le procédé est répété jusqu'à l'obtention d'un bon accord entre l'expérience et la théorie [17].

Généralement un petit nombre d'itération suffit pour concorder entre la théorie et l'expérience.

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



**Figure06** : L'approche du pseudo potentiel empirique local.[18]

**II.6.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.

# Chapitre III

### III.1.Introduction :

Dans notre travail on étudie les propriétés optoélectroniques de l'alliage ternaire semi-conducteur  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en utilisant la Méthode Empirique des Pseudo potentiels (E.P.M) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA), sans tenir compte de l'effet du désordre

Nous nous intéressons à l'étude du gap d'énergie, la structure des bandes en fonction de vecteur d'onde  $k$ , la masse effective, l'indice de réfraction et la constante diélectrique approprié ainsi que leurs variations en fonction de la composition  $x$  de l'alliage ternaire semi-conducteur  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .

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

Au cours des cinquante dernières années, il existe des intérêts considérables dans les composés semi-conducteurs III-de zinc blende, car ils présentent des propriétés optiques et électriques prometteuses. Parmi lesquelles les Antimoniures- III (*BSb, AlSb, GaSb et InSb*). Ces composés ont une importance technologique dans les dispositifs électroniques et optiques à haute température.

#### III.2.1.les propriétés électroniques :

La nature empirique de la méthode des pseudos potentiels 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 ou les paramètres pseudo potentiels ajustés des matériaux semi-conducteurs GaSb et ALSb ainsi que les paramètres de réseau sont illustrés dans le Tableau02 ci-dessous :

Tableau 02: Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques des composés binaires GaSb et ALSb

Composants	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(8)$	$V_A(11)$
<b>GaSb</b>	0.191206	0.005	0.043533	0.045340	0.03	0.00
<b>AlSb</b>	0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	0.004544

Le Tableau 03 présente les Paramètres de réseaux des composés binaires **GaSb** et **ALSb**

**Tableau 03:** Paramètres de réseaux des composés binaires **GaSb** et **ALSb**

Composé binaire	Paramètre du réseau (Å)
<b>GaSb</b>	6.118
<b>ALSb</b>	6.1355

En utilisant les facteurs de forme, nous avons trouvé des gaps énergétiques des composés binaires GaSb et ALSb aux points de haute symétrie  $\Gamma$ , X et L, qui sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et qui sont illustrés dans le Tableau04.

**Tableau04 :** Les Gaps d'énergies calculés pour les binaires GaSb et ALSb

Composé binaire	Gap d'énergie (eV)					
	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$		$E_{\Gamma}^X$		$E_{\Gamma}^L$	
	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp
<b>GaSb</b>	0.716 <sup>a</sup>	0.725 <sup>b</sup>	1.016 <sup>a</sup>	1.03 <sup>b</sup>	0.780 <sup>a</sup>	0.701 <sup>b</sup>
<b>ALSb</b>	2.301 <sup>a</sup>	2.30 <sup>c</sup>	1.619 <sup>a</sup>	1.615 <sup>c</sup>	2.213 <sup>a</sup>	2.211 <sup>c</sup>

<sup>a</sup> Notre travail

<sup>b,c</sup> Reference [S. Adachi, « Properties of Group-IV, III–V, and II–VI Semiconductors », Ed Wiley, New york, (2005).]

### III.2.1.1. Paramètre de réseau :

Ces nouveaux matériaux couvrent une large gamme de longueur d'onde. Le paramètre de réseau de l'alliage semi-conducteur  $Al_x Ga_{1-x} Sb$ , 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 Tableau05.

**Tableau05** : Paramètres de réseau de l'alliage semi-conducteur  $Al_x Ga_{1-x} Sb$ .

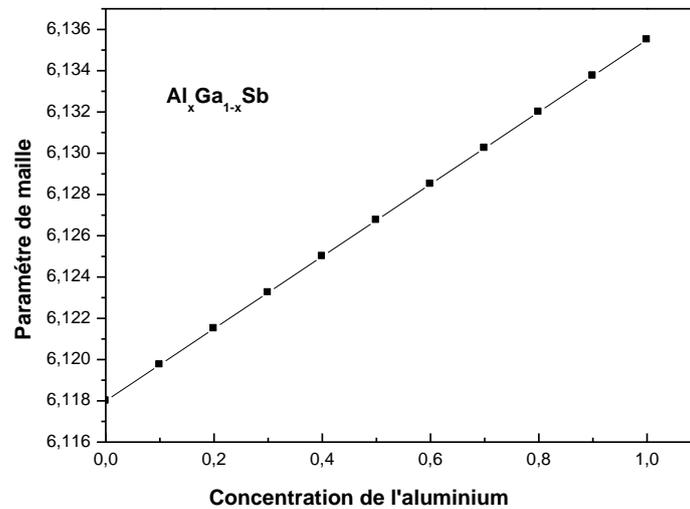
x	a(A°)
0	6.118
0.1	6.11975
0.2	6.1215
0.3	6.12325
0.4	6.125
0.5	6.12675
0.6	6.1285
0.7	6.13025
0.8	6.132
0.9	6.13375
1	6.1355

Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques des alliages ternaires  $Al_x Ga_{1-x} Sb$  sont donnés par la relation :

$$V_{alloy} = (1 - x)V_{GaSb}(G) + xV_{AlSb}(G) - p[x(1 - x)]^{\frac{1}{2}}(V_{AlSb}(G) - V_{GaSb}(G)) \dots \dots \text{III. 1}$$

**Avec p** : Paramètre ajustable qui simule l'effet de désordre, dans notre cas, il est supposé nul.

La Figure 07 montre la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $Al_x Ga_{1-x} Sb$  calculé en utilisant la VCA sans désordre.



**Figure07 :** Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}Sb$

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

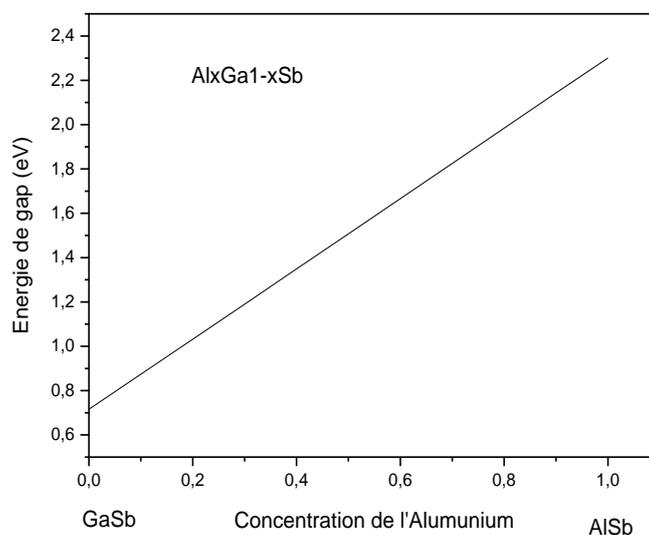
$$A_{Al_xGa_{1-x}Sb} = 1.03736 * 10^{-15}x^{-2} + 0.0175x + 6.118 \dots \dots \dots \text{III.2}$$

On remarque que la variation du paramètre de maille croît d'une façon monotone et linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium et ceci confirmé par l'équation III.2.

#### III.2.1.1.1. Gap énergétique :

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 sans tenir compte de l'effet du désordre.

La Figure06 montre la variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma-\Gamma}$  en fonction de la composition  $x$  calculé en utilisant la VCA sans désordre.



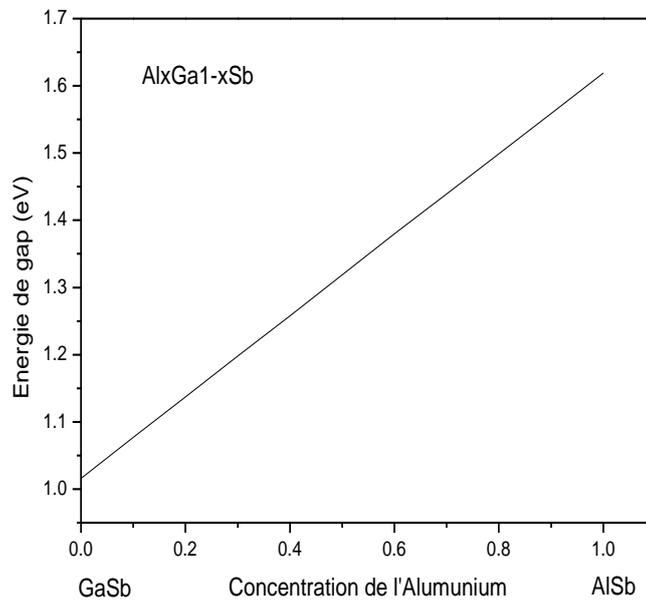
**Figure08 :** Variation de l'énergie de gap  $E_{\Gamma-\Gamma}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}Sb$

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

$$E_{\Gamma-\Gamma} = 0.054x^2 + 1.58x + 0.716 \dots \dots \dots \text{III. 3}$$

On observe que la variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  augmente d'une façon monotone et linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium et ceci confirmé par l'équation III.3.

La Figure 08 montre la variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma-X}$  en fonction de la composition  $x$  calculé en utilisant la VCA sans désordre.



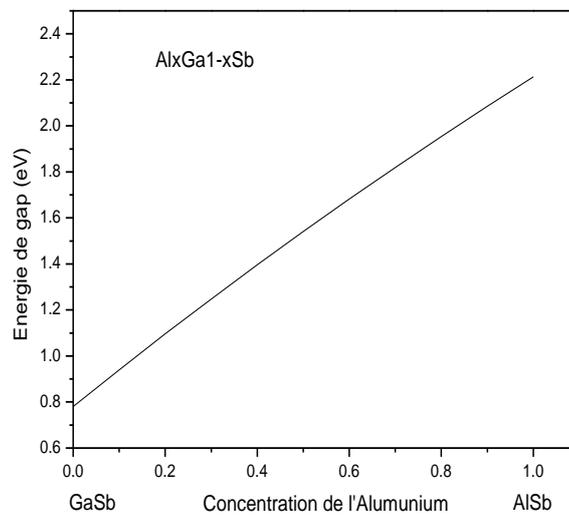
**Figure09 :** Variation de l'énergie de gap  $E_{\Gamma-x}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}Sb$

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

$$E_{\Gamma-x} = 0.00571x^2 + 0.6087x + 1.01592 \dots \dots \dots \text{III. 4}$$

La variation de l'énergie du gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  augmente d'une façon monotone et linéaire en fonction de la concentration de l'Aluminium et ceci confirmé par l'équation III.3.

La Figure 10 montres la variation du gap d'énergie  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la composition x calculé en utilisant la VCA sans désordre.



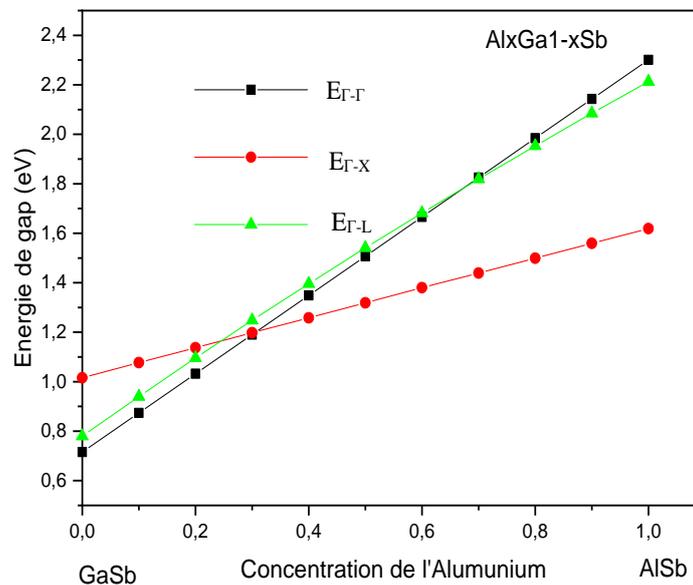
**Figure10 :** Variation de l'énergie de gap  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}Sb$

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

$$E_{\Gamma-L} = -0.1796x^2 + 1.6082x + 0.780 \dots \dots \dots \text{III. 5}$$

On remarque que si on augmente la concentration de l'aluminium, l'énergie de gap augmente d'une façon monotone et linéaire, et ceci confirmé par l'équation III.5.

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 précédentes sur la même Figure 11 qui représente 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'aluminium, 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 11 :** Variation des énergies de gap direct et indirect ( $E_{\Gamma-\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma-X}$ ,  $E_{\Gamma-L}$ ) en fonction de la concentration de l'aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}Sb$

On remarque sur la Figure 11 qu'une transition de gap apparaît clairement. Dans l'intervalle compris entre  $x=0$  et  $x=0,3$ , le gap est direct, au-delà de cette valeur on repère un changement de gap qui devient indirect.

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

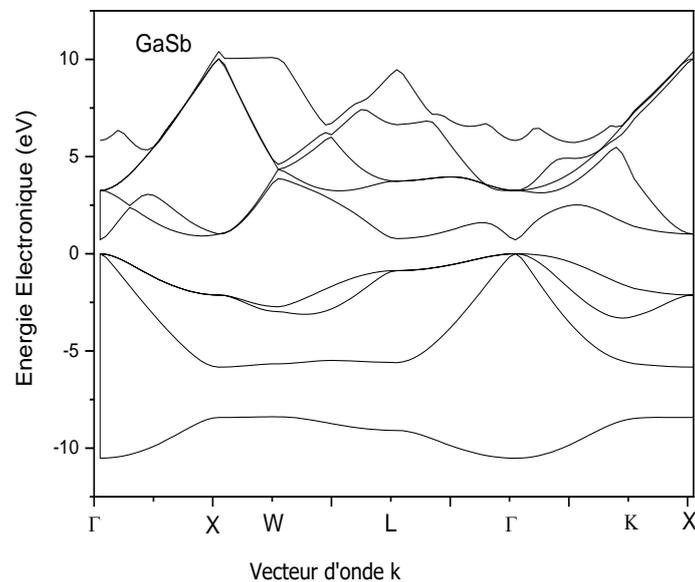
Les propriétés électroniques des matériaux semi-conducteurs sont importantes pour le développement de futurs dispositifs électroniques et optoélectroniques.

On trace la structure de bandes d'énergies de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}Sb$  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) sans tenir compte du désordre.

Les figures. (12-13) représentent les structures de bandes d'énergies des composés binaires  $GaSb$  et  $AlSb$  respectivement. La structure de bande de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}Sb$  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  $Al_{0,6}Ga_{0,4}Sb$  est représentée dans la figure 14.

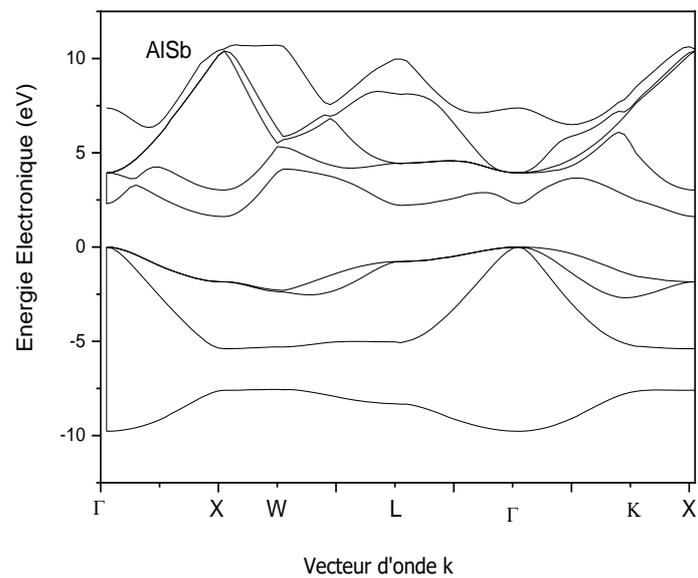
Pour l'interprétation des figures qui illustrent les structures de bandes des alliages binaires *GaSb* et *AlSb* respectivement, on note que la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence.

Dans la Figure 12 on constate que le maximum de la bande de valence est au point  $\Gamma$  et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point  $\Gamma$ , d'où le composé binaire *GaSb* est un semiconducteur à bande interdite directe, l'écart relevé entre le minimum et le maximum vaut 0.716 eV.



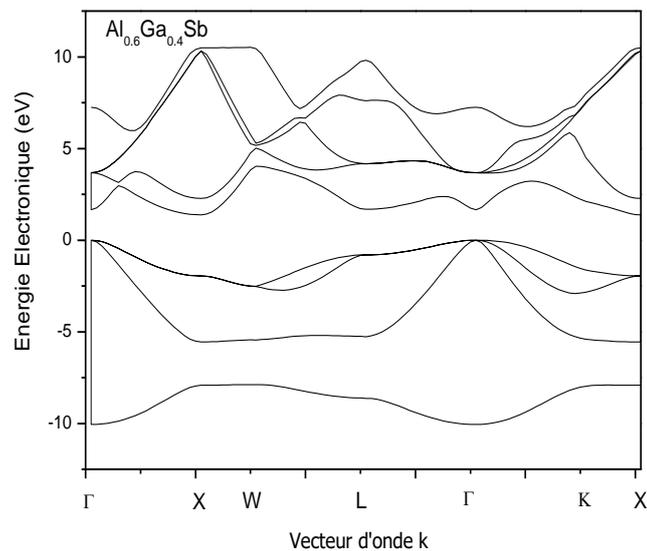
**Figure12 :** Structures de bande du composé binaire *GaSb* en fonction de vecteur d'onde  $k$

La Figure 13, représente la structure de bande du composé *AlSb*, on remarque que *AlSb* est à bande interdite indirecte. Ce comportement indirect est associé à la vallée  $X$  dont le minimum se situe à 1.619 eV du maximum de la bande de valence.



**Figure13 :** Structures de bande du composé binaire AlSb en fonction de vecteur d'onde k

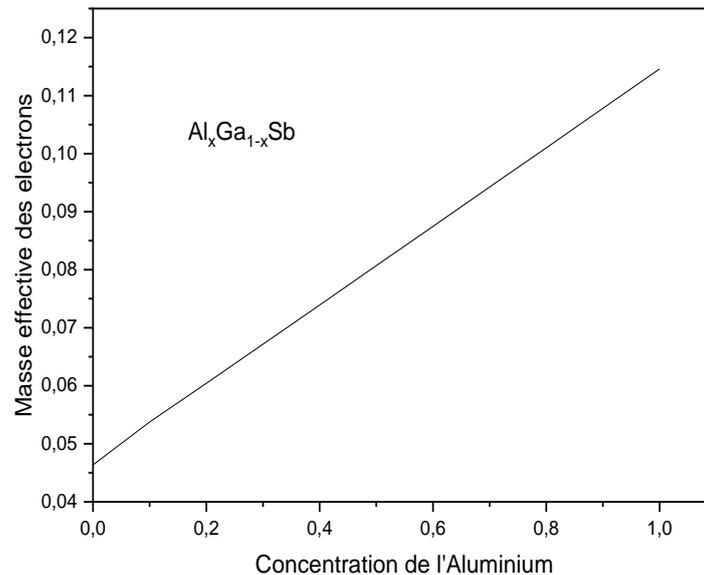
La structure de bande d'énergie de l'alliage ternaire  $Al_{0.6}Ga_{0.4}Sb$ , est schématisée sur la Figure 14, où le comportement du gap d'énergie est indirect.



**Figure14 :** structures de bande d'alliage  $Al_{0.6}Ga_{0.4}Sb$  en fonction de vecteur d'onde

### III.2.1.1.3. Masse effective :

Nos résultats ont montré que la masse effective des électrons pour *GaSb* est de  $0.03 m_0$  et pour *AlSb* est de  $0.13 m_0$ , où  $m_0$  est la masse de l'électron libre. Nos valeurs sont raisonnables avec les valeurs expérimentales qui sont  $0.013 m_0$  et  $0.14 m_0$  rapporté par Adachi pour les composés binaires *GaSb* et *AlSb* respectivement.



**Figure 15 :** variation de masse effective du  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de composition  $x$  du l'aluminium

La Figure 15 illustre la variation de la masse effective de l'électron en fonction de la fraction molaire  $x$ , en tenant compte de l'effet du désordre. L'expression analytique de l'équation d'interpolation quadratique, en utilisant la méthode des moindres carrés est :

$$\frac{m_e^*(\Gamma)}{m_0} = -5,71795E - 4 x^2 + 0,06846 x + 0,04665 \dots \dots \dots \text{III. 6}$$

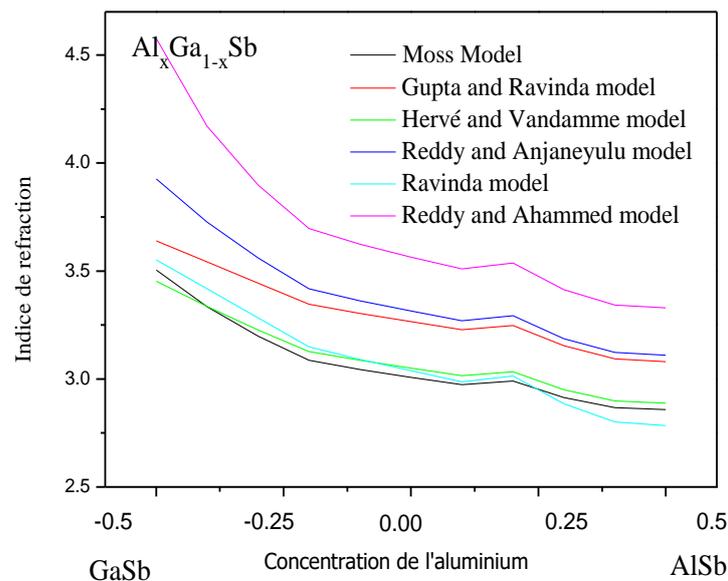
Au fur et à mesure que la concentration de l'Aluminium augmente, c'est-à-dire, en partant de *GaSb* ( $x = 0$ ) à *AlSb* ( $x = 1$ ), la variation de la masse effective des électrons au point  $\Gamma$ , qui croît linéairement, d'après l'équation d'interpolation, on a un paramètre de courbure très faible égal à  $(-5,71795E - 4)$ . On peut déduire que la mobilité des électrons peut diminuer avec l'augmentation de la composition  $x$ .

### 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 électrique et optique des matériaux.

Le Figure 16 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 and Anjaneyulu.



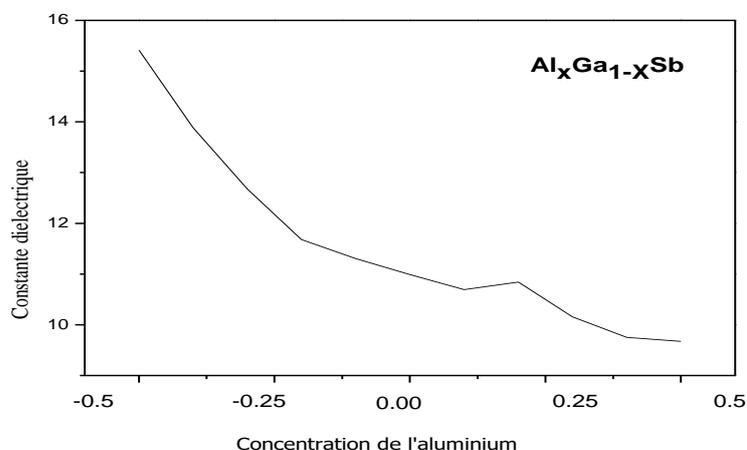
**Figure 16 :** variation de l'indice de réfraction n du  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de composition x du l'aluminium pour les six modèles.

**Tableau06:** les valeurs de l'indice de réfraction de GaSb, AlSb et  $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{Sb}$  comparés aux données théoriques.

Matériau	n calculé à partir de :						expérience
	Modèle de Ravindra et SrIIIastava	Modèle de Gupta et Ravindra	Modèle d'Hervé et Vandamme	Modèle de Reddy et Anjaneyulu	Modèle de Ravindra	Modèle de Reddy et Ahammed	
GaSb	3.50	3.64	3.45	3.93	3.55	4.58	3.8
$\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{Sb}$	2.97	3.23	3.02	3.27	2.99	3.51	
AlSb	2.86	3.08	2.89	3.11	2.78	3.33	3.23

### III.2.2.2. La constante diélectrique :

En calculant l'indice de réfraction, il s'est avéré que le modèle Reddy and Anjaneyulu. est le plus adéquat parmi six modèles différents. La constante diélectrique est calculé pour ce modèle approprié par la relation  $\epsilon = n^2$ . Les résultats illustrés dans le tableau 07 montre que  $\epsilon$  décroît avec l'augmentation de x en allant du GaSb vers AlSb. On peut dire que le modèle de Reddy and Anjaneyulu est plus proche de l'expérience par rapport aux autres modèles.

**Figure 17** variation de la constante diélectrique  $\epsilon$  du  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de composition x du l'aluminium.

**Tableau07:** les valeurs de la constante dielectrique de GaSb, AlSb et  $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{Sb}$  comparés aux donnés théoriques

Matériau	$\epsilon$ calculé	$\epsilon$ Expérimental
GaSb	15.4	14.4
$\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{Sb}$	10.7	
AlSb	9.67	9.88

### III.3.Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons utilisé la méthode de pseudo-potentiel 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, l'indice de réfraction et la constante diélectrique, la structure de bande électronique.

Cette structure cristallise dans la structure cubique, les 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

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.

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode pseudo-potentiel avec l'approximation (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA), (l'effet du désordre n'a pas été pris en compte) pour déterminer la structure des bandes en fonction de vecteur d'onde  $k$ , la masse effective, l'indice de réfraction et la constante diélectrique, la structure de bande électronique de notre alliage ternaire  $Al_xGa_{1-x}Sb$  qui se cristallise dans la structure cubique.

Les résultats des calculs montrent que le matériau étudié est du type Gap direct pour une concentration de l'aluminium égale à 0.3, par conséquent, il a des répercussions importantes sur le domaine de la technologie optoélectronique, au-delà de cette valeur, il transite en un gap indirect.

En calculant l'indice de réfraction, il s'est avéré que le modèle Reddy and Anjaneyulu. Est le plus adéquat parmi six modèles différents.

La constante diélectrique est calculée pour ce modèle approprié. La variation de la masse effective de l'électron dans l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$  suit un profil non linéaire selon la concentration  $x$  de l'aluminium.

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

# Références bibliographiques

- [1] Cours: Philippe ROUX, Théorie générale simplifiée des semi-conducteurs, jonction PN au silicium, effet transistors bipolaire, 2008.
- [2] A.Sasaki, M. Nishiuma and Y. Takeda, Jpn. J. Appl. Phys. 19, 1698 (1980).
- [3] R.De.L. Kronig, J.Opt. Soc. Am. 12 (1926) 547.
- [4] N.BAGHDADLI, Thèse de Magister ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS III-V A BASE DE GALIUM “. Université Abou-Bakr Belkaid – Tlemcen, (2010).
- [5] I. Hernández-Calderon, "Optical properties and electronic structure of wide band gap II-VI semi-conductors", in II-VI semi-conductor Materials and their Applications Taylor and Francis New York, 113-170(2002)
- [6] N.BAGHDADLI, Thèse de Magister ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS III-V A BASE DE GALIUM “. Université Abou-Bakr Belkaid – Tlemcen, (2010).
- [7] N.BAGHDADLI, Thèse de Magister ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS III-V A BASE DE GALIUM “. Université Abou-Bakr Belkaid – Tlemcen, (2010).
- [8] W.T.Anderson “ simulation of Semiconductor Device failure Mechanisms”, Naval research Laboratory, Washington. D. C, 2. Fraunhofer Institute, Freiburg, Germany(2003)
- [9] A. T. Petit, P. L.Dulong, Ann. Chim.Phys 10, 395 (1819).
- [10] MERZAG FADILA. Mémoire doctorat de sciences en physique du solide université Mohamed Khider Biskra (2012)
- [11] FADILA MERZAG Mémoire de MAGISTER Université Mohamed Boudiaf de Msila
- [12] SEBIHI NASSIMA .Thèse de DOCTORAT EN SCIENCE université de Sétif
- [13] 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)
- [14] k.Kassali, thèse doctorat, université de sétif, Algeria, (2005)
- [15] Hannachi Larbi. Mémoire du doctorat en science en physique du solide université Ferhat Abbas- setif
- [16] N .W.Ashroft. Phys.Lett 23,48 (1966)
- [17] Baaziz Hakim. Mémoire du doctorat en science en physique des matériaux université colonel Hadj Lakhdar Batna
- [18] H .Aourag, (pseudopotential method theory and practice), winter college on computational condensed matter physics(1995), université of sidi-Bel-Abes

### **Résumé :**

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs binaires : GaSb, AlSb ; et leurs alliages ternaires :  $Al_x Ga_{1-x} Sb$ .

Ces alliages ont un intérêt important pour concevoir des dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes et les diodes laser.

Nos calculs sont basés sur la méthode du pseudo-potentiel empirique (EPM) combinée avec l'approximation. L'effet du désordre sur les propriétés électroniques de l'alliage ternaire  $Al_x Ga_{1-x} Sb$  n'a pas été pris en compte.

Nos résultats, pour les gaps directs et indirects, les structures de bandes, et la masse effective des composés binaires AlSb, GaSb et leurs alliages ternaires cristallisant dans la phase zinc-blende, sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles.

**Mots clés : Alliage ternaire ,méthode du pseudo-potentiel empirique (EPM), zinc-blende**

### **Abstract:**

In this work, we have studied the electronic properties of binary semiconductor alloys: GaSb, AlSb; and their ternary alloys:  $Al_x Ga_{1-x} Sb$ .

These alloys are of great interest in designing optoelectronic devices such as light emitting diodes and laser diodes.

Our calculations are based on the pseudo-empirical potential (EPM) method combined with the approximation. The effect of the disorder on the electronic properties of the ternary alloy  $Al_x Ga_{1-x} Sb$  has not been taken into account.

Our results, for the direct and indirect gaps, the band structures, and the effective mass of the binary compounds AlSb, GaSb and their ternary alloys crystallizing in the zinc-blende phase, are in very good agreement with the experimental and theoretical results available.

**Key words: Ternary alloy, empirical pseudo-potential method (EPM), zinc-blende**

### **ملخص**

في هذا العمل، درسنا الخصائص الإلكترونية لسبائك أشباه الموصلات الثنائية: GaSb، AlSb؛ وسبائكها الثلاثية:  $Al_x Ga_{1-x} Sb$ . هذه السبائك لها أهمية كبيرة في تصميم الأجهزة الإلكترونية الضوئية مثل الثنائيات الباعثة للضوء وثنائيات الليزر. تعتمد حساباتنا على طريقة الإمكانيات التجريبية الزائفة (EPM) جنبًا إلى جنب مع التقريب. لم يؤخذ في الحسبان تأثير الاضطراب على الخصائص الإلكترونية للسبيكة الثلاثية  $Al_x Ga_{1-x} Sb$ . تتفق نتائجنا، بالنسبة للفجوات المباشرة وغير المباشرة، وهياكل النطاق، والكتلة الفعالة للمركبات الثنائية AlSb و GaSb وسبائكها الثلاثية المتبلورة في مرحلة مزيج الزنك، بشكل جيد جدًا مع النتائج التجريبية والنظرية المتاحة.