

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

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

Faculté des Sciences et de la technologie

Département d'électronique

Mémoire

Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : Electronique

Spécialité : Microélectronique

Par

- **BISSAAD Brahim**
- **CHARFAOUI Ahmed**

Intitulé

***Contribution à l'étude des propriétés optoélectroniques et diélectriques du
composé binaire semi-conducteur AlSb.***

Soutenu le :

Devant le Jury composé de :

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

Année Universitaire 2021/2022

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

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.

Charfaoui Ahmed

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 mes frères 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.

B .Barhim

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.

Table des matières

Sommaire :

Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale :.....	1
Chapitre 1 :	
1.1 Introduction :.....	2
1.2 Généralités sur les semi-conducteurs :	2
1.3 Différents types de semi-conducteurs :	3
1.3.1 Semi-conducteur intrinsèque :.....	3
1.3.2 Semi-conducteur extrinsèque	4
1.3.2.1 Semi-conducteurs extrinsèques type N :.....	5
1.3.2.2 Semi-conducteurs extrinsèques type P :	6
1.4 Propriétés des semi-conducteurs III-V :.....	7
1.4.1 Propriétés structurales :	8
1.4.1.1 Structure cristalline Zinc-Blinde :.....	8
1.4.1.2 La constante de réseau :.....	9
1.4.1.3 Première zone de Brillouin :	9
1.4.2 Propriétés électroniques :	11
1.4.2.1 La structure de bande :.....	11
1.4.2.2 Gap énergétique :.....	12
1.4.2.3 Masse effective :.....	12
1.4.2.4 Densité de charge :.....	13
1.4.3 Propriétés optiques :	14
1.4.3.1 Indice de réfraction :	16
1.4.4 Propriétés diélectriques :	17
1.5 Les avantages des semi-conducteurs III-V :.....	17
1.6 Conclusion :.....	17
Chapitre 3 : Méthodes de calcul	
2.1 Introduction :	18
2.2 Equation de Schrödinger dépendante du temps :	18
2.3 L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin :	19
2.3.1 Approximation de Born-Oppenheimer :.....	21
2.3.2 Approximation de Hartree (Approximation des électrons indépendants) :.....	22
2.3.3 Approximation de Hartree-Fock-Slater :.....	24
2.4 Les méthodes de calcul de la structure de bandes électronique :	25
2.4.1 Méthodes de calcul des électrons libres :	25
2.4.2 Méthodes de calcul des électrons presque libres :.....	26
2.4.3 Méthodes de calcul des ondes planes :	29
2.4.4 Méthode de calcul des ondes planes augmentées :.....	30
2.4.5 Méthodes de calcul des ondes planes orthogonales :	31
2.4.6 Méthode des pseudopotentiels :.....	32
2.4.6.1 Méthode empirique locale :	33
2.4 Conclusion.....	35
Chapitre 3 : Résultat et discussion	
3.1 Introduction :	36
3.2 Les propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs :	36
3.2.1 Etude des propriétés électroniques :.....	36

Table des matières

3.2.1.1	Gap énergétique pour le composé binaire AlSb :	38
3.2.1.2	Structure de bandes électroniques :	39
3.2.1.3	Masse effective :	40
3.2.1.4	Densité de charges électroniques :	41
3.2.2	Etude des propriétés optiques :	43
3.2.2.1	Indice de réfraction :	43
3.2.3	Etude des propriétés diélectriques :	44
3.2.3.1	La constante diélectrique de haute fréquence :	44
3.2.3.2	La constante diélectrique statique :	45
3.3	Conclusion :	46
4	Conclusion générale :	47
	Références bibliographiques :	48

Table des matières

Liste des figures :

Figure 1. 1 : Liaisons électroniques pour le semi-conducteur intrinsèque (Si).....	3
Figure 1. 2 : Bandes d'énergie d'un Semi-conducteur intrinsèque.....	4
Figure 1. 3 : Silicium dopé au Phosphore [2].....	6
Figure 1. 4 : Silicium dopé au Bore [2].....	7
Figure 1. 5 : Maille élémentaire de la structure Zinc Blende du composé binaire AlSb.....	8
Figure 1. 6 : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel [1].	9
Figure 1. 7 : Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries [1].....	10
Figure 1. 8 : Bandes d'énergie des semi-conducteurs	11
Figure 1. 9 : a) Semi-conducteur à gap direct b.) Semi-conducteur à gap indirect [1].	12
Figure 2. 1 : La création des gaps énergétiques.....	28
Figure 2. 2 : L'approche du pseudopotentiel empirique local.....	34
Figure 3. 1 : Structure de bandes du composé binaire AlSb en fonction de vecteur d'onde k	39
Figure 3. 2 : Densité de charges électroniques de la bande de valence du composé binaire AlSb.	41
Figure 3. 3 : Densité de charges électroniques de la première bande de Conduction du composé binaire AlSb	42

Table des matières

Liste des tableaux :

Tableau 1. 1 : Extrait de la classification périodique des éléments.....	7
Tableau 3. 1 : Les facteurs de forme Pseudopotentiels Symétriques et Antisymétriques du binaire AlSb [15]	38
Tableau 3. 2 : Les gaps d'énergies calculés et expérimentaux du les composé binaires AlSb	38
Tableau 3. 3 : Masse effective du Composé binaire AlSb	40
Tableau 3. 4 : l'indice de réfraction n du composé binaire AlSb	44
Tableau 3. 5 : Constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞}	44
Tableau 3. 6 : Constante diélectrique statique ϵ_0	45

Introduction générale

Introduction générale :

Les matériaux III-V sont composés d'éléments des colonnes IIIb et Vb du tableau périodique. Afin d'utiliser ces matériaux dans des composants électroniques et optoélectroniques, il est nécessaire de comprendre leurs propriétés physiques. Par des moyens techniques. Les chercheurs ont pu fabriquer des alliages semi-conducteurs, qui sont des mélanges de deux éléments ou plus, résultant en des composés binaires, ternaires, quaternaires et pentagonaux.

Les semi-conducteurs III-Sb ont attiré beaucoup d'attention pour leurs applications potentielles dans l'optique infrarouge requise pour les systèmes de communication à fibre optique, tels que les lasers à puits quantiques multiples à base de GaSb/AlGaSb et les détecteurs optoélectroniques GaInSb/InAs.

Devant l'impossibilité de résoudre l'équation de Schrödinger pour un système de n particules, des méthodes approchées sont utilisées. Les méthodes de calcul de la structure de bande d'énergie électronique peuvent être divisées en : méthode empirique, algorithme ab initio et méthode semi-empirique.

Notre travail étudie les propriétés optoélectroniques du semi-conducteurs binaire AlSb, c'est-à-dire dans la phase Zinc Blend, en utilisant une approche pseudo-potentielle. Ce manuscrit est divisé en trois chapitres :

Le premier chapitre détaille des informations générales sur les semi-conducteurs III-V, à savoir les propriétés structurelles, électroniques et optiques. Le deuxième chapitre attire l'attention sur les lois de la mécanique quantique, expliquant les propriétés électroniques des systèmes en interaction. Il décrit donc en détail la méthode des pseudopotentiels empiriques. Le dernier chapitre est consacré aux résultats et à leur discussion, où nous présentons les principaux résultats obtenus, les expliquons et les comparons avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux.

Chapitre 1 :

Notions générales sur les semi-conducteurs

1.1 Introduction :

Les technologies semi-conducteurs ont connues la plus fort progression industrielle des vingt dernières années, demeurent un outil essentiel de développement des économies modernes et cela, grâce à leur propriétés physiques curieuse qui sont connues depuis longtemps.

Parmi ceux- ci, les matériaux semi-conducteurs des groupe III-V et II-VI de la classification de Mendeleïev, qui ont un champ d'application très élargi.

Les semi-conducteurs sont aussi considérés comme une classe important des matériaux, grâce à la richesse de leurs structures électroniques et leurs propriétés physiques qui peuvent être ajustées et contrôlées pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré [1].

1.2 Généralités sur les semi-conducteurs :

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique intermédiaire entre celle des conducteurs et des isolants. Cette conductivité varie sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau).

Les semi-conducteurs sont principalement les éléments de la colonne IV du tableau de classification des éléments (Si, Ge) mais aussi des composés III-V (GaAs, GaN) ou II-VI (ZnS, CdTe) .

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

Dans cette thèse nous avons utilisés les alliages binaires des semi-conducteurs III-V : Antimoniure d'aluminium (AlSb) et Phosphure d'aluminium (AlP) [1].

1.3 Différents types de semi-conducteurs :

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

1.3.1 Semi-conducteur intrinsèque :

Un semi-conducteur est dit intrinsèque, si ses propriétés électriques sont entièrement dues à sa composition chimique et à sa structure cristalline et non pas à la présence d'impuretés. Ce comportement correspond à son état pur, donc parfait, sans défaut structural ou impuretés. Toutefois, un semi-conducteur réel n'est jamais parfaitement intrinsèque, ces semi-conducteurs ne conduisent pas ou très peu le courant sauf s'ils sont portés à haute température [1].

Dans le cas intrinsèque, les électrons de la bande de conduction ne peuvent provenir que des niveaux de la bande de valence autre fois occupés, laissant des trous derrière eux. Le nombre d'électrons de la bande de conduction est donc égal au nombre de trous dans la bande de valence.

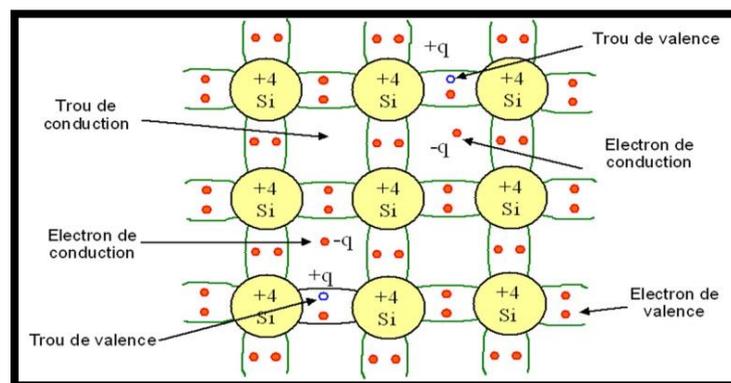


Figure 1. 1 : Liaisons électroniques pour le semi-conducteur intrinsèque (Si).

Pour un semi-conducteur intrinsèque (sans impuretés), à chaque électron de la bande de conduction correspond un trou dans la bande de valence. De cette constatation, nous déduisons que les densités d'électrons et de trous sont identiques pour ce type de semi-conducteur

$$n_c(T) = p_v(T) \equiv n_i(T) \quad (1-1)$$

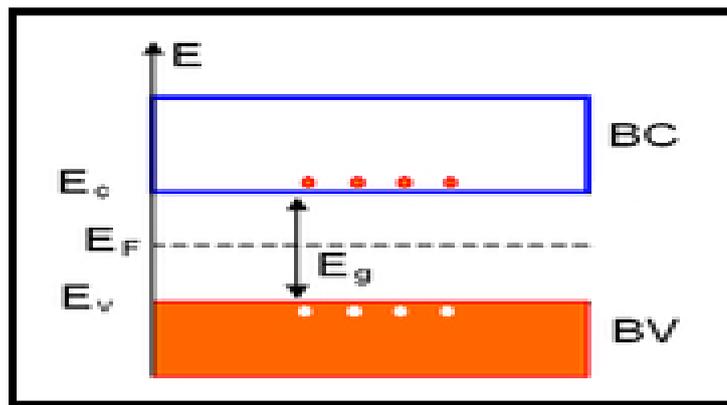


Figure 1. 2 : Bandes d'énergie d'un Semi-conducteur intrinsèque

1.3.2 Semi-conducteur extrinsèque

Ces semi-conducteurs sont d'un grand intérêt technique, car leur conductivité électrique peut être fortement modifiée par l'adjonction dans leurs structures cristallines d'impuretés spécifiques. Les propriétés électriques étant ainsi déterminées par la présence des impuretés, on parle de conductivité extrinsèque. L'adjonction délibérée d'impuretés à l'intérieur d'un semi-conducteur intrinsèque est appelée dopage [1].

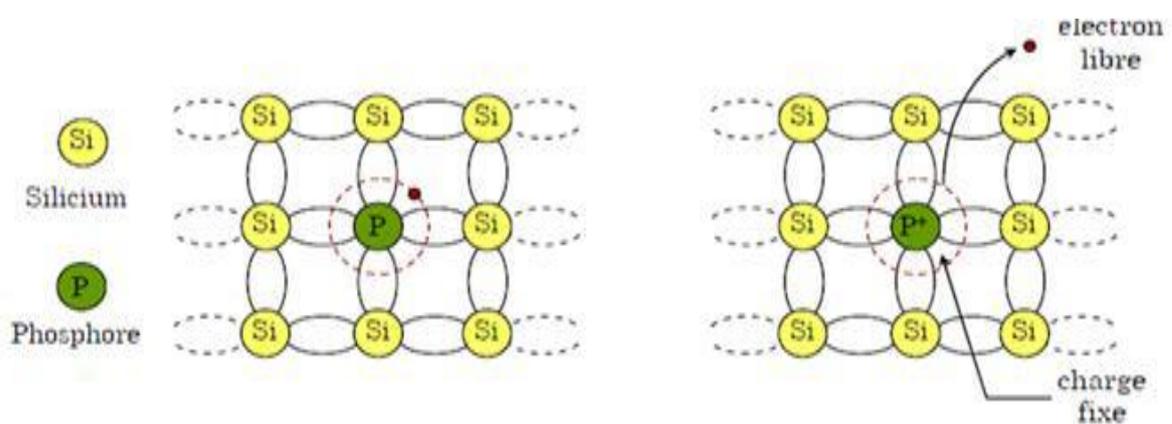
1.3.2.1 Semi-conducteurs extrinsèques type N :

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 [2].



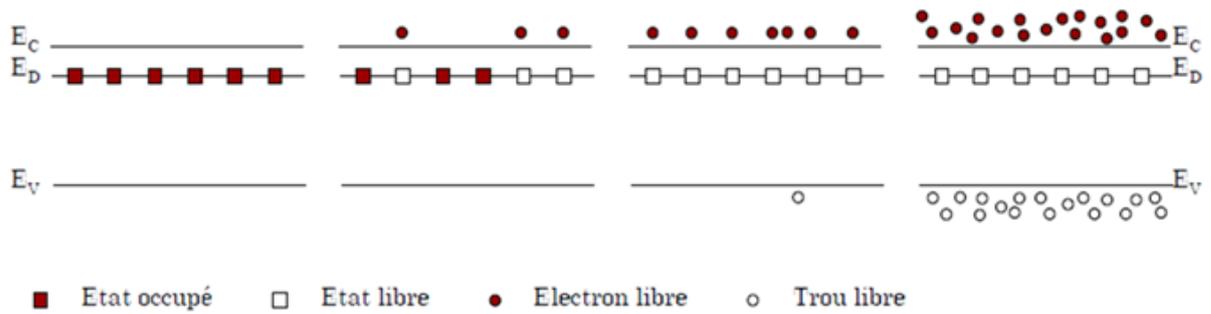
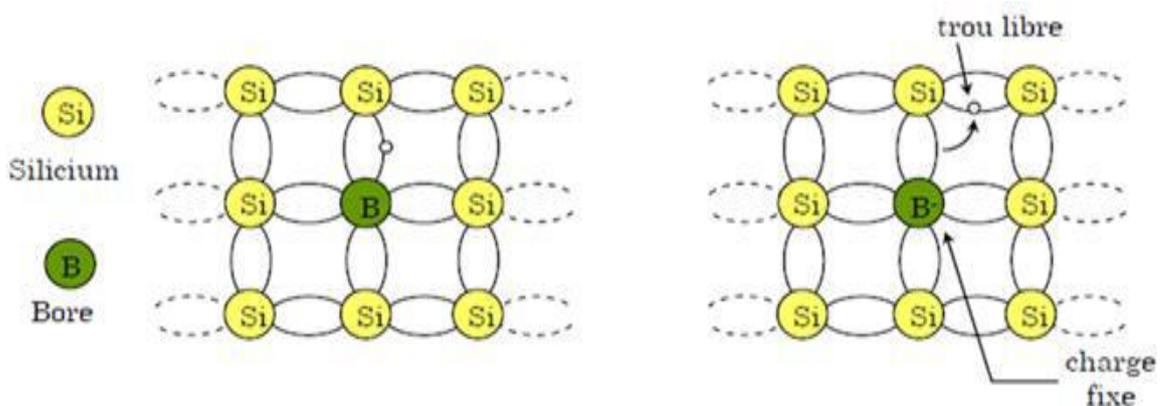


Figure 1. 3 : Silicium dopé au Phosphore [2].

1.3.2.2 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 [2].

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 [2].



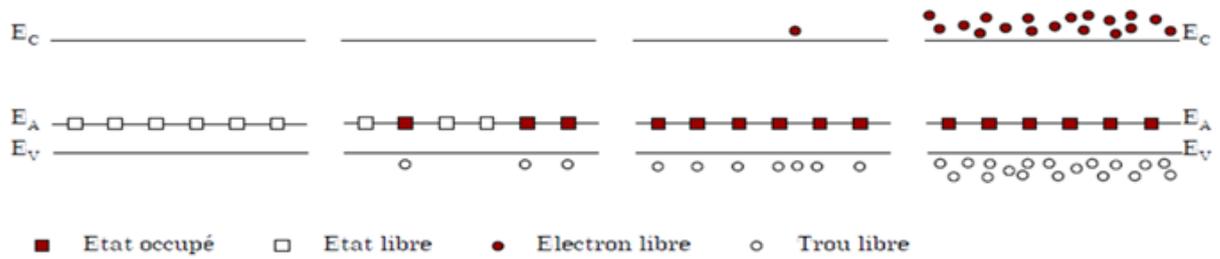


Figure 1. 4 : Silicium dopé au Bore [2].

1.4 Propriétés des semi-conducteurs III-V :

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev.

Le **tableau I.1** regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés [1].

Tableau 1. 1 : Extrait de la classification périodique des éléments.

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

1.4.1 Propriétés structurales :

1.4.1.1 Structure cristalline Zinc-Blende :

Les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines [1].

Les matériaux semi-conducteurs de la colonne III de la classification de Mendeleïev possèdent trois électrons de valence sur leurs dernières orbitales nS^2nP^2 . Par contre les éléments de la colonne V ont cinq électrons de valence sur leurs dernières orbitales nS^2nP^3 . L'arrangement des atomes forme des orbitaux atomiques hybrides de type SP^3 [1].

La plupart des matériaux semi-conducteurs III-V ont une structure Zinc-blende (ZB). Cette structure est constituée de deux sous réseaux cubique faces centrée (cfc), l'un occupé par l'anion d'éléments III et l'autre par le cation d'élément V, décalé l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale principale.

Chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un autre atome de l'autre espèce. Le réseau alors entièrement défini par une seule grandeur (a) : constante du réseau, qui est aussi nommé paramètre de maille,

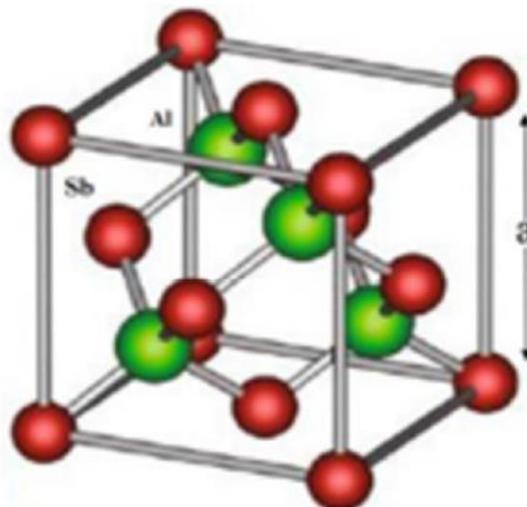


Figure 1. 5 : Maille élémentaire de la structure Zinc Blende du composé binaire AlSb

1.4.1.2 La constante de réseau :

C'est une grandeur utilisée pour d'écrire la maille d'un cristal, la maille cristalline est définie par trois paramètres (a, b, c) et par trois angles (α, β, λ) [1].

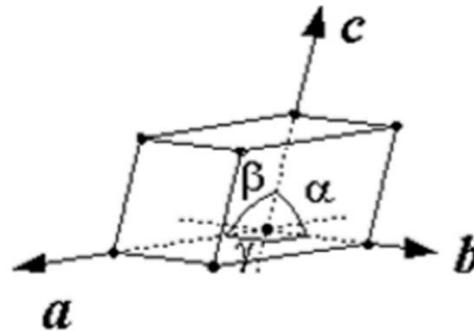


Figure 1. 6 : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel [1].

C'est pour cela que la détermination de la constante du réseau est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. On voit clairement que, la connaissance de cette constante du réseau permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique [1].

1.4.1.3 Première zone de Brillouin :

La première zone de Brillouin est définie de manière unique comme la maille primitive dans l'espace réciproque. La notion de zone de Brillouin est nécessaire pour décrire les propriétés vibrationnelles ou électroniques d'un cristal dans lequel la symétrie de translation joue un rôle essentiel [1].

La première zone de Brillouin est la cellule de Wigner-Seitz du réseau réciproque, on peut la construire en traçant les plans bissecteurs des vecteurs joignant à un point quelconque du réseau réciproque. Cette première zone de Brillouin possède la forme d'un octaèdre tronqué. Cet espace réduit du réseau réciproque est caractérisé par des points et des lignes d'importance particulière, on les appelle les points et les lignes de haute symétrie [1].

1.4.1.3.1 Les points de haute symétrie :

Γ : Centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées

X : Centre d'une face carrée de l'octaèdre appartenant à l'un des axes k_x , k_y ou k_z avec l'une des faces carrées. $k_x = 2\pi\alpha (\pm 1, 0, 0)$, $k_y = 2\pi\alpha (0, \pm 1, 0)$, $k_z = 2\pi\alpha (0, 0, \pm 1)$

L : Centre d'une face hexagonale de l'octaèdre ayant les coordonnées $kL = 2\pi\alpha (1, 1, 1)$.

W : Point W se trouve sur l'un des sommets des faces carrées et de coordonnées $kW = 2\pi\alpha (0, 1, 1)$.

Z : Point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre et de coordonnées $kZ = 2\pi\alpha (1, 1, 1)$ [1].

1.4.1.3.2 Les lignes de haute symétrie :

Δ : Ligne de direction (100), reliant le centre Γ au point X .

Σ : Point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$.

Λ : Ligne de direction (100), reliant le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre [1].

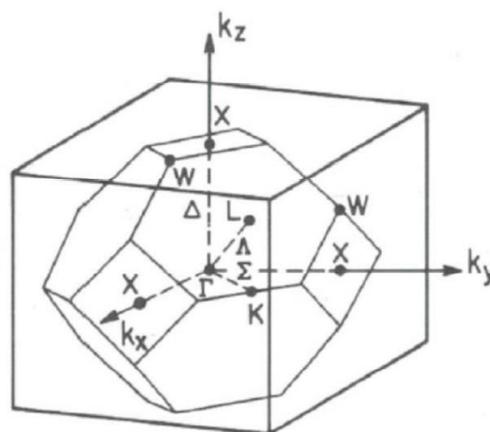


Figure 1. 7 : Première zone de Brillouin de la structure zinc blende avec la représentation des points et lignes de hautes symétries [1].

1.4.2 Propriétés électroniques :

1.4.2.1 La structure de bande :

La structure de bandes est généralement identique pour les composés (III.V). C'est à dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence correspondent à la même valeur du vecteur d'onde k dans la structure de bandes. Dans ces matériaux, la transition entre les bandes de valence et de conduction est le plus souvent radiative, ce qui leur accorde des propriétés optiques très intéressantes pour la fabrication de systèmes optoélectroniques [1].

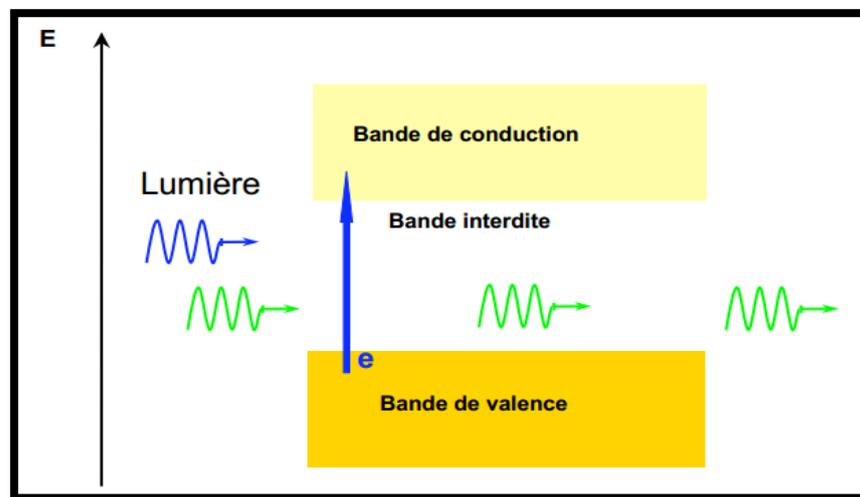


Figure 1. 8 : Bandes d'énergie des semi-conducteurs

On remarque sur la Figure 1.8 l'existence de trois bandes d'énergies particulières :

- Une bande de faibles énergies, appelée bande de valence (BV). Les électrons présents dans cette bande sont liés aux atomes et participent aux liaisons covalentes.
- Une bande de plus hautes énergies, appelée bande de conduction (BC). Les électrons de cette bande sont libres de se déplacer (d'où le nom de conduction) : ils participent donc aux courants.
- Une bande intermédiaire. C'est une bande interdite, c'est à dire qu'aucun électron ne peut se situer dans cette bande. L'énergie minimale s'éparant les deux bandes de conduction et de valence est appelée énergie de gap. Elle sera notée E_g .

1.4.2.2 Gap énergétique :

Les courbes $E_{cv}(k)$ dites aussi relations de dispersion ou E_C est le minimum de la bande de conduction, E_V le maximum de la bande de valence et k le vecteur d'onde associé à un électron, ces courbes font apparaître deux types de semi-conducteur. Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de k on dit que le semi-conducteur est à gap direct. Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de k différentes, on dit que le semi-conducteur est à gap indirect [1].

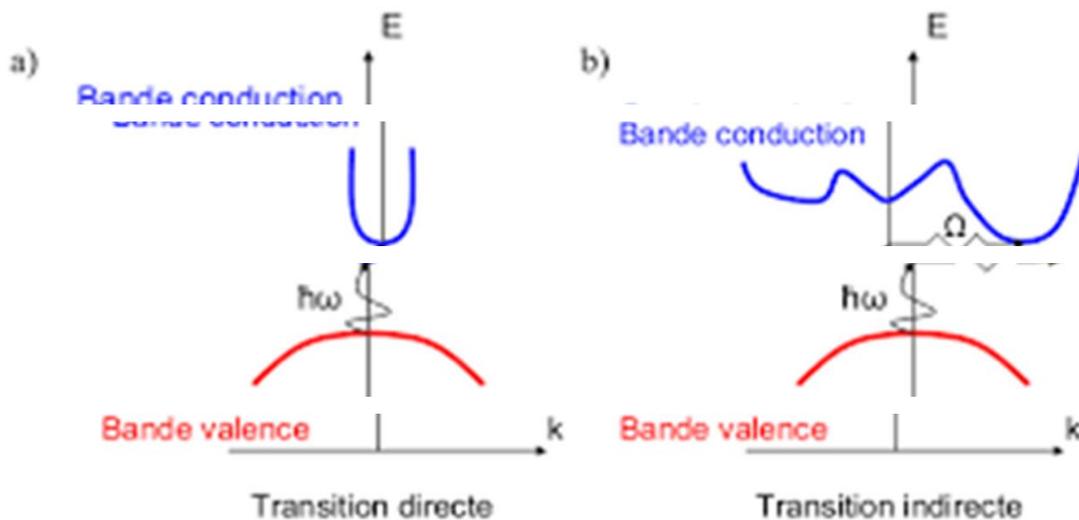


Figure 1.9 : a) Semi-conducteur à gap direct b.) Semi-conducteur à gap indirect [1].

1.4.2.3 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 de 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 [2] :

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

1.4.2.4 Densité de charge :

La densité de charge électronique est un moyen pour l'analyse et l'interprétation d'un nombre considérable de propriétés des matériaux.

En particulier la distribution de la densité de charge associée à la bande de valence est un aspect important de la structure électronique puisqu'elle indique la nature des liaisons.

Lorsque l'équation de Schrödinger est résolue pour les fonctions d'ondes $\psi(r)$, décrivant l'état d'un système, la quantité $\rho = \psi^* \psi$ représente la densité de probabilité de présence d'une particule aux divers points de l'espace. Plus précisément, la probabilité P pour qu'une particule se trouve dans une région de l'espace de volume Ω est déterminée par:

$$P = \int_{\Omega} |\Psi(r)|^2 d^3r \quad (1-3)$$

La densité de charges de l'électron dans une certaine région spatiale [3]:

$$\rho(r) = e|\psi(r)|^2 \quad (1-4)$$

Pour chaque bande d'indice n , et en sommant sur tous les états k de cette bande, la densité spécifique ρ_n s'écrit comme suit :

$$\rho_n(r) = 2e \sum_k |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad (1-5)$$

D'où la densité de charge totale est la sommation sur tous les états k des n bandes du cristal, elle est de la forme :

$$\rho(r) = \sum_n \rho_n(r) \quad (1.6)$$

Le calcul de la densité de charges totale nécessite la connaissance des fonctions d'ondes dans toute la zone de Brillouin. Plusieurs méthodes d'approximation ont été développées dans le but de réduire le temps de calcul nécessaire, telles que la méthode par échantillonnage des 3360 points de J.P. Walter et al, ou bien la méthode de Baldereschi basée sur le point moyen. Dans notre cas, on va se limiter au calcul de la densité par la méthode du pseudopotentiel empirique.

Selon le théorème de Bloch, la fonction d'onde est de la forme :

$$\psi_{n,k}(r) = \sum_G C_n(K) e^{i(K+G)r} \quad (1.7)$$

On remplace l'équation **I.12** dans l'équation **I.10**:

$$\rho(r) = e \sum_{n,k} \psi_{n,k}^*(r) \psi_{n,k}(r) \quad (1.8)$$

Après calcul et utilisation de la transformée de Fourier on aboutit au résultat suivant :

$$\rho(G') = e \sum_{G'} |C_{n,G'}(K, G)|^2 \quad (1.9)$$

Où :

$C_{n,G'}(K,G)$: Les coefficients de Fourier des pseudos fonctions d'ondes de l'électron de valence $\psi_{n,k}$.

1.4.3 Propriétés optiques :

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

Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion,

transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux.

L'interaction du rayonnement avec les électrons du semi-conducteur se manifeste selon trois processus distincts :

- un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, c'est l'absorption fondamentale. Ce processus sera mis à profit dans les capteurs de rayonnement.

- un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon, c'est l'émission spontanée.

Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs de rayonnements tels que les diodes électroluminescentes.

- un photon présent dans le semi-conducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence, avec émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semi-conducteur.

Les caractéristiques optiques des matériaux sont :

a. Le coefficient de réflexion R :

$$R = \frac{(n - 1)^2 + \chi^2}{(n + 1)^2 + \chi^2} \quad (1.10)$$

Où

χ : est le coefficient d'extinction

b. Le coefficient de transmission T :

$$T = \frac{4n}{(n + 1)^2 + \chi^2} \quad (1-11)$$

Où

n : est l'indice de réfraction

1.4.3.1 Indice de réfraction :

La connaissance de l'indice de réfraction (n) des semi-conducteurs est indispensable pour des dispositifs tels que des cristaux photoniques, des guides d'ondes, des cellules et des détecteurs d'énergie solaire [7,8]. L'indice (n) est calculé en utilisant différents modèles et en tenant compte de l'effet du désordre [1].

(i) Modèle de Ravindra et Srivastava [1]

$$n^4 E_g = 108 \quad (1-12)$$

(ii) Modèle de Gupta et Ravindra [1]

$$n = 4.084 - 0.62E_g \quad (1-13)$$

(iii) Modèle de Hervé et Vandamme [1]

$$n = \left[1 + \left(\frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1-14)$$

(iv) Modèle de Reddy et Anjaneyulu [1]

$$E_g e^n = 36.6 \quad (1-15)$$

(v) Modèle de Ravindra [1]

$$n = 4.16 - 0.85E_g \quad (1-16)$$

(vi) Modèle de Reddy et Ahammed [1]

$$n = 4.084 - 0.62E_g \quad (1-17)$$

1.4.4 Propriétés diélectriques :

La constante diélectrique appelée aussi permittivité électrique, décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. Elle a des conséquences importantes sur les propriétés physiques du solide. Elle intervient dans de nombreux domaines, notamment, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétique, en particulier en optique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière. La constante diélectrique : $\varepsilon(\omega)$ et l'indice de réfraction (n) sont liés par la relation [1] :

$$\varepsilon = n^2 \quad (1-18)$$

1.5 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 [2].

1.6 Conclusion :

L'utilisation de matériaux composites apporte de nombreux avantages en termes de propriétés des matériaux. En fait, ils sont faits pour profiter des bonnes propriétés de chaque matériau pour créer des matériaux plus adaptés à certaines applications. Par conséquent, la combinaison de deux ou plusieurs matériaux peut améliorer les propriétés des matériaux, ce qui a fait l'objet de certaines études et intéresse certains chercheurs.

Chapitre 2 :

Méthodes de calcul

2.1 Introduction :

Le principal problème qu'on retrouve dans le calcul de la structure de bandes d'un cristal est l'absence d'une expression analytique du potentiel cristallin, ce qui rend difficile la recherche d'une solution générale à l'équation de Schrödinger.

L'équation Schrödinger est la plus fondamentale de la physique. Elle fut conçue en 1925 par Erwin Schrödinger, c'est l'équation d'évolution dans le temps d'une fonction de carrée sommable, dite fonction d'onde, qu'on doit associer à toute particule matérielle selon l'hypothèse de Louis de Broglie, auteur du double aspect de la matière : « onde-corpuscule ». [3].

Elle décrit l'état stationnaire de toutes les particules en interaction, constituant un cristal, les électrons et les noyaux atomiques, la résolution d'une telle équation dans sa forme générale ne peut être menée à terme sans l'introduction d'un certain nombre d'approximations.

2.2 Equation de Schrödinger dépendante du temps :

La mécanique quantique postule qu'à un instant $0t$ fixé, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un ket (vecteur d'état) appartenant à l'espace des états d'Hilbert [4]. En outre l'évolution dans le temps du vecteur d'état est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H(t) \psi(\vec{r}, t) \quad (2-1)$$

Où $H(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système. Celle-ci peut dépendre explicitement du temps.

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \quad (2-2)$$

Avec : $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ où $\vec{\nabla}$ est l'opérateur gradient et $U(\mathbf{r}, t)$ étant l'opérateur d'énergie potentielle associée au potentiel d'interaction, éventuellement dépendant du temps.

Si le phénomène étudié est stationnaire, l'opérateur Hamiltonien correspondant ne dépend pas explicitement du temps. Dans ce cas, l'équation de Schrödinger II – 1 se réduit, après séparation des variables spatiales et du temps, à une équation aux valeurs propres stationnaire de la forme :

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2- 3)$$

Où E désigne l'énergie du système dans l'état stationnaire $\psi(\mathbf{r})$, représenté par la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$.

L'équation de Schrödinger s'applique à la physique atomique et moléculaire, et notamment à tous les calculs de la spectroscopie.

2.3 L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin :

Après les postulats de l'existence d'une onde associée à chaque particule et de l'expression de sa longueur d'onde. L'équation de Schrödinger constitue le troisième postulat fondamental de la mécanique quantique [5].

En 1926, guidé par les idées de L. De Broglie, Erwin Schrödinger a proposé une équation dynamique à l'état stationnaire d'un système quantique appelé équation de Schrödinger. Pour le cas d'un cristal, cette équation s'écrit sous la forme suivante:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2 \dots)(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2 \dots) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2 \dots). \quad (2- 4)$$

Où :

H: L'opérateur hamiltonien du cristal.

ψ : Fonction d'onde du cristal.

E : L'énergie totale du cristal.

r_i ($i \dots N_e$) représente les coordonnées des électrons, N_e est le nombre d'électrons dans le système.

R_i ($i \dots N\alpha$) représente les coordonnées des noyaux, $N\alpha$ est le nombre d'atomes dans le système.

Un cristal est une association de particules élémentaires, légères tels que les électrons et de particules élémentaires lourdes, tels que les noyaux, qui sont en interactions permanentes entre eux, sous l'action des forces électrostatiques attractives et répulsives.

On définit l'Hamiltonien comme étant la somme de toutes les énergies cinétiques et potentielles présentent dans un cristal [6,7].

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn} \quad (2-5)$$

Avec :

L'énergie cinétique des électrons :

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{T}_i = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad (2-6)$$

Où :

N_e : Nombre total des électrons.

m : Masse de l'électron.

L'énergie cinétique des noyaux :

.

$$\hat{T}_n = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{T}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{-\hbar^2}{2M} \Delta_i \quad (2-7)$$

Où :

N_α : Nombre total des noyaux.

M : Masse du noyau.

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

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{r_i - r_j} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} \quad (2-8)$$

L'énergie d'interaction entre un noyau α et un noyau β :

$$\hat{V}_{nn} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|R_\alpha - R_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}_{\alpha\beta} \quad (2-9)$$

Z_α, Z_β : charges des noyaux α et β .

L'énergie d'interaction entre un noyau α et un électron i :

$$\hat{V}_{en} = - \sum_{i=1}^{Ne} \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} = - \sum_{i=1}^{Ne} \sum_{\alpha=1}^{N\alpha} \hat{V}_{en} \quad (2-10)$$

En introduisant les équations (2 – 6), (2 – 7), (2 – 8), (2 – 9) et (2 – 10) dans l'équation (2 – 4), l'Hamiltonien aura la forme suivante :

$$(\hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn})\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) = E\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) \quad (2-11)$$

L'équation (2 – 11) contient un grand nombre de particules, la résolution d'une telle équation à N éléments reste difficile ce qui nécessite des approximations pour remédier ce problème.

2.3.1 Approximation de Born-Oppenheimer :

Cette approximation est basée sur le rapport de masse entre le noyau et l'électron [8]. Ce rapport varie pour le noyau le plus léger entre 1836 et 20000, pour le noyau le plus typique.

Ainsi, les noyaux se déplacent beaucoup plus lentement que les électrons et par conséquent, on peut dire que les électrons se déplacent dans le domaine des noyaux fixes. C'est l'approximation de Born-Oppenheimer. Dans ce cas, on peut considérer que l'énergie cinétique des noyaux est nulle et l'énergie potentielle due à la répulsion noyau-noyau n'est qu'une constante [8,9].

Ainsi, l'hamiltonien complet donné dans l'équation (II.12) se réduit à ce qu'on appelle l'Hamiltonien électronique :

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} \quad (2-12)$$

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

$$\hat{H}_e \psi_e = E_e \psi_e \quad (2-13)$$

Avec T_e et E_e : l'état propre du système de N_e électrons

E_e : L'énergie des électrons qui se déplacent dans le champ électrique crée par les noyaux fixes.

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

A ce niveau, on est toujours dans un problème à N corps et donc d'autres approximations sont encore nécessaires d'où l'approximation de Hartree.

2.3.2 Approximation de Hartree (Approximation des électrons indépendants) :

Dans cette approximation, on considère que les électrons sont indépendants, sans corrélations et sans spin. Chaque électron se déplace dans le champ moyen créé par les noyaux et les autres électrons du système et il est traité individuellement. Ainsi, l'équation de Schrödinger à "n" électrons se ramène à "n" équations de Schrödinger à un seul électron :

Le modèle de Hartree se base sur une expression particulière des solutions, en effet, on va supposer que les électrons sont indépendants, ceci se traduit par :

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \dots \psi(r_n) \quad (2-14)$$

Où :

r_i : Position des électrons i avec $i=1 \dots n$.

Tenant compte de cette hypothèse, et pour contourner la complexité d'un système poly-électronique à un système mono-électronique, on considère que chaque électron se déplace dans le champ moyen des autres électrons et noyaux.

L'équation de Schrödinger à une seule particule (électron) est donnée comme suit :

$$\hat{H}_i \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad (2-15)$$

Avec :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{\text{ext}}(r) + V_i(r)$$

Où :

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

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

$$\hat{V}_i(r) = \frac{\int \rho_i(r')}{|r - r'|} d^3r \quad (2-16)$$

Or la densité des électrons $\rho_i(r)$ est donnée par :

$$\rho_i = -e \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} |\psi_j(r)|^2 \quad (2-17)$$

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

On remplace (2-16) dans (2-17) on obtient :

$$\hat{V}_i(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} \int \frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' \quad (2-18)$$

L'équation de Schrödinger aura la forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} \int \frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' + \hat{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2-19)$$

Cette équation 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.

2.3.3 Approximation de Hartree-Fock-Slater :

Pour s'affranchir de l'obstacle inhérent au caractère non local du potentiel d'échange et résoudre les équations de Hartree-Fock (HF), en 1951, Slater proposa d'écrire le potentiel d'échange V_x pour un gaz d'électron homogène de densité $\rho(\vec{r})$, sous la forme locale suivante [11]:

$$V(\vec{r}) = -6 \alpha \left(\frac{3\rho(\vec{r})}{8\pi} \right)^{1/3} \quad (2-20)$$

Où :

α : est un paramètre ajustable sans dimension.

Cette méthode est connue sous le nom de la méthode X_α . La forme simple et locale du potentiel d'échange, permet d'effectuer des calculs sur des systèmes physiques réels avec des temps de calculs raisonnables. Mais si ce choix intuitif conduit à des résultats qualitativement acceptables, ces résultats restent néanmoins quantitativement loin de la réalité.

La méthode X_α ignore les corrélations électroniques, car en réalité les électrons interagissent mutuellement de manière beaucoup plus complexe. Selon Wigner les interactions

électron-électron produisent un terme d'énergie supplémentaire en plus du terme d'échange introduit par Fock c'est le terme d'énergie de corrélation E_{cor} (énergie négative).

L'énergie d'échange et de corrélation est la somme du terme d'échange E_x introduit par Fock et l'énergie de corrélation E_{cor} . Cette énergie, notée E_{xc} est la différence entre l'énergie totale exacte E_{ex} et l'énergie totale de Hartree.

2.4 Les méthodes de calcul de la structure de bandes électronique :

2.4.1 Méthodes de calcul des électrons libres :

C'est un modèle développé par Arnold Sommerfeld, qui constitue le point de départ de la physique de l'état solide, permet d'expliquer des propriétés physiques importantes des métaux.

Pour ce modèle, le potentiel d'interaction, dans l'équation de Schrödinger, est nul. Car cet électron ne perçoit aucune influence de la part des autres électrons environnants. On peut dire que lorsque l'électron est libre, tous les niveaux d'énergie lui sont permis, ces niveaux forment une bande continue.

L'énergie totale du système ne comprend que l'énergie cinétique des électrons, leur énergie potentielle est négligée. On se basant sur cette hypothèse, l'équation de Schrödinger d'une particule est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi \quad (2-21)$$

La fonction d'onde satisfaisant une telle équation à la forme d'une onde progressive de la forme :

$$\psi_k = e^{ikr} \quad (2-22)$$

Elles représentent des ondes non stationnaires de quantité de mouvement : $p = \hbar K$
 Dans le modèle des électrons libres les valeurs permises pour l'énergie sont distribuées de façon continue :

$$E(K) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (2-23)$$

$$E(K) = \frac{\hbar^2}{2m} (K_X^2 + K_Y^2 + K_Z^2) \quad (2-24)$$

Le Modèle des électrons libres est cependant incapable d'expliquer pourquoi certains solides sont des semi-conducteurs ou des isolants. C'est l'un de ses plus grands défauts.

2.4.2 Méthodes de calcul des électrons presque libres :

Ce Modèle donne de bons résultats, pour les métaux dont les cœurs ioniques ne sont pas en contact.

Dans l'approximation des électrons presque libres, on suppose que l'interaction avec le champ périodique du réseau est beaucoup plus faible que l'énergie cinétique de cet électron et que l'influence du potentiel du réseau est similaire à une perturbation périodique.

Dans cette méthode, les électrons sont presque libres, ce qui revient à dire, qu'ils sont faiblement liés, donc, il suffit d'une faible énergie pour qu'ils se déplacent à la bande de conduction. Ceci se traduit aussi par, l'existence d'un potentiel périodique du cristal qui est faible, et qui va être considéré comme perturbation périodique du réseau.

L'Hamiltonien aura la forme :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W(r) \quad (2-25)$$

$W(r)$: Potentiel de perturbation périodique du cristal.

La différence entre la méthode des électrons libres et la méthode des électrons presque libres réside dans l'ajout d'un potentiel de perturbation dans l'Hamiltonien, donc, pour un traitement efficace, on utilise la théorie de perturbation du premier et second degré.

La théorie de perturbation permet de déterminer les corrections portées sur l'énergie $E^{(0)}$ et la fonction $\psi^{(0)}$ d'un système d'électrons libres sur lequel est introduite une perturbation.

$$E(k) = E^{(0)}(k) + E^{(1)}(k) + E^{(2)}(k) \quad (2-26)$$

$$\psi(r) = \psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r) + \psi^{(2)}(r) \quad (2.27)$$

Avec :

$$E^{(1)}(k) = \langle \psi_{k'}^{(0)} | V(r) | \psi_k^{(0)} \rangle \quad (2-28)$$

$$E^{(2)}(k) = \sum_{k \neq k'} \frac{|\langle \psi_{k'}^{(0)} | V(r) | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \quad (2-29)$$

L'équation de Schrödinger d'une particule libre est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^{(0)}(r) = E^{(0)} \psi(r) \quad (2-30)$$

A l'approximation zéro, l'énergie et la fonction d'onde ont la forme :

$$E^{(0)}(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2-31)$$

$$\psi^{(0)}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \quad (2-32)$$

Où :

V : Volume total du cristal.

Les fonctions $\psi^{(0)}(r)$ sont orthonormées. Le potentiel périodique du cristal $V(r)$ peut se mettre sous la forme d'une série de Fourier :

$$V(r) = \sum_G V(G) e^{iG \frac{2\pi r}{a}} \quad (2-33)$$

On remplace l'équation (2-32) et (2-33) dans (2-28) :

$$E^{(1)}(k) = \int \psi_{k'}^{(0)} V(r) \psi_k^{(0)} dr = W_{kk'} \quad (2-34)$$

$$E^{(1)}(k) = \begin{cases} 0 \text{ pour } k \neq \frac{n\pi}{a} \\ \pm V_G \text{ pour } k = \frac{n\pi}{a} \end{cases} \quad (2-35)$$

Le même travail se fait pour l'équation (2-36):

$$E^{(2)}(k) = \sum_{k \neq k'} \frac{|W_{kk'}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \quad (2-36)$$

Ainsi l'énergie totale du système aura la forme :

$$E(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + W_{kk'} + \sum_{k \neq k'} \frac{|W_{kk'}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \quad (2-37)$$

Et la correction apportée à l'état de la particule dans le cadre du traitement de la perturbation est donnée par :

$$\psi(r) = \psi_k^{(0)}(r) + \sum_{k \neq k'} \frac{|\langle \psi_{k'}^{(0)} | V(r) | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \psi_{k'}^{(0)}(r) \quad (2-38)$$

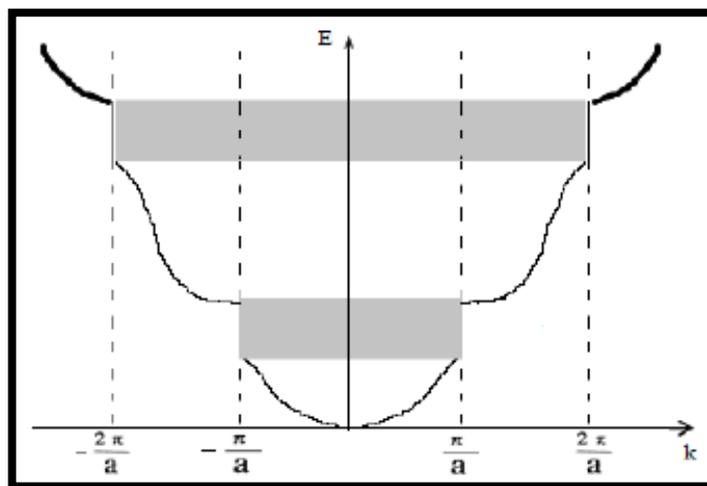


Figure 2. 1 : La création des gaps énergétiques.

Dans certains cas, les corrections portées sur les énergies sont négligeables et leurs spectres inchangés. Par contre, dans d'autres cas, le spectre est fortement modifié qu'il apparait ce qu'on appelle les bandes interdites (souvent appelé gap énergétique) aux limites de la zone de Brillouin.

Ce modèle s'applique principalement aux structures cristallines compactes.

Cependant, le succès inespéré de la méthode des électrons presque libres pour le spectre d'énergie des métaux normaux suggère qu'il suffit de calculer ce spectre à partir d'un «pseudopotentiel» petit par rapport au potentiel du cristal.

2.4.3 Méthodes de calcul des ondes planes :

Cette méthode constitue la base d'un ensemble de méthodes dites des ondes planes telles que la méthode des ondes planes orthogonalisée et celle des ondes planes augmentées.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger, en tenant compte de la périodicité du réseau cristallin, on choisit une forme particulière de la fonction d'onde établie par Bloch.

$$\psi_k(r) = U_k(r)e^{ikr} \quad (2-39)$$

$$U_k(r) = \sum_G C_G e^{iGr} \quad (2-40)$$

Avec :

G : Vecteur du réseau réciproque définit par $\vec{G} \cdot \vec{R} = \frac{2\pi}{m}$.

m : Entier naturel.

De même le potentiel périodique du cristal $V(r)$ peut être décomposé en série de Fourier [5]:

$$V(r) = \sum_G V(G)e^{iGr} \quad (2-41)$$

En remplaçant les équations II.39 et II.41 dans l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (2-42)$$

En multipliant par $e^{ik'r}$ et en intégrant sur d^3r on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} C(k')k'^2 + \sum_G C(k' - G)V(G) = E(k)C(k) \quad (2-43)$$

En supposant que les $V(G)$ sont connus, on peut calculer les $E(k)$ puis déterminer les $C(k')$.

2.4.4 Méthode de calcul des ondes planes augmentées :

La méthode APW (Augmented Plane Waves) a été imaginée pour palier au problème des conditions aux limites inhérentes de la méthode cellulaire.

La difficulté essentielle dans le calcul des bandes d'énergies provient du fait que les ondes planes permettent de satisfaire simplement les conditions aux limites imposées par le théorème de Bloch, mais que leur développement converge mal à l'intérieur d'une cellule atomique. C'est pour cela que Slater a proposé de développer la fonction d'onde en une plane à l'extérieur des cellules atomiques et en une somme d'harmoniques sphériques à l'intérieur. Pour cela, on construit un recouvrement et que l'on puisse supposer que le potentiel à l'intérieur de chaque sphère ait la symétrie sphérique et soit constant entre les sphères. La procédure la plus usuelle consiste à prendre le potentiel cristallin réel et l'approche par sa forme « muffin tin », qui a la forme :

$$V(r) = \begin{cases} U(r - R) & \text{si } |r - R| < r_0 \\ U(r) = 0 & \text{si } |r - R| > r_0 \end{cases} \quad (2-44)$$

La fonction d'onde du cristal est orientée sous la forme d'une combinaison d'ondes planes dans la région interstitielle et des fonctions d'ondes atomiques à l'intérieur de l'atome.

Ces ondes planes augmentées sont définies par :

$$\varphi_k(r) = \theta(r - r_0)Ae^{ikr} + \sum_n \theta(r_0 - r)\psi_n^a(r)A_n \quad (2-45)$$

Où la fonction heavy side est donnée par :

$$(r - r_0) = \begin{cases} 1 & \text{si } r > r_0 \\ 0 & \text{si } r < r_0 \end{cases} \quad (2-46)$$

La forme d'onde $\psi_k(r)$ est:

$$\psi_k(r) = \sum_k C_k \varphi_{k+K'}(r) \quad (2-47)$$

Avec :

K : vecteur du réseau réciproque.

Cette méthode est utilisée pour les métaux.

Cette méthode nécessite des techniques numériques plus sophistiquées et par suite des machines plus performantes à contraire que la méthode O.P.W (ondes planes orthogonales).

2.4.5 Méthodes de calcul des ondes planes orthogonales :

Cette méthode a été proposée par Herring en 1940 [5], Elle est utilisée avec succès pour la détermination des structures de bandes des semi-conducteurs, des isolants et des métaux. Elle est bien adaptée à l'étude des bandes de conduction et celle des bandes de valence et un peu moins à celle des états du cœur.

Il propose des ondes planes orthogonales au niveau du cœur et qui ont la forme :

$$\psi_k(r) = e^{ikr} + \sum_C b_n \varphi_k^C(r) \quad (2-48)$$

Où :

C : Définit le cœur.

b_n : Constante calculée par l'orthogonalité de $\psi_k(r)$ avec chaque niveau du cœur.

$\varphi_k^c(r)$: Fonction d'onde atomique.

2.4.6 Méthode des pseudopotentiels :

La méthode du pseudopotentiel utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et de conduction avec les états du cœur. Mais dans le formalisme du pseudopotentiel l'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel.

L'effet d'orthogonalité aux états de cœur revient à extraire du potentiel cristallin la contribution rapidement variable de la région du cœur. Le pseudopotentiel est alors lentement variable et se prête bien à une approche du problème en termes de perturbation [5].

La théorie du pseudopotentiel a été introduite par Fermi en 1934 lors de ses études sur des états des couches minces. Des années plus tard, Helmand proposa une approche pseudo potentielle pour le calcul des niveaux énergétiques dans les métaux alcalins. Et c'est en 1950 que cette théorie s'étend dans un rapport très rapide pour le calcul des énergies et des autres propriétés des semiconducteurs [10].

Le calcul est basé sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW). L'idée de base de cette méthode est d'obtenir les états de valence d'un système (atome, molécule, cristal) sans avoir recours à calculer les états du cœur qui ne sont pas nécessaires pour la description des propriétés physiques. Les électrons du cœur seront supposés gelés et seulement les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électrique. Les coefficients utilisés dans la méthode OPW pour assurer

L'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur, peuvent être utilisés pour construire un potentiel qui est répulsif, et on obtient par l'effet d'annulation un potentiel faible ou pseudopotentiel. On applique cette méthode pour les calculs des structures électroniques des solides et liquides, les vibrations des réseaux, les liaisons et les structures des cristaux, ...etc.

2.4.6.1 Méthode empirique locale :

Cette approche (L'EPM) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux $V(\mathbf{g})$ du pseudopotentiel $V_{ps}(\mathbf{r})$ qui peuvent être écrits dans le réseau réciproque sous la forme [11] :

$$V_{ps}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} V(\mathbf{g}) \exp(i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) \quad (2-49)$$

Avec : $V(\mathbf{g}) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(\mathbf{g}) V_{\alpha}(\mathbf{g})$

$V_{\mathbf{g}}$: Vecteur de réseau réciproque.

$V_{\alpha}(\mathbf{g})$: facteur de forme associé à l'atome α .

$S_{\alpha}(\mathbf{g})$: facteur de structure atomique donnée par :

$$S_{\mathbf{g}}(\mathbf{g}) = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_i \exp(i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_{i\alpha}) \quad (2-50)$$

N_{α} : nombre d'atomes.

$\mathbf{r}_{i\alpha}$: Position de l' $i^{\text{ème}}$ atome de type α .

Dans le cas par exemple d'une structure zinc blende, il y a deux atomes A et B : $\mathbf{r}_A(0, 0, 0)$ et $\mathbf{r}_B(1/4, 1/4, 1/4)a$ (a est le paramètre de réseau), les facteurs de formes et de structure s'écrivent [12] :

$$V(\mathbf{g}) = S_A(\mathbf{g})V_A(\mathbf{g}) + S_B(\mathbf{g})V_B(\mathbf{g}) \quad (2-51)$$

Avec :

- $S_A(\mathbf{g}) = \frac{1}{2} e^{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_A}$
- $S_B(\mathbf{g}) = \frac{1}{2} e^{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_B}$

Le procédé de calcul de l'E.P.M comme le montre le diagramme suivant est choisi $V(\mathbf{g})$. La structure est incluse par le facteur de structure et l'équation de Schrödinger est résolue pour les valeurs propres $E(\mathbf{k})$ d'énergie et les pseudofonctions d'ondes $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$.

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. Généralement un petit nombre d'itération suffit pour concorder entre la théorie et l'expérience [13].

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

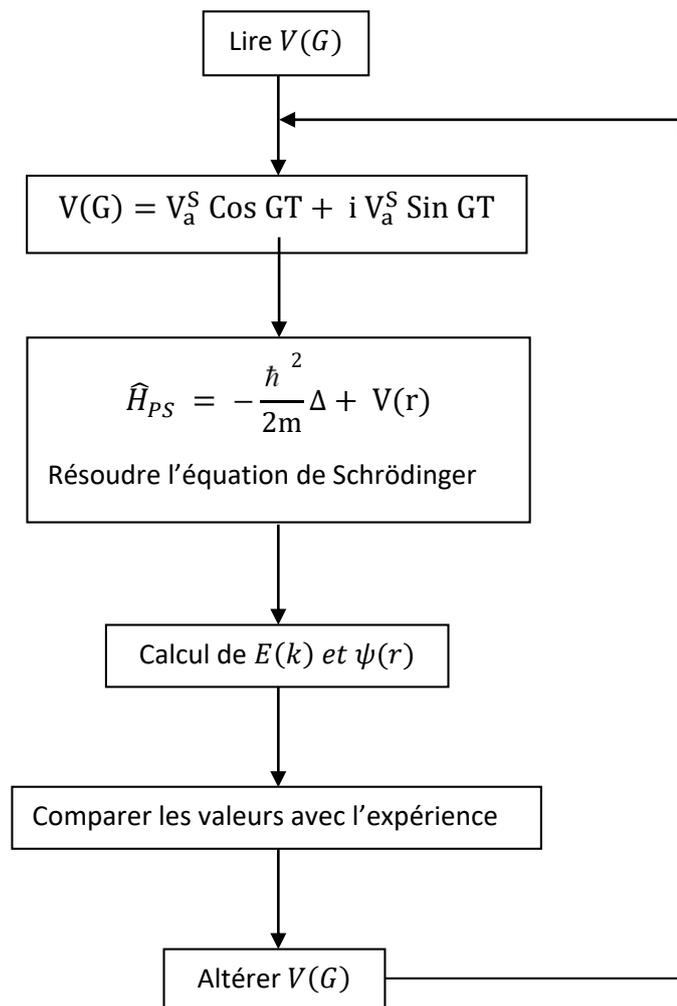


Figure 2. 2 : L'approche du pseudopotentiel empirique local

L'approximation du pseudopotentiel empirique local se base sur le bon choix des facteurs de forme $V(G)$ de la structure de Zinc-blende à étudier et dont on connaît son paramètre de réseau.

On injecte ces paramètres $V(G)$ dans l'équation de Schrödinger, les potentiels construits et après résolution de l'équation séculaire par la méthode des électrons presque libres. Les valeurs propres des énergies E_k , les coefficients des fonctions d'onde μ_k et ψ_k . Ces valeurs sont comparées avec ceux de l'expérience si un grand écart se présente, les facteurs de forme sont modifiés et le processus est répété jusqu'à la convergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées

2.4 Conclusion

Le chapitre 2 présente les méthodes de calcul des structures de bande de ces matériaux. Les méthodes pseudopotentielles sont actuellement les méthodes les plus largement utilisées pour déterminer les structures de bande électronique et d'autres propriétés telles que les bandes interdites.

Le choix de la méthode empirique des pseudopotentiels pour EPM est essentiellement basé sur le fait que les états de valence sont obtenus sans calculer les états de cœur, qui ne sont pas nécessaires pour décrire les propriétés physiques du système. L'état réel est décrit par une pseudo-fonction d'onde, qui est représentée par un nombre fini d'ondes planes dans l'espace de Fourier, minimisant les calculs numériques

Chapitre 3 :

Résultat et discussion

3.1 Introduction :

Les composants électroniques mettent à profit les propriétés des électrons dans les semiconducteurs, par conséquent il est nécessaire de connaître les propriétés électroniques optiques et diélectriques qui conditionnent les caractéristiques de ces composants électroniques.

Dans notre travail on étudie les propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé binaire semiconducteur AlSb. Les calculs sont principalement effectués par la Méthode du Pseudopotentiel Empirique (EPM). Cette méthode a fait preuve d'une efficacité particulière pour l'estimation des gaps énergétiques des composés semiconducteurs.

Nous nous intéressons à l'étude des gaps d'énergies direct et indirect, la structure des bandes en fonction de vecteur d'onde k , la densité de charges électroniques, l'indice de réfraction et les constantes diélectriques à savoir statique et de haute fréquence, du composé binaire semiconducteur AlSb.

3.2 Les propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs :

3.2.1 Etude des propriétés électroniques :

Les calculs sont principalement basés sur la méthode Empirique Pseudopotentiel (EPM). Dans l'EPM, le potentiel du cristal est représenté par une superposition linéaire des pseudopotentiels atomiques qui sont modifiés et ajustés pour avoir les mêmes valeurs du gap d'énergie connus aux points choisis dans la zone de Brillouin.

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

Avec :

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

$V_{ps}^{NL}(r)$: Partie non locale du pseudopotentiel

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

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

Où :

$V(G)$: Facteur de forme.

Les paramètres du pseudopotentiel empirique $V(G)$ sont tirés de la littérature, ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie défini par [14] :

$$\delta = \left[\sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m-n} \right]^2 \quad (3.3)$$

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{exp} - E_{ij}^{cal} \quad (3.4)$$

E_{ij}^{exp} : L'énergie mesurée entre le l'état i avec $k = k_i$ et l'état j avec $k = k_j$ au vecteur dans les m paires choisies (i, j) .

E_{ij}^{cal} : L'énergie calculée entre le l'état i avec $k = k_i$ et l'état j avec $k = k_j$ au vecteur dans les m paires choisies (i, j) .

n : Nombre des paramètres du pseudopotentiel empirique.

Les valeurs des facteurs de forme présent au départ sont améliorées ou modifiées par itérations jusqu'à minimiser le δ .

Les facteurs de formes Pseudopotentiels ajustés du composé binaire semi-conducteur AlSb dans la phase Zinc blende, sont présentés dans le Tableau 3. 1

Tableau 3. 1 : Les facteurs de forme Pseudopotentiels Symétriques et Antisymétriques du binaire AlSb [15]

Composé binaire	Form factors (Ry)						Lattice constant (Å)
	V _S (3)	V _S (8)	V _S (11)	V _A (3)	V _A (4)	V _A (11)	
AlSb	-0.22559	0.02808	0.06223	0.00710	0.05896	0.00454	6.1355
	7	6	0	9	0	4	

3.2.1.1 Gap énergétique pour le composé binaire AlSb :

Pour avoir une idée générale sur les transitions optiques du composé binaire semiconducteur AlSb, on calcul les gaps énergétiques direct E_{Γ}^{Γ} et indirect E_{Γ}^X et E_{Γ}^L .

Pour cela, en injectant les paramètres pseudopotentiels dans le code EPM et dont les valeurs sont représentées dans le Tableau 3. 1, on trouve les gaps d'énergies directs et indirects illustrés au Tableau 3. 2 et qui sont en très bon accord avec l'expérience rapportée par la référence [16] :

Tableau 3. 2 : Les gaps d'énergies calculés et expérimentaux du les composé binaires AlSb

Energies de gap	$E_{\Gamma,\Gamma}$	$E_{\Gamma,X}$	$E_{\Gamma,L}$
Valeur calculée	2.30	1.61	2.21
Valeur expérimentale	2.30 ^a	1.61 ^a	2.2 ^a

^aRef [16]

Après comparaison, on remarque que les valeurs trouvées des gaps énergétiques sont en bon accord avec les valeurs expérimentales.

3.2.1.2 Structure de bandes électroniques :

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction. Ce sont la bande de valence la plus basse, la bande de conduction la plus haute, et la bande interdite qui les sépare. La structure de bandes électroniques détermine principalement les propriétés de transport des semiconducteurs [17].

Pour interpréter la Figure 3.1 qui illustre la structure de bandes du composé binaire *AlSb*, on note que la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence.

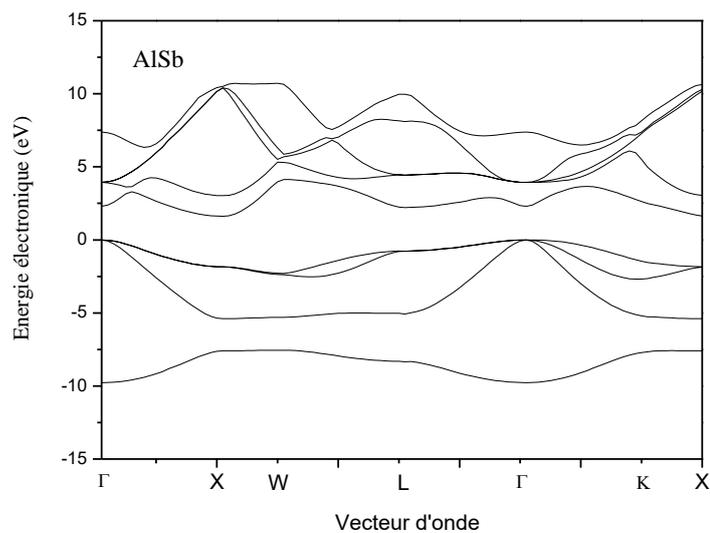


Figure 3. 1 : Structure de bandes du composé binaire *AlSb* en fonction de vecteur d'onde k

Dans la **Figure 3.1** on constate que le maximum de la bande de valence est au point Γ et que le minimum de la bande de conduction est au point X , d'où le composé binaire *AlSb* est un semiconducteur à bande interdite directe, l'écart relevé entre le minimum et le maximum vaut 1.61 eV, et ceci coïncide avec la valeur reportée dans la référence [16].

3.2.1.3 Masse effective :

La masse effective est une propriété importante pour l'étude des phénomènes de transport dans les solides. Un électron dans un état de bande est bien décrit, dans son comportement dynamique, par une masse effective m^* .

La masse effective 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 Γ ($k=0$), 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 $1/m^*$ 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 [16]

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi^2}{h^2} \frac{\delta^2 E(k)}{\delta k^2} \quad (3.5)$$

Tableau 3. 3 : Masse effective du Composé binaire AlSb

Composé binaire	AlSb
Valeur calculée	$0.13m_0$
Valeur expérimentale	$0.14^a m_0$

^aRef [16]

Nos résultats montrent que la masse effective des électrons pour *AlSb* est de $0.13 m_0$, où m_0 est la masse de l'électron libre. Notre valeur est raisonnable avec la valeur expérimentale qui est $0.14 m_0$ [16] rapporté par Adachi pour le composé binaire AlSb.

3.2.1.4 Densité de charges électroniques :

Une des caractéristiques intéressantes que découle de la structure de bande est l'étude de la topologie de la densité de charge électronique et cela par l'utilisation des fonctions d'ondes calculées dans notre cas par la méthode EPM.

La fonction de la probabilité des électrons dans une région spatiale du volume d est donnée par $|\Psi_{n,K}(r)|^2 d\Omega$ pour des électrons dans la bande n et l'état k . La densité de charge pour chaque bande de valence peut être écrite comme : [18]

$$\rho_n(r) = \sum_K e |\Psi_{n,K}(r)|^2 \quad (3-6)$$

La Figure III.2 représente la densité de charge électronique, au point Γ , du composé binaire AlSb.

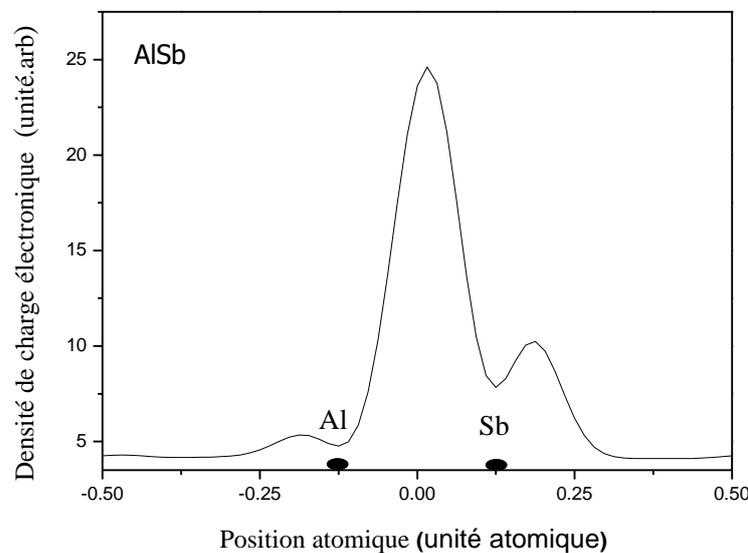


Figure 3. 2 : Densité de charges électroniques de la bande de valence du composé binaire AlSb.

Comme il apparaît clairement sur la figure III.2 de la densité électronique, le maximum de la densité de charges est localisé des côtés des anions (Sb). Une très faible densité se trouve du côté du cation (Al) et presque aucune charge dans les régions interstitielles. Le déplacement du maximum de la densité de charges vers l'anion est dû à une différence entre les potentiels du

cation et de l'anion. Cette distribution asymétrique autour du centre de liaison ainsi que le transfert important de la charge du cation vers l'anion indique que l'anion possède un potentiel plus fort que celui du cation. Cette différence des potentiels est responsable du caractère d'ionicité présent dans la liaison.

La densité de charges électroniques de la première bande de conduction au point Γ du composé binaire AlSb est représentée sur la Figure III.3.

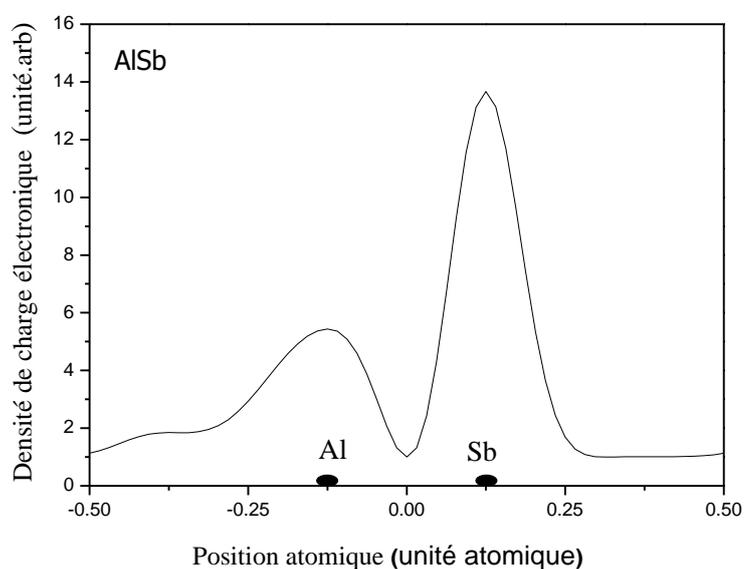


Figure 3. 3 : Densité de charges électroniques de la première bande de Conduction du composé binaire AlSb

On remarque sur la Figure III.3 que la majorité des charges est localisée autour du site de l'anion (Sb), où il atteint son maximum. Par contre la quantité de charges autour du cation (Al) est moins prononcée. Ceci suggère que la distribution de charge de la première bande de conduction est anti-liante. Une faible quantité de charge peut être observée dans les régions interstitielles. On peut conclure que le type de liaison est à caractère ionique.

3.2.2 Etude des propriétés optiques :

3.2.2.1 Indice de réfraction :

L'indice de réfraction permet de décrire le comportement de la lumière dans un milieu différent du vide. La connaissance de l'indice de réfraction (n) des semi-conducteurs est indispensable pour la détermination des propriétés électriques et optiques du cristal. Il est essentiel pour la conception de lasers à hétérostructures optoélectroniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs [19].

L'indice (n) est calculé en utilisant différents modèles suivants :

(i) Modèle de Moss [20] :

$$n^4 E_g = 108 \quad (3-7)$$

(ii) Modèle de Gupta et Ravindra [21] :

$$n = 4.084 - 0.62 E_g \quad (3-8)$$

(iii) Modèle de Hervé et Vandamme [22] :

$$n = \left[1 + \left(\frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3-9)$$

(iv) Modèle de Reddy et Anjaneyulu [23] :

$$E_g e^n = 36.3 \quad (3-10)$$

(v) Modèle de Ravindra [24] :

$$n = 4.16 - 0.85 E_g \quad (3-11)$$

(vi) Modèle de Reddy et Ahammed [25] :

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154 \quad (3-12)$$

Tableau 3. 4 : l'indice de réfraction n du composé binaire AlSb

Composé binaire	n calculé						valeur Exp
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Reddy et Ahammed	
AlSb	2.86	2.78	3.08	2.89	3.11	3.33	3.23 ^a

^aRef [26]

Selon la comparaison des valeurs calculées et des données expérimentales rapportées dans les références [26], On peut dire que, pour le composé binaire AlSb, la valeur de (n) déterminé en utilisant le modèle Reddy et Anjaneyulu est en meilleur accord avec l'expérience que celles calculées à partir des autres modèles.

3.2.3 Etude des propriétés diélectriques :

3.2.3.1 La constante diélectrique de haute fréquence :

Après avoir opté pour le modèle Reddy et Anjaneyulu pour le calcul de l'indice de réfraction, on peut, cependant, calculer la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} qui est considérée comme un paramètre crucial dans la conception des dispositifs optiques. A cet effet, la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} sera calculée à partir de l'expression suivante :

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \quad (3-13)$$

Tableau 3. 5 : Constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞}

Composé binaire	ϵ_{∞} Constante diélectrique de haute fréquence						valeur Exp
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Reddy et Ahammed	
AlSb	8.17	7.73	9.49	8.35	9.67	11.09	9.88 ^a

^aRef [26]

On peut constater que le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique de la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} pour le composé binaire AlSb est donnée par le modèle Reddy et Anjaneyulu.

3.2.3.2 La constante diélectrique statique :

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

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + \nu \tag{3.14}$$

Où ν est donné par la formule suivante :

$$\nu = \frac{a_p^2(1+2a_c^2)}{2a_c^4} \tag{3.15}$$

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

$$a_p = \frac{V_A(3)}{V_S(3)} \tag{3.16}$$

$V_A(3)$ et $V_S(3)$ représentent les facteurs de forme Pseudopotentiels symétrique et antisymétrique respectivement. a_c est la covalence définie comme suit :

$$a_c = \sqrt{1 - a_p^2} \tag{3.17}$$

En utilisant les six modèles, nous avons calculé le constant diélectrique statique pour le composé binaire AlSb, Nos résultats sont indiqués dans le tableau 3.4

Tableau 3. 6 : Constante diélectrique statique ϵ_0

Matériau	Constante diélectrique statique						Valeur Exp
	Moss	Ravindra	Gupta et Ravindra	Hervé et Vadamme	Reddy et Anjneyulu	Reddy et Ahmmed	
AlSb	8.33	7.88	9.68	8.51	9.86	11.31	11.21 ^a

^a : Valeur expérimentale indiquée dans Réf [26]

Nous notons que le modèle qui donne la valeur la plus proche de la valeur expérimentale est le modèle de Reddy et Ahmmed.

3.3 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons utilisé la méthode de Pseudopotentiel pour déterminer, des gaps d'énergies direct et indirect, la structure des bandes en fonction de vecteur d'onde k , la densité de charges électroniques, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence, du composé binaire semiconducteur AlSb.

Conclusion générale

Conclusion générale :

Le calcul de la structure de bande électronique est basé sur un grand nombre d'hypothèses, chacune avec ses propres difficultés, dont la validité doit être testée par l'expérience de régression. Ces méthodes sont adoptées en fonction du type de propriétés à étudier, certaines nécessitent des calculs numériques très lourds, comme les méthodes des premiers principes, d'autres comme EPM peuvent être calculées de façon relativement économique en temps, les paramètres physiques sont basés sur des formes à l'aide d'un nombre réduit de facteurs pour calculer la structure de bande, ce qui est la raison principale qui rend cette méthode pratique.

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode pseudo-potential avec l'approximation (EPM) 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 composé binaire AlSb qui se cristallise dans la structure Zinc-Blend.

Les résultats des calculs montrent que le matériau étudié est du type Gap direct, par conséquent, il a des répercussions importantes sur le domaine de la technologie optoélectronique

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

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

Références bibliographiques

Références bibliographiques :

- [1]. B.E.Kolli, Etude des propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$, Mémoire master, Univ BBA, 2017/2019.
- [2]. F.A.Bouguerra, Contribution à l'étude des propriétés optoélectroniques de l'alliage semi-conducteur ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$, Mémoire master, Univ BBA, 2020/2021.
- [3]. C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique T1 (Hermann, Paris, 1977).
- [4]. A. Aniba, La résolution de problèmes de mécanique quantique avec Hamiltonien dépendant explicitement du temps, Mémoire master, Univ BBA, 2017/2018
- [5]. C. Kittel, « Physique de l'état solide, Ed Dunod, Paris, (2001).
- [6]. C. Alibert, A. Joullié, A. M. Joullié, C. Ance, Phys. Rev. B 27 (1983) 4946.
- [7]. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2001) 5815.
- [8]. S.Wang, Q., Ye, H.Q.: Phys. Rev. B 66, 235111 (2002)
- [9]. V.Gorodysky, Zdansky, K., Pekarek, L., Malina, V., Vackova, S.: Nucl. Instr. Meth. A555, 288 (2005)
- [10]. F. Gautier, Jouranal de physique, C3 (1967).
- [11] A. Continenza, S. Massidda and A. J. Freeman, Phys. Rev. B38 : 12996, 1988.
- [12] S. Froyen, Phys. Rev. B39: 3168, 1989.
- [13] D. Beeman, J. Comput. Phys. 20 : 130, 1976.
- [14] F. Mezrag, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs, (Thèse de doctorat, Université Biskra), (2012).
- [15] N. Bouarissa and R.Bachiri, Physica B: Condensed Matter. 322, 193 (2002).
- [16] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869–4876.
- [17] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 6 Ed. DUNOD (2009)
- [18] N. Bouarissa, H.Baaziz, and Z.Charifi, Phys.Stat.Sol.(b) **231** (2002) 403

- [19] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Energy gap-refractive index relations in semiconductors – an overview, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21–29.
- [20]. T.S. Moss, *Proc. Phys. Soc. B* 63 (1950) 167.
- [21]. V.P. Gupta, N.M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715.
- [22]. P. Hervé, L.K.J. Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [23]. R.R. Reddy, S.Anjaneyulu, *Phys. Stat. Sol. (b)* 174 (1992) K 91.
- [24]. N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, *Infrared Phy.* 19 (1979) 603.
- [25]. N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J.Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [26] M.J. Weber, *Handbook of Optical Materials*, Springer, Berlin, 2003.

Résumé :

Dans notre projet nous avons étudiées les propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs binaires : ALSB. L'importance de ces alliages c'est pour concevoir des dispositifs optoélectroniques comme les diodes électroluminescentes, diodes laser. Nos calculs sont basés sur la méthode du pseudo-potential empirique (EPM) combiné avec l'approximation. Nos résultats en très bon d'accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles.

Abstract:

In this project, we have studied the electronic proprieties of binary semi-conductor alloys ALSb. These alloys are of great interest in disigning optoelectronic devices such as light emitting diodes and laser diodes

Our calculations are based on the Pseudo-Empirical potensiel (EPM) method combined with the approximation. Our results are in very good agreement with the experimental and theoretical resultats available

ملخص :

في هذا البحث قمنا بدراسة الخصائص الالكترونية لسبائك اشباه الموصلات الثنائية. أهمية هذه السبائك تكمن في تصميم الأجهزة الالكترونية الضوئية مثل الثنائيات الباعثة للضوء وثنائيات ليزر. حساباتنا تعتمد على طريقة الإمكانيات التجريبية الزائفة جنباً الى جنب مع التقريب. نتائجنا تتفق بشكل جيد مع النتائج التجريبية والنظرية المتاحة.