

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

- ZIREG LOUBNA
- MOHAMADI LILIA

*Intitulé*

**Etude des propriétés optoélectroniques de  
l'alliage Semi-conducteur ternaire**

**$In_xGa_{1-x}Sb$**

*Evalué le : 15/09/2021*

*Par la commission d'évaluation composée de :*

<i>Nom &amp; Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
<i>M. Mme F. Khaled</i>	<i>MCB</i>	<i>Président</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>M. Dr FARES FAHIMA</i>	<i>MCB</i>	<i>Encadreur</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>M. Dr A. Djemouai</i>	<i>MCB</i>	<i>Examineur</i>	<i>Univ-BBA</i>

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

# Didicaces

*Je tiens à dédier ce travail aux personnes les plus chères à mon cœur, mon père (que dieu bénisse son âme), ma mère.*

*Une spéciale dédicace pour mon mari Zidane.*

*A mes anges Saif, Dhiaa.*

*A mes petites roses Meriem, Maria, Mélissa.*

*A toute ma famille.*

*Sans oublier toute la promotion 2021*

*Surtout Lilia Mohamadi qui m'a accompagné tout au long de cette année.*

**Linda**

# Didicaces

*Ce travail est dédié aux membres de ma famille présents ou partis :*

*À mes parents, À mes parents de mon mari.*

*Une spéciale dédicace pour mon mari Ammar.*

*Mes enfants Hadjer.Meriem.Mohamed et Abd arahmane.*

*À tous mes collègues (les enseignants de l'institut BBA1).*

*À tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.*

*Je dédie ce modeste travail aux enseignants de département de l'électronique. Sans oublier toute la promotion 2021*

*Sur tout Loubna Zireg qui m'a soutenu et accompagné tout au long de cette année.*

**Lilia**

# Remerciements

*Avant tous nous remercions Dieu le tout puissant de nous avoir donné le privilège et la chance d'étudier et de suivre le chemin de la science et de la connaissance après des années.*

*Nous adressons notre vif remerciement à notre encadreur le Professeur Madame F.FARES pour son compréhension et son conseil et son aide précieuse.*

*Nous tenons également à remercier le Professeur Madame F.KHALED pour sa gentillesse et son orientation efficace.*

*Nous adressons également notre profonde gratitude à tous les professeurs de l'université de BORDJ BOUARRERIDJ en particulier ceux du département D'ELECTRONIQUE.*

*Enfin, nous remercions toutes les personnes, de près ou de loin, qui ont contribué à l'élaboration de ce mémoire*

***Merci à tout le monde***

## Table de matière

Dédicace	
Remerciement	
Tables des matières	
Liste des figures et tableaux	

### Introduction Générale

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

### Chapitre I : Notions générales sur les semi-conducteurs

I.1.Introduction.....	2
I.2. Semi-conducteurs en général.....	2
I.2.1. La notion de bandes d'énergie.....	2
I.2.2. Bande interdite (gap énergétique) .....	2
I.2.3. Différentes types des semi-conducteurs.....	3
a- Semi-conducteur intrinsèque.....	3
b- Semi-conducteurs extrinsèques.....	3
I.2.4. Les matériaux semi-conducteurs .....	4
a- Semi-conducteurs intrinsèques simples .....	4
b- Semi-conducteurs intrinsèques composés .....	5
I.3. Les Propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs .....	5
I.3. 1.Propriétés électroniques.....	5
I.3.2. Propriétés optiques.....	6
a- coefficient de réflexion.....	6
b- L'indice de réfraction.....	6
c- La masse effective.....	7
I.3.3. Propriétés structurales.....	8

a- Structure Zinc Blende.....	9
b- La constante de maille.....	9
I.4. Semi-conducteurs III-V.....	9
I.4.1. Les alliages semi-conducteurs: .....	10
a- présentation du matériau $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .....	10
b-Présentation des alliages binaires InSb et GaSb.....	10
I.5.Propriétés des ternaires.....	11
I.6.Intérêt technologique des alliages semi-conducteurs.....	12
Conclusion.....	13

### **Chapitre II : Les méthodes de calcul des bandes d'énergies**

II.1.Introduction.....	14
II.2. Equation de Schrödinger.....	14
II.3. Les pproximations.....	15
II.3.1.L'approximation de Born Oppenheimer.....	15
II.3. 2.L'approximation de Hartree.....	16
II.4. La méthode des pseudopotentiels.....	16
II.4. 1. Concept du pseudopotentiel.....	16
La méthode du pseudopotentiel local.....	19
Conclusion.....	25

### **Chapitre III : Résultats et discussions**

III.1.Introduction.....	26
III.2.Etude des propriétés électroniques.....	26
III.2.1.Les facteurs de forme .....	28
III.2.2.Gap énergétique pour l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .....	29
III.2.3. La masse effective des électrons .....	34
III.2.4.La structure de bande d'énergie .....	35

III.3. Etude des propriétés optiques .....	37
III.3. 1. Indice de réfraction .....	37
III.4. Etude des propriétés diélectriques .....	41
III.4.1. Constante diélectrique de haute fréquence .....	41
Conclusion .....	42

**Conclusion Générale**

Conclusion Générale.....	43
--------------------------	----

Références bibliographiques

Résumé



Liste des figures	Page
<b>Figure I-1</b> : Les structures des bandes énergétiques : Métal, semi-conducteur, isolant.....	3
<b>Figure I-2</b> : Silicium dopé au Phosphore (dopage n) : a T=0K et b T≠0.....	4
<b>Figure I-3</b> : Silicium dopé au Bore (dopage p) : a T=0K et b T≠0K.....	4
<b>Figure I-4</b> : Structure de bande a) gap direct b) gap indirect.....	5
<b>Figure I-5</b> : Structure zinc blende référence.....	8
<b>Figure I-6</b> : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel.....	9
<b>Figure I-7</b> : Extrait de la classification périodique des éléments.....	10
<b>Figure. I-8</b> : Structure cristalline de InSb.....	11
<b>Figure. I-9</b> : Structure cristalline de GaSb.....	11
<b>Figure II-1</b> : Potentiel d'interaction de deux atomes en fonction de la distance atomique.....	17
<b>Figure II-2</b> : La fonction d'onde et le potentiel.....	19
<b>Figure II-3</b> : Diagramme bloc de la méthode E. P.M local.....	24
<b>Figure III-1</b> : La variation du gap fondamental ( $E_F^I$ ) de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x.....	30
<b>Figure III-2</b> : La variation du gap ( $E_F^X$ ) de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x.....	31
<b>Figure III-3</b> : La variation du gap ( $E_F^I$ ) de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x.....	32
<b>Figure III-4</b> : La variation du gap direct ( $E_F^I$ ) et des gaps indirects ( $E_F^X$ ), ( $E_F^I$ ) de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x.....	33
<b>Figure III-5</b> : La variation de la masse effective de l'électron dans $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x en indium.....	35
<b>Figure III-6</b> : Structure de bande électronique du composé binaire InSb.....	36
<b>Figure III-7</b> : Structure de bande électronique du composé binaire GaSb.....	36
<b>Figure III-8</b> : Structure de bande électronique de l'alliage ternaire $In_{0.5}Ga_{0.5}Sb$ .....	37
<b>Figure III-9</b> : la variation de l'indice de réfraction de $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x du l'indium des cinq modèles.....	40
<b>Figure III-10</b> : La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ .....	42

### Liste des tableaux

<b>Tableau III-1</b> : Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés GaSb, InSb.....	28
<b>Tableau III-2</b> : Les variations des gaps énergétiques de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ .....	29
<b>Tableau III-3</b> : Calcul des indices de réfraction de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x du l'indium.....	39
<b>Tableau III-4</b> : Calcul de la variation pour chaque indice de réfraction de l'alliage $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la composition x du l'indium.....	39

# ***Introduction Générale***

### Introduction générale

L'usage et la connaissance de matériaux aux propriétés particulières a favorisé l'innovation technologique, qui a introduit dans notre environnement d'innombrables instruments et outils renfermant des mystères électroniques. Parmi ceux-ci, les semi-conducteurs qui sont des matériaux clés des techniques actuelles, vu la richesse de leur comportement vis-à-vis des sollicitations auxquelles ils sont soumis.

Toute fois ils sont par excellence les matériaux de l'optoélectronique permettant de contrôler les électrons pour la détection, la modulation et l'émission de la lumière, en d'autres termes, ils servent à réaliser des composants et systèmes optiques.

Les propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs peuvent être améliorées par l'emploi des alliages ternaires semi-conducteurs de la forme  $A_xB_{1-x}C$ , qui présentent l'avantage de contrôler indépendamment le paramètre cristallin et la largeur de la bande interdite.

Du côté théorique, les méthodes de calcul de la structure électronique peuvent fournir des données complémentaires importantes au travail expérimental. Les calculs basés sur la méthode de pseudo-potential empirique (E.P.M), combinée avec l'approximation du cristal virtuel est la méthode la plus simple et rapide. Les semi-conducteurs III-Sb ont attirés beaucoup d'attention pour leur application potentielle dans des dispositifs optiques infrarouges.

Notre travail de mémoire est consacré à l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs ternaires  $In_xGa_{1-x}Sb$  du type III-V cristallisant dans la structure zinc-blende. Le but du travail est l'investigation des paramètres de la structure de bandes électroniques, à savoir les gaps énergétiques, l'indice de réfraction, la constante diélectrique statique. Nous avons subdivisé ce manuscrit en trois chapitres :

- Dans le premier chapitre nous avons présenté quelques généralités sur les propriétés physiques des semi-conducteurs.
- Le deuxième chapitre sera consacré aux méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergies électroniques.
- Le troisième chapitre sera réservé à la partie pratique de ce travail. Finalement, une conclusion générale sera exposée.

***Chapitre I :***  
*Notions générales sur les*  
*semi-conducteurs*

**I.1.Introduction**

Les matériaux sont présentés dans de multiples domaines et prennent une place plus importante dans le système que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour. Elles sont subdivisées en trois classes : conducteurs, semi-conducteurs et isolants [1].

Dans ce chapitre nous allons donner une définition de semi-conducteur et les propriétés électroniques et optiques, ainsi que la structure zinc blende, puis le type de semi-conducteurs III-V et la théorie des alliages. On le terminera par une conclusion.

**I.2. Semi-conducteurs en général**

Un semi-conducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductivité électrique sont intermédiaires entre celles des isolants et des conducteurs, elles varient très sensiblement sous l'influence des facteurs extérieurs de l'environnement (température, pression...), de la présence des impuretés (dopage, défauts du réseau), et de la lumière [2].

**I.2.1. La notion de bandes d'énergie**

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes qui est un modèle quantique en physique des solides, déterminant les énergies permises des électrons dans un solide et permet de comprendre la notion de conductivité électrique, Cette théorie est issue de la théorie des orbitales moléculaires.

**I.2.2. Bande interdite (gap énergétique)**

Dans un semi-conducteur comme dans un isolant, l'écart énergétique entre la bande de conduction et la bande de valence est appelé largeur de bande interdite, ou tout simplement gap noté  $E_g$ , dans lequel, un porteur de charge ne peut se retrouver.

C'est un paramètre fondamental, déterminant les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs et évaluant ainsi, leur domaine d'application.

Une structure des bandes comparative des trois types de matériaux métal, semi-conducteur et isolant est représentée sur la figure (I-1).

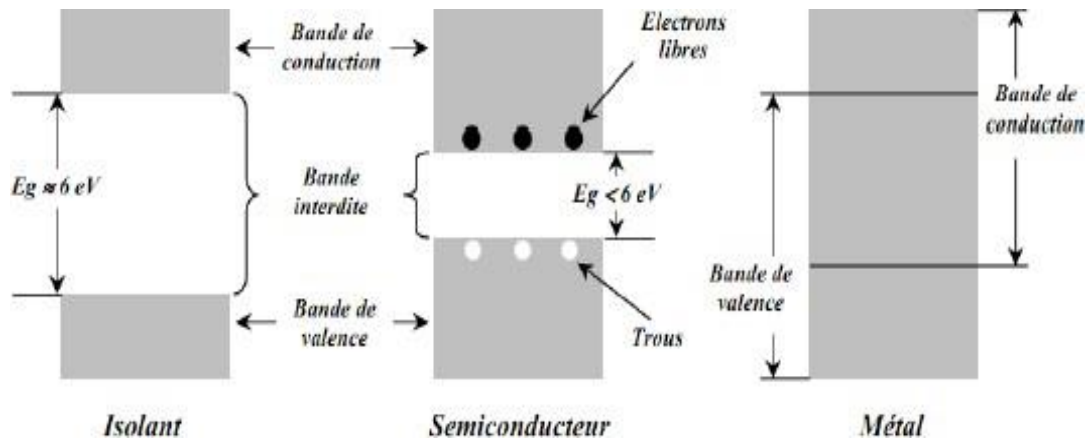


Figure I-1 : Les structures des bandes énergétiques : Métal, semi-conducteur, isolant [3].

### I.2.3. Différents types des semi-conducteurs

#### a- Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés est très faible (moins d'un atome pour l'élément semi-conducteur).

#### b- Semi-conducteur extrinsèque

Un semi-conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semi-conducteur intrinsèque (un atome pour  $10^5$  atomes de l'élément Semi-conducteur). Selon la nature des impuretés il existe deux types des semi-conducteurs : type n et type p.

##### b.1. Les semi-conducteurs extrinsèques dopés N

Considérons par exemple les semi-conducteurs tétravalents tels que Si ou Ge. Ils cristallisent dans une structure où chaque atome est relié à quatre atomes voisins par des liaisons covalentes. Introduisons un atome ayant cinq électrons de valence (phosphore, arsenic antimoine...). Il prend la place d'un atome du cristal. Parmi les électrons de l'impureté, quatre

participeront aux liaisons avec les voisins et le cinquième restera célibataire. L'atome d'impureté est associé à un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semi-conducteur est dit de type N.

## b.2. Les semi-conducteurs extrinsèques dopés P

Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore aluminium ou galium). Celui-ci ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semi-conducteur est dit de type P [4].

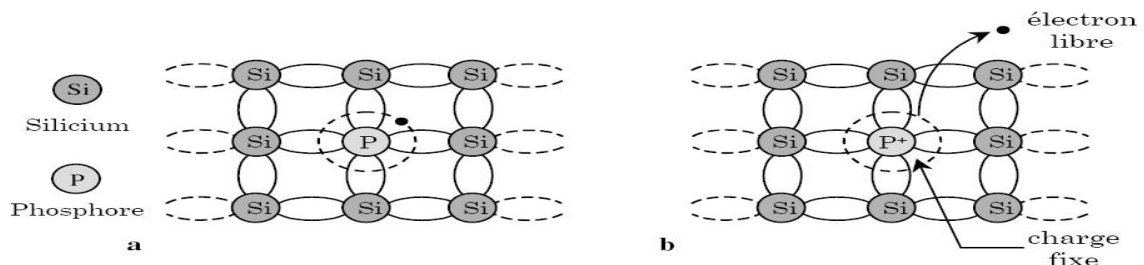


Figure I-2 :Silicium dopé au Phosphore (dopage n) : a  $T = 0K$  et b  $T \neq 0$

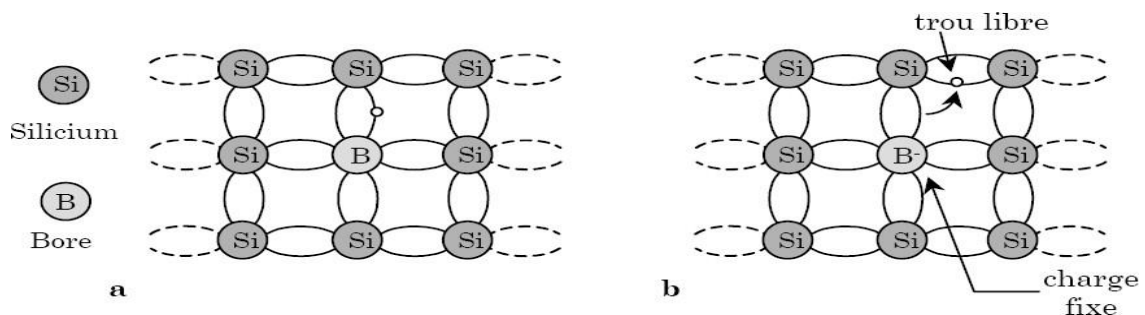


Figure I-3 :Silicium dopé au Bore (dopage p) : a  $T = 0K$  et b  $T \neq 0K$ .

## I.2.4. Les matériaux semi-conducteurs

La famille des semi-conducteurs est très vaste. Les semi-conducteurs sont classés selon leur composition chimique. Il existe :

### a. Semi-conducteurs intrinsèques simples

Un semi-conducteur intrinsèque simple est constitué d'un seul élément tels que les semi-conducteurs de la colonne IV de la classification périodique par exemple ; le silicium (Si) et de Germanium (Ge).

## b. Semi-conducteurs intrinsèques composés

Dans cette catégorie, le semi-conducteur est constitué d'au moins deux types d'atomes différents. Les semi-conducteurs binaires de la classe (II-VI) sont constitués d'un élément de la colonne II et d'un autre élément de la colonne VI de la classification périodique. Les semi-conducteurs de la classe (III-V) sont composés d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique. Conducteurs de la classe (IV-VI).

Il existe aussi d'autres types de semi-conducteurs composés de trois atomes différents (*ternaires*) et même de quatre atomes (*quaternaires*).

## I.3. Les Propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs

### I.3.1. Propriétés électroniques

Le comportement des semi-conducteurs, comme celui des métaux et des isolants est décrit via la théorie des bandes. Ce modèle stipule qu'un électron dans un solide ne peut que prendre des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles que l'on nomme « bandes », plus spécifiquement bandes permises, lesquelles sont séparées par d'autres « bandes » appelées bandes d'énergie interdites ou bandes interdites. Deux bandes d'énergie permises jouent un rôle particulier : « bande de valence » et la « bande de conduction ».

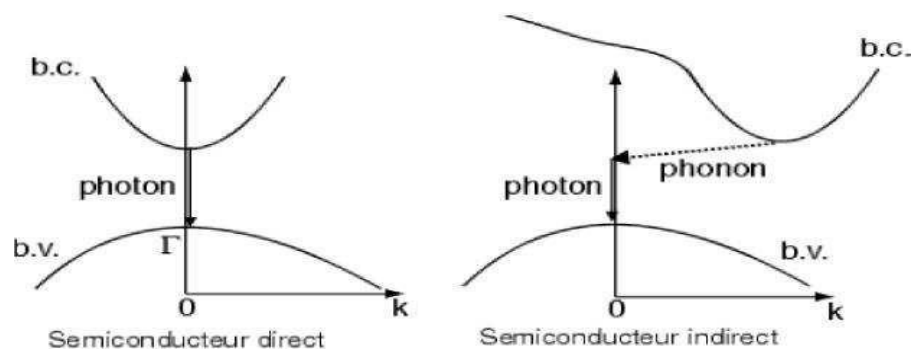


Figure I-4 : Structure de bande a) gap direct b) gap indirect

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



porteurs type p pour la bande de valence et type n pour la bande de conduction sont importantes.

### I.3.2. 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 [3].

Dans cette partie, nous verrons que notre connaissance du comportement des électrons va jusqu'à nous expliquer la réflexion de la lumière par certains solides, alors que quelques-uns l'absorbent et que d'autres sont transparents. Elle nous apporte aussi l'explication pour certains solides de pouvoir sous certaines conditions, émettre de la lumière.

#### a- coefficient de réflexion

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

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

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

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

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

#### b- L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau à posséder pour ralentir et à dévier la lumière. Cet indice de réfraction (noté  $n$ ) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ( $c=299\,792\,458$  km/s) et la vitesse de la lumière dans le matériau, on peut exprimer l'indice de réfraction sous une forme complexe comme suite [5] :

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (\text{I.3})$$

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

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

### c- La masse effective

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

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

$$E(k) \approx E(k_0) + \left( \frac{d^2(k)}{dk^2} \right) k = k_0 \quad (\text{I.4})$$

$$(k - k_0)^2 = E(k_0) + A(k - k_0)^2 \quad (\text{I.5})$$

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

La masse effective de l'électron par la relation :

$$\frac{\hbar^2}{2m_e^*} = A = \left( \frac{d^2(k)}{dk^2} \right) k = k_0 \quad (\text{I.6})$$

Soit :

$$\left( \frac{1}{m_e^*} \right) = \frac{2}{\hbar^2} \left( \frac{d^2(k)}{dk^2} \right) \quad (\text{I.7})$$

Et écrire :

$$E(k) \approx E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (k - k_0)^2 \quad (\text{I.8})$$

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

$$Vg = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} E(k) \approx \frac{\hbar(k-k_0)}{m_e^*} \quad (\text{I.9})$$

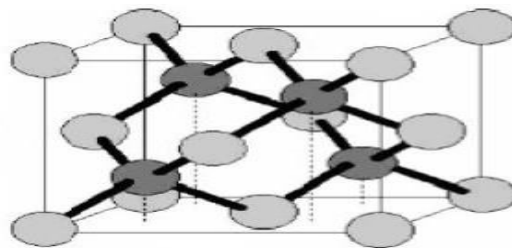
La masse effective dépend de l'énergie d'interaction avec son environnement, donc de  $k$ .

### I.3.3 Propriétés structurales

L'état cristallin se distingue des autres états solides par le fait que, les atomes s'organisent suivant un ordre défini. Cet état est engendré par la répétition périodique d'atome ou de groupement d'atomes (de même nature ou de nature différente) appelé motif du cristal ou maille, suivant les trois directions de l'espace et qui permet, par translation, de générer la structure cristalline. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes [6].

#### a- Structure Zinc Blende

La plupart des matériaux semi-conducteurs binaires ont une structure Zinc-Blende (ZB). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées.



**Figure I-5 :** Structure zinc blende référence

Comme nous pouvons le voir sur la figure I-5, la maille blende revient à une cubique à face centrée dans laquelle les sites tétraédriques non contigus sont tous occupés, soit une multiplicité de 8 atomes par maille (dont autant de cations que d'anions). Le rôle des deux ions étant symétriques, la maille blende se décompose donc en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées imbriqués, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube, l'une étant occupé par

l'anion (P, As ou Sb), l'autre par le cation (Al, Ga ou In).

### b- La constante de maille

La constante de maille est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives, notée  $a$  [7]. La détermination de la constante de maille est la première étape à faire pour déterminer la structure d'un cristal. La connaissance de cette constante de maille permet de calculer la densité des atomes et donc également la densité électronique, il peut varier en fonction de la température et de la pression [2].

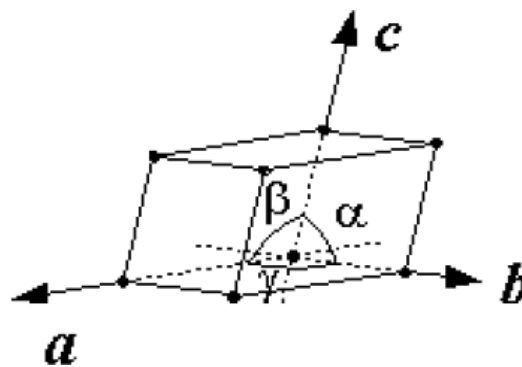


Figure I-6 : Réseau triclinique primitif de l'espace tridimensionnel

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

Après les spectaculaires résultats enregistrés dans la technologie Silicium dans le domaine de la microélectronique, la recherche de composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

C'est alors qu'une nouvelle classe de matériaux fait son apparition, basés sur la création d'un potentiel dans un cristal par:

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

### I.4.1. Les alliages semi-conducteurs

Les alliages semi-conducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant le nombre de constituants [8] :

- Alliage binaire de la forme AB.
- Alliage ternaire : lorsque deux éléments binaires AB et AC sont associés, ces alliages sont caractérisés par la concentration x.
- Alliage quaternaires : ce type d'alliages semi-conducteurs fait intervenir quatre composés binaires et caractérisé par la présence de deux différentes concentrations x et y.

#### a- présentation du matériau $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$

L'alliage ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  se compose de deux composés binaires : l'Antimoniure d'Indium (InSb) et l'Antimoniure de Gallium (GaSb). Ces deux composés appartiennent aux matériaux semi-conducteurs III-V. Ce groupe des semi-conducteurs est constitué des éléments des colonnes III et V de la classification périodique des éléments.

13	IIIA	14	IVA	15	VA
5 10.811 <b>B</b> BORE		6 12.011 <b>C</b> CARBONE		7 14.007 <b>N</b> AZOTE	
13 26.982 <b>Al</b> ALUMINIUM		14 28.086 <b>Si</b> SILICIUM		15 30.974 <b>P</b> PHOSPHORE	
31 69.723 <b>Ga</b> GALLIUM		32 72.64 <b>Ge</b> GERMANIUM		33 74.922 <b>As</b> ARSENIC	
49 114.82 <b>In</b> INDIUM		50 118.71 <b>Sn</b> ETAİN		51 121.76 <b>Sb</b> ANTIMOINE	

Figure I-7 : Extrait de la classification périodique des éléments [13].

#### b- Présentation des alliages binaires InSb et GaSb

➤ **InSb**: L'antimoniure d'indium (InSb) est un composé semi-conducteur III-V constitué de l'antimoine et de l'indium. C'est un composé à gap étroit utilisé généralement comme détecteur infrarouge, notamment en imagerie thermique, dans les systèmes de guidage autodirecteur infrarouge et en astronomie infrarouge. Les détecteurs à base d'antimoniure d'indium sont

sensibles aux longueurs d'ondes comprises entre 1 et 5  $\mu\text{m}$ . D'une structure de type «zinc-blende », c'est-à-dire deux mailles cubique faces centrées (cfc) de chacun des deux composants imbriquées et décalées d'un vecteur  $(1/4;1/4;1/4)$  [9]. illustré dans la figure suivante :

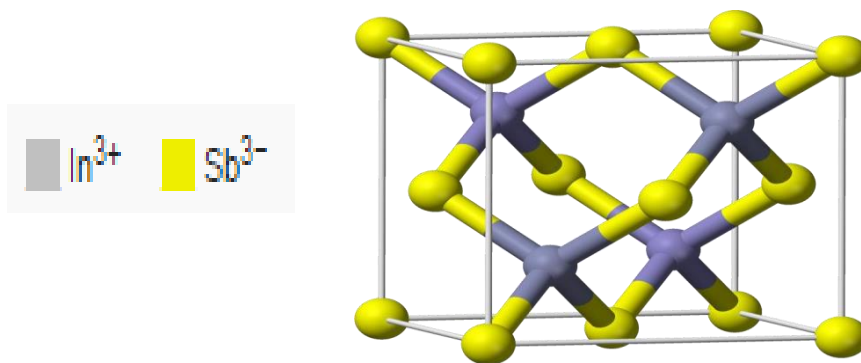


Figure I-8: Structure cristalline de InSb [9]

➤ **GaSb**: l'antimoniure de gallium est un composé chimique de formule brute (GaSb). Il s'agit d'un semi-conducteur III-V diamagnétique, C'est un matériau privilégié pour la réalisation de photo-détecteurs infrarouges, de diodes électroluminescentes infrarouges, voire de cellules thermo-photovoltaïques [9].

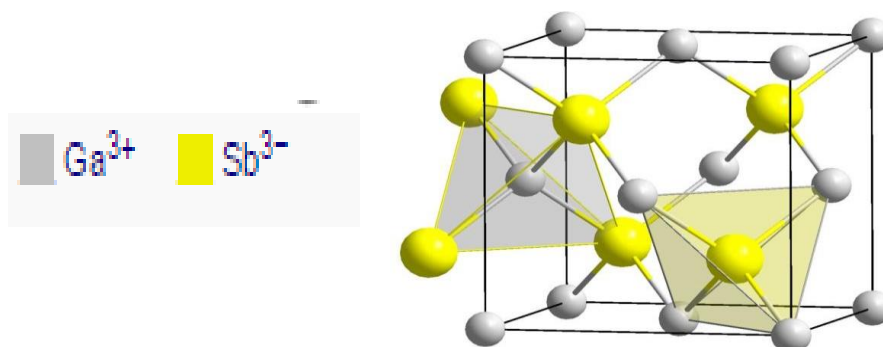


Figure I-9: Structure cristalline de GaSb [25]

### 1.5. Propriétés des ternaires

Les alliages ternaires ( $A_{1-x}B_xC$ ) contiennent deux composés binaires AC et BC à condition qu'il y ait un axe de maille avec le substrat, le paramètre de maille est donné par la relation suivante [10] :

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

x : composition de l'alliage

Où l'accorde de maille se fait par la relation suivant :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a(\text{substrat}) - a(A_{1-x}B_xC)}{a(\text{substrat})} \quad (\text{I.11})$$

L'énergie du gap de l'alliage et de forme suivante [27]

$$E_g(A_xB_{1-x}C) = (1-x)E_g(BC) + xE_g(AC) - x(1-x)C_{ABC} \quad (\text{I.12})$$

### 1.6. Intérêt technologique des alliages semi-conducteurs

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. Tel que l'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure des bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphore de gallium entrent dans cette catégorie, ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth, etc. donnent des composés à caractère métallique. On considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb), ou d'indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes.

Les semi-conducteurs III-V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés :

- ils sont robustes
- ils possèdent une conductivité thermique élevée
- leur point de fusion est élevé
- ils ont une bande interdite directe

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé

par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne.

**Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons regroupé quelques propriétés générales des matériaux semi-conducteurs. La théorie des alliages semi-conducteurs et la connaissance de ces propriétés représente un intérêt fondamental dans la détermination des structures électroniques et atomiques de ces semi-conducteurs.



***Chapitre II :***  
*Les méthodes de calcul  
des bandes d'énergies*

### II.1. Introduction

La connaissance de la structure électronique a un rôle déterminant dans la compréhension des propriétés physiques et chimiques des matériaux. Le calcul de la structure électronique d'un cristal revient à résoudre le problème des interactions entre, un grand nombre de noyaux et d'électrons, ce qui rend la résolution de l'équation de Schrödinger impossible.

Dans ce chapitre nous allons présenter La méthode empirique des pseudopotentiels (E.P.M), cette méthode fait partie des méthodes ab-initio qui constituent un outil puissant pour prédire les propriétés structurales et électroniques des matériaux et donne dans une grande majorité de cas, des résultats satisfaisants.

### II.2. Equation de Schrödinger

La résolution de l'équation de Schrödinger pour un tel système est extrêmement difficile comme l'a déclaré Dirac en 1929 :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{II.1})$$

E: Energie totale du système.  $\psi$  : Fonction d'onde (Fonction propre).  $H$  : L'opérateur Hamiltonien [1].

L'hamiltonien exact pour ce système composé de cinq termes : l'énergie cinétique des noyaux et celle des électrons, ainsi que les différentes interactions entre eux :

$$H_{tot} = T_e + T_n + V_{n-n} + V_{n-e} + V_{e-e} \quad (\text{II.2})$$

Avec:

$$T_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \quad : \text{Energie cinétiques des électrons.}$$

$$T_n = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2} \nabla_I^2 \quad : \text{Energie cinétiques des noyaux.}$$

$$V_{n-n} = -\sum_{I < J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad : \text{Energie potentielle d'interaction entre les noyaux.}$$

$$V_{n-e} = \frac{1}{2} \sum_{I,i} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} \quad : \text{Energie potentielle d'interaction noyaux-électrons.}$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad : \text{Energie potentielle de répulsions entre les électrons.}$$

L'équation de Schrödinger s'écrit donc sous la forme suivante : [11]

$$H\Psi = \left[ -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I \frac{\hbar^2}{2} \nabla_I^2 - \sum_{I < J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} + \frac{1}{2} \sum_{I,i} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \Psi = E\Psi \quad (\text{II.3})$$

Pour résoudre cette équation on a recours à certaines approches.

### II.3. Les approximations

#### II.3. 1. L'approximation de Born Oppenheimer

Suivant Born et Oppenheimer [12], on commence par négliger le mouvement des noyaux par rapport à celui des électrons. Elle est justifiée par le fait que la masse des noyaux est plus de trois ordres de grandeur supérieure à celle des électrons. L'Hamiltonien total peut alors être remplacé par l'Hamiltonien électronique suivant [12] :

$$H = T_e + V_{e-e} + V_{e-n} \quad (\text{II.4})$$

L'équation de Schrödinger est donc réécrite de la façon suivante :

$$H\psi_e = E_e \psi_e \quad (\text{II.5})$$

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

$E_{TOTALE}$  : L'énergie totale du système est alors donnée par :

$$E_{TOTALE} = E_e + E_{noy} \quad (\text{II.6})$$

Bien que le problème soit grandement simplifié, la résolution exacte de l'équation (II.6) est toujours impossible.

### II.3. 2.L'approximation de Hartree

L'approximation de *Hartree* [13] consiste à chercher les fonctions propres de l'Hamiltonien  $H$  sous la forme approchée :

$$\psi_{\text{approchée}} = \psi_1 r_1 \times \psi_2 r_2 \times \dots \times \psi_n r_n \quad (\text{II.7})$$

Cette approximation est basée sur l'hypothèse des électrons libres ce qui revient à ne pas tenir compte des interactions entre les électrons et des états de spin. Ceci a deux conséquences importantes : la répulsion coulombienne totale du système électronique est surestimée et le principe d'exclusion de Pauli n'est pas pris en compte.

### II.4. La méthode des pseudopotentiels

La technique du pseudopotentiel [14, 15, 16, 17, 18] est une véritable révolution dans la théorie des structures de bande. Cette méthode s'est avérée, depuis son introduction, très efficace dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides.

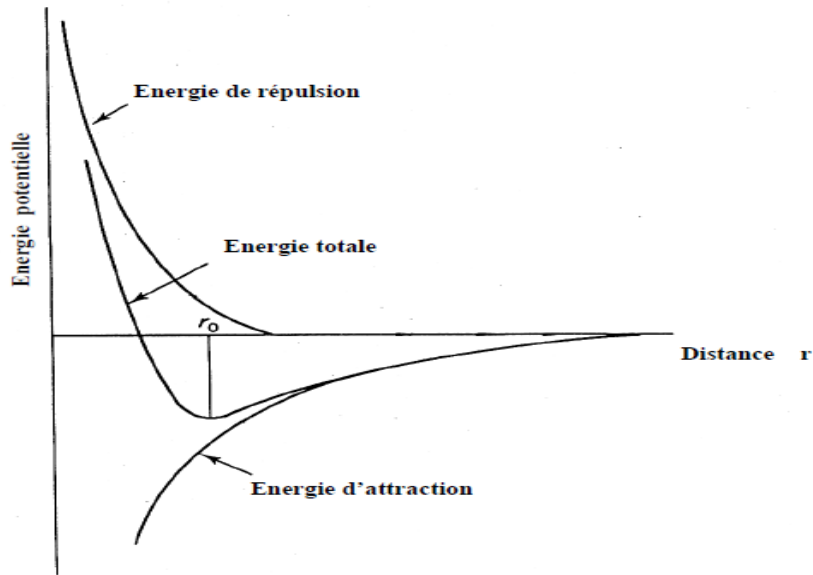
Le pseudopotentiel a été introduit pour la première fois par Fermi (1934) pour l'étude des niveaux atomiques observés. Dans les années qui succédèrent, Hellman [19] a proposé une approximation du pseudopotentiel qui a pu être utilisée dans la détermination du pseudopotentiel énergétique dans les métaux alcalins.

Ainsi, le théorème d'annulation de Phillips-Kleinman [20, 21] dérivé de la méthode OPW, a fait preuve que les électrons de valence présentent expérimentalement un potentiel répulsif lorsqu'ils sont électrons de valence en dehors du cœur ; ou en d'autres termes, les fonctions d'ondes des électrons de valence sont contraintes à être orthogonalisées aux états du cœur. Si ce potentiel répulsif est additionné au potentiel attractif du cœur ionique, ils s'annulent presque en laissant un faible pseudopotentiel attractif.

#### II.4. 1. Concept du pseudopotentiel

Dans un atome ou dans un solide le potentiel agissant sur un électron de valence est très attractif à l'intérieur du cœur (figure II-2-a). Dans cette région la fonction d'onde oscille

rapidement (figure II-2-c), ce qui se traduit par une énergie cinétique élevée, où l'énergie potentielle est très faible, ou bien comme une manifestation du principe de Pauli qui exige que la fonction d'onde soit orthogonale aux orbitales des électrons du cœur [22].



**Figure II-1** : Potentiel d'interaction de deux atomes en fonction de la distance atomique.

Phillips et Kleinman [20, 21] remarquèrent que l'effet de cette orthogonalité se traduit par un terme répulsif qui tend à annuler le fort potentiel attractif  $U(r)$ . La description de la théorie de Phillips et Kleinman [20, 21] est la suivante : La fonction d'onde réelle  $\psi$  est composée d'une partie lisse qui peut être développée en ondes planes et une partie qui peut être développée en une somme des états du cœur  $\phi$  c'est-à-dire :

$$\psi = \phi + \sum_{\alpha} \alpha_{\alpha} \phi_{\alpha} \quad (\text{II-8})$$

Reportant cette expression dans l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{II-9})$$

Des transformations mathématiques de l'équation (II-1), nous amènent à écrire :

$$H\phi + \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} (E - E_{\alpha}) \langle \phi_{\alpha} | \phi \rangle = E\phi \quad (\text{II-10})$$

Dans laquelle la sommation s'étend sur tous les états du cœur saturés, elle représente un

opérateur non local agissant sur la partie  $\Phi$  de la fonction d'onde. Cet opérateur est comme un potentiel purement répulsif  $V_R$  puisque les termes d'orthogonalisation ont l'effet de maintenir les électrons de valence à l'exercice du cœur (principe de Pauli).

$$V_R = \sum_c (E - E_c) \phi_c \langle \phi_c | \phi \rangle \quad (\text{II-11})$$

Par suite l'équation (II-10) devient :

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + V_{PS} \right] \phi = E \phi \quad (\text{II-12})$$

Où:

$$V_{PS} = V_R + V_C \quad (\text{II-13})$$

Avec :

$V_C$  : Le potentiel ionique du cœur, il est puissant et négatif, tandis que  $V_R$  est un potentiel répulsif positif, leur sommation réduit ainsi la valeur de  $V_{PS}$  [20] figure (II-2-b). La petitesse de  $V_{PS}$  (pseudopotentiel) rend la méthode extrêmement avantageuse (réduction des complications de calcul).

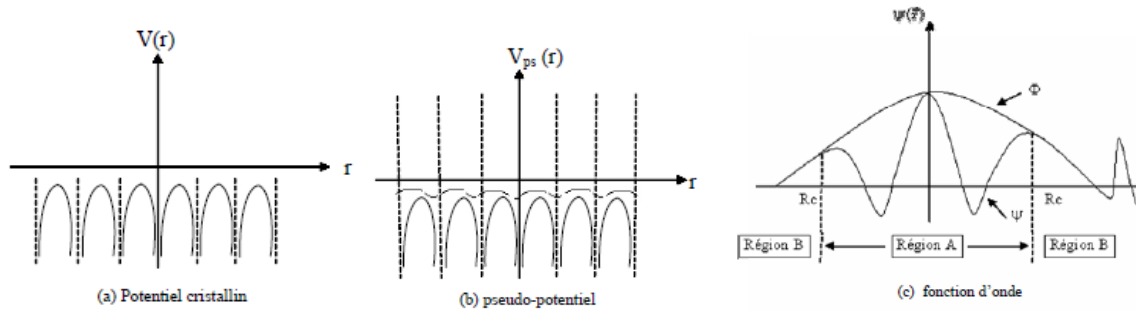
Généralement la relation (II -12) s'écrit comme suit :

$$H_{PS} \phi = E \phi \quad (\text{II-14})$$

Il existe deux sortes de pseudopotentiel : le pseudopotentiel local (EPM local) et le pseudopotentiel non local (EPM non local) dont le développement sera donné ci-après.

**a- La méthode du pseudopotentiel local**

Cette méthode empirique est très exploitée dans le calcul des structures de bandes des semi-conducteurs, elle ne tient pas compte de la dépendance énergétique du pseudopotentiel avec les états du moment angulaire représentant les états du cœur [23].



**Figure II-2** : La fonction d'onde et le potentiel.

Dans cette approche le pseudopotentiel d'onde d'un électron de valence est donné par

$$H_{PS}\phi_{nk}(r) = E_n(k)\phi_{nk}(r) \tag{II-15}$$

Avec:

$$H_{PS} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V_{PS}(r) \tag{II-16}$$

et  $\phi_{nk}$  est développée sur la base des fonction d'ondes planes :

$$\phi_{nk}(r) = \sum_m C_m(k)\exp[i(k + G_m)r] \tag{II-17}$$

Où la convergence est déterminée par le vecteur du réseau réciproque  $G$ , et les  $E_n$  sont les solutions de l'équation séculaire donnée par:

$$\langle \phi_G | H - E | \phi_{G'} \rangle = \langle \phi_G | H | \phi_{G'} \rangle - E_n(k) \langle \phi_G | \phi_{G'} \rangle = 0 \tag{II-18}$$

Ou alors pour:

$$H = T + V_{PS} \quad (\text{II-19})$$

$$\langle \phi_G | H - E | \phi_{G'} \rangle = \langle \phi_G | T | \phi_{G'} \rangle + \langle \phi_G | V_{PS} | \phi_{G'} \rangle - E_n(k) \langle \phi_G | \phi_{G'} \rangle = 0 \quad (\text{II-20})$$

Avec:

$$\langle \phi_G | T | \phi_{G'} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} (k + G)^2 \delta_{GG'} \quad (\text{II-21})$$

Donc il reste à déterminer:  $\langle \phi_G | V_{PS} | \phi_{G'} \rangle$

$$\langle \phi_G | V_{PS} | \phi_{G'} \rangle := \langle \phi_G | V_{PS}^L | \phi_{G'} \rangle + \langle \phi_G | V_{PS}^{NL} | \phi_{G'} \rangle \quad (\text{II-22})$$

Avec

$$\begin{aligned} \langle \phi_G | V_{PS}^L | \phi_{G'} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \exp(-i(k+r)r) V(r) \exp(i(k+G')r) d^3r \\ &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V(r) \exp[i(G+G')r] d^3r = V(G-G') \end{aligned}$$

Posons  $(G - G') = q$

D'où

$$V_{PS}^L = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V(r) \exp(-iqr) d^3r \quad (\text{II-23})$$

Dans le cas de cette approximation, le pseudopotentiel total du cristal est supposé être la superposition des pseudopotentiels atomiques  $V_i$ , à des sites  $R_n$ . Ces Pseudopotentiels possèdent une symétrie sphérique.

$$V_{PS}^L = \sum_n^m \sum_i^l V_i(r - R_n - T_i) \quad (\text{II-24})$$

$m$  : nombre de maille élémentaires dans le solide.

$l$  : nombre d'atomes par maille élémentaire.



$R_n$  : vecteur de translation dans le réseau réel.

$T_i$  : vecteur de position liant deux atomes dans la maille unitaire.

On remarque que le pseudopotentiel est une simple fonction de position, ce qui caractérise sa localité.

La périodicité du cristal permet d'écrire la transformée de Fourier sous la forme :

$$V(G) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_{PS}^L(r) \exp[-i(Gr)] d^3r \quad (\text{II-25})$$

$\Omega$  : étant le volume du cristal.

La structure diamant possède deux atomes par motif, donc  $\Omega = 2 N \Omega_a$ , où  $\Omega_a$  et  $N$  représentent le volume atomique et le nombre de maille respectivement.

En remplaçant (III-24) dans (III-25) et si  $q = G$ , nous aboutissons à :

$$V(G) = \frac{1}{2N} \sum_n \exp[-i(G \cdot R_i)] \sum_i \exp[-i(G \cdot T_i)] \frac{1}{\Omega_a} \int_{\Omega} V_i(r) \exp[-i(Gr)] d^3r \quad (\text{II-26})$$

Puisque le potentiel cristallin est comme étant la somme des pseudopotentiels atomiques locaux, ce potentiel peut s'exprimer en fonction des facteurs de forme atomiques.

$$V_a(G) = \frac{1}{\Omega_a} \int_{\Omega} V_a(r) \exp[-i(Gr)] d^3r \quad (\text{II-27})$$

Ces facteurs de forme peuvent être déterminés à partir des gaps optiques expérimentaux, d'après Cohen et Bergstresser [23], raison pour laquelle cette méthode est dite empirique.

Un enchaînement mathématique de la relation (II-26), va amener à écrire :

$$V(G) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \exp[-i(GT_i)] V_a(G) \quad (\text{II-28})$$

Où l'indice de la sommation  $i$  varie de 1 à 2 pour les semi-conducteurs de type  $A^N B^{8-N}$ .

Finalement (II-28) devient :

$$V(G) = \frac{1}{2} \{ \exp[-i(GT_1)]V_1(G) + \exp[-i(GT_2)]V_2(G) \} \quad (\text{II-29})$$

Où :

$$V_G^S = \frac{1}{2} [V_1(G) - V_2(G)] : \text{représente le facteur de forme symétrique}$$

$V_G^A = \frac{1}{2} [V_1(G) + V_2(G)]$  : représente le facteur de forme antisymétrique. Tenant compte de ces deux dernières expressions, la relation (II-29) devient :

$$V(G) = \frac{1}{2} [V_G^S \{ \exp[-i(GT_1)] + \exp[-i(GT_2)] \} + V_G^A \{ \exp[-i(GT_1)] - \exp[-i(GT_2)] \}] \quad (\text{II-30})$$

Où :

$T_1$  et  $T_2$  représentent les positions des deux atomes.

Pour le cas de la structure diamant, les deux atomes sont identiques, donc :

$$T_1 = T = \left(\frac{a}{8}\right) (1,1,1) \text{ et } T_2 = -T = -\left(\frac{a}{8}\right) (1,1,1)$$

$$V_1 = V_2 = \frac{1}{2} V^S$$

$$V^A = 0$$

et l'expression (II-30) est mise sous la forme :

$$V(G) = V_G^S \cos(G.T) + iV_G^A \sin(G.T) \quad (\text{II-31})$$

Aux laquelle :

$$\cos(G.T) = S^S(G) \quad (\text{II-32})$$

$$\sin(G.T) = S^A(G) \quad (\text{II-33})$$

Représentent les facteurs de structure symétrique et antisymétrique respectivement. De la relation :

$$V_G = \sum_{\alpha} S^{\alpha}(G) V^{\alpha}(G) \quad (\text{II-34})$$

Que l'on peut reporter dans la relation traduisant le pseudopotentiel :

$$V_{PS}^L(r) = \sum_{|G|} V(G) \exp[i(G \cdot R)] \quad (\text{II-35})$$

Puisque le pseudopotentiel total du cristal à été identifié, le pseudo-fonction d'onde (II-17) qui ala forme de la fonction de Bloch, nous permet d'écrire l'équation séculaire sous la forme suivante :

$$\left| \frac{\hbar^2}{2m} (k + G)^2 \delta_{GG'} + V_G^S \cos(G \cdot T) + i V_G^A \sin(G \cdot T) - E_n(k) \delta_{GG'} \right| C_{nk}(G) = 0 \quad (\text{II-36})$$

Cette équation séculaire possède une solution si et seulement si le déterminant est nul. C'est-à-dire :

$$\det \| H_{GG'}(k) - E_n(k) \delta_{GG'} \| = 0 \quad (\text{II-37})$$

Ou:

$$H_{GG'}(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} (k + G)^2 \delta_{GG'} + V^{\alpha}(G - G') S^{\alpha}(G - G') \quad (\text{II-38})$$

La convergence rapide de cette équation séculaire s'effectue à partir de  $|G| < |G_0| = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}} (11)^{\frac{1}{2}}$  Par ce que le pseudopotentiel s'annule pour les valeurs supérieures à G.

Il suffit donc de connaître trois facteurs de forme pour la structure diamant qui possèdeun centre de symétrie :

$$V^S(111) = V_3^S \quad V^S(220) = V_8^S \quad V^S(311) = V_{11}^S$$

Mais pour la structure zinc-blende, en plus de ses facteurs de forme, on a besoin de

trois autres facteurs de forme antisymétrique [24] :

$$V^A(111) = V_3^A \quad V^A(200) = V_4^A \quad V^A(311) = V_{11}^A$$

Les facteurs de forme symétriques  $V^S$ , s'obtiennent à partir des structures monoatomiques telles que le Ge, Si, Sn etc ... d'après la méthode de Heine-Abarenkov [18]. Tandis que les facteurs de forme antisymétriques se déterminent expérimentalement d'après Cohen et Bergstresser [23].

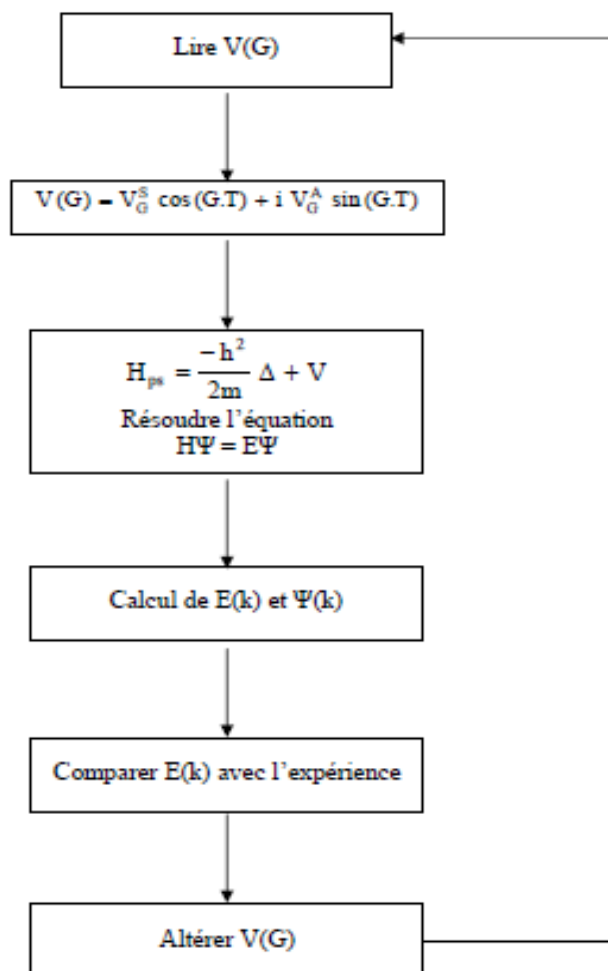


Figure II-3 : Diagramme bloc de la méthode E. P.M local.

**Conclusion**

Nous avons donné la méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie de ces matériaux.

L'approche du pseudo-potentiel est actuellement l'approche la plus utilisée pour la détermination des structures des bandes électroniques et d'autres propriétés telles que la bande interdite.

Le choix de la méthode des pseudo-potentiels empirique l'EPM est basé essentiellement sur le fait d'obtenir les états de valence sans calculer pour autant les états du cœur qui ne sont pas nécessaires pour la description de propriétés physiques d'un système. Les états réels sont décrits par des pseudos fonctions d'ondes ayant une représentation dans l'espace de Fourier par un nombre limité d'ondes planes minimisant ainsi les calculs numériques.

***Chapitre III :***  
*Résultats et discussions*

### III.1.Introduction

La compréhension profonde des propriétés structurales, électroniques des semi-conducteurs exige l'étude approfondie du milieu physique, c'est à dire connaitre la façon dans laquelle les atomes et les molécules sont disposés à l'intérieur du solide.

Le progrès scientifique est très lié au développement de la physique des semi-conducteurs en mettant à profit leurs propriétés pour réaliser certains dispositifs électroniques et optoélectroniques.

Actuellement, les alliages à plusieurs composants ont suscité beaucoup d'attention en raison de leurs utilisations comme substrats, couches de revêtement, éléments actifs dans les dispositifs optoélectroniques des appareils photoniques à haute vitesse, et pour d'autres applications. Les caractéristiques de fonctionnement des dispositifs dépendent des propriétés électroniques des matériaux constitutifs, ces propriétés peuvent être améliorées par l'utilisation des alliages ternaires. Donc les alliages ternaires sont des matériaux largement utilisés dans la fabrication des composants électroniques. Une connaissance de ces propriétés est nécessaire pour déterminer leur domaine d'application.

Notre travail porte sur l'étude des propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages ternaires semi-conducteurs  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  par simulation numérique. Nous avons opté pour l'utilisation de la méthode empirique du pseudo potentiel (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA).et nous avons effectué ces calculs sur nos matériaux binaires  $\text{InSb}$  et  $\text{GaSb}$ .

### III.2.Etude des propriétés électroniques

Les calculs sont principalement basés sur la méthode empirique pseudo-potentielle (EPM) avec l'utilisation de l'approximation du cristal virtuel (VCA) améliorée selon le modèle de la structure zinc blende. Sans tenir compte de l'effet du désordre.

Dans l'EPM, le potentiel du cristal est représenté par une superposition linéaire des potentiels atomiques qui sont modifiés et ajustés pour avoir les mêmes valeurs du gap d'énergie connus aux points choisis dans la zone de Brillouin.

Pour savoir les paramètres suivants (la structure de bandes, les gaps d'énergies, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence) il faut d'abord étudier et déterminer les propriétés électroniques, optiques et diélectriques pour les alliages semi-conducteurs ternaires  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .

La nature empirique de la méthode du pseudo-potential consiste à ajuster les facteurs de forme, afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques. [25]

$$V_{ps}(\mathbf{r}) = V_{ps}^L(\mathbf{r}) + V_{ps}^{NL}(\mathbf{r}) \quad (\text{III-1})$$

Avec :

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

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

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

$$V_{ps}(\mathbf{r}) = V_{ps}^L(\mathbf{r}) = \sum_G V(G)e^{iG\mathbf{r}} \quad (\text{III-2})$$

Où :

$V(G)$  : Facteur de forme.

#### Les paramètres du pseudo potentiel empirique $V(G)$ :

- sont déterminés par la méthode des moindres carrés non linéaire [26].
- tous les paramètres sont optimisés simultanément sous un critère bien défini de la minimisation de la moyenne de la racine carrée de l'écart de gap qu'on note (rms).



La méthode des moindres carrées non linéaire nécessite que l'écart (rms) des gaps d'énergies calculées par la méthode des pseudos potentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement soit définie par [3] :

$$\delta = \left[ \sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{ij})^2}{m-n} \right]^2 \quad (\text{III-3})$$

Où :

$$\Delta E_{ij} = E_{ij}^{exp} - E_{ij}^{cal} \quad (\text{III-4})$$

$E_{ij}^{exp}$  et  $E_{ij}^{cal}$  sont respectivement, les énergies observées et calculées entre l'état i avec  $k=k_i$  et l'état j avec  $k=k_j$  de la même paire (i,j) et n le nombre des paramètres du pseudo potentiel empirique.

Les valeurs des facteurs de forme prises au départ sont améliorées ou modifiées par itérations jusqu'à minimiser le [27].

Les facteurs de forme des composés binaires semi conducteurs InSb et GaSb sont ajustés et illustrés dans le tableau (III-1).

### III.2.1. Les facteurs de forme :

Dans le présent travail, les propriétés électroniques des alliages ternaires  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  déposés sur deux substrats composés binaires InSb et GaSb sont étudiées.

Les facteurs de forme pseudo-potentiels symétriques  $V_S$  et antisymétriques  $V_A$  ajustés, ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires utilisés, sont donnés dans le tableau (III-1).

Composant binaire	Les facteurs de forms						Les constants du réseau a (Å)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
GaSb X=0	-0.191206	0.005	0.043533	0.045340	0.03	0.00	6.118
InSb X=1	-0.201294	0.01	0.28338	0.064495	0.03	0.015	6.49

**Tableau III-1** : Les facteurs de forme pseudo-potentiels des composés GaSb, InSb.

En injectant les paramètres pseudo potentiels dans le code EPM et dont les valeurs sont mentionnées dans le Tableau(III.1), on trouve les gaps d'énergies illustrés au Tableau(III.2) et qui sont en très bon accord avec l'expérience rapportée par les références [b,c ]

### III.2.2.Gap énergétique pour l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$

La variation des gaps énergétiques directs  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et indirects  $E_{\Gamma}^X$ ,  $E_{\Gamma}^L$  ont été calculé Pour différentes compositions x de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  allant de 0 à 1, nos résultats sont présentés dans le tableau (III-2).

Composant	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$ (eV)	$E_{\Gamma}^X$ (eV)	$E_{\Gamma}^L$ (eV)
GaSb	0.71575 <sup>a)</sup>	1.01563 <sup>a)</sup>	0.77919 <sup>a)</sup>
	0.725 <sup>b)</sup>	1.03 <sup>b)</sup>	0.761 <sup>b)</sup>
InSb	0.18111 <sup>a)</sup>	1.63283 <sup>a)</sup>	0.93215 <sup>a)</sup>
	0.18 <sup>c)</sup>	1.63 <sup>c)</sup>	0.93 <sup>c)</sup>
$\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Sb}$	0.43792	1.33217	0.8618

**Tableau III-2** : Les variations des gaps énergétiques de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$

Où :

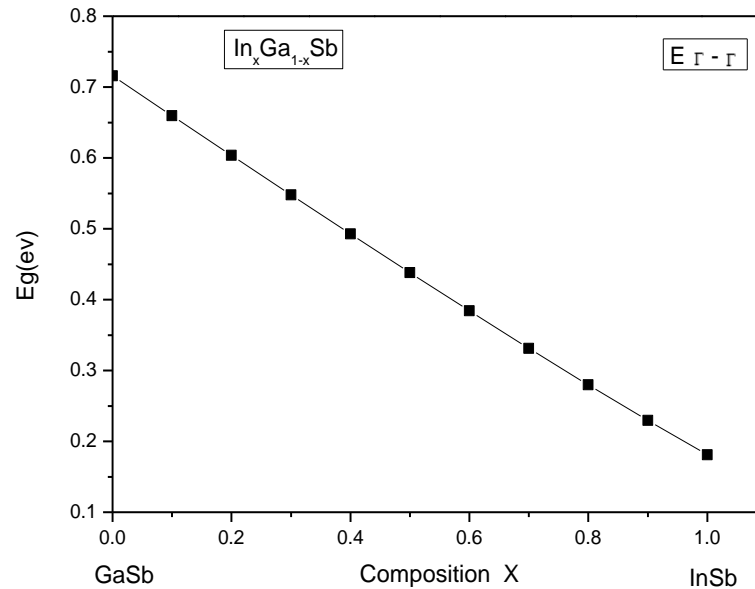
<sup>a)</sup> Valeur calculée

<sup>b)</sup> Valeur expérimentale indiquée dans Réf [C. Alibert et al., Phys. Rev. B 27, 4946 (1983)].

<sup>c)</sup> Valeur expérimentale indiquée dans Réf [S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869].

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

La variation du gap fondamental ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$  est présentée dans la figure (III-1).



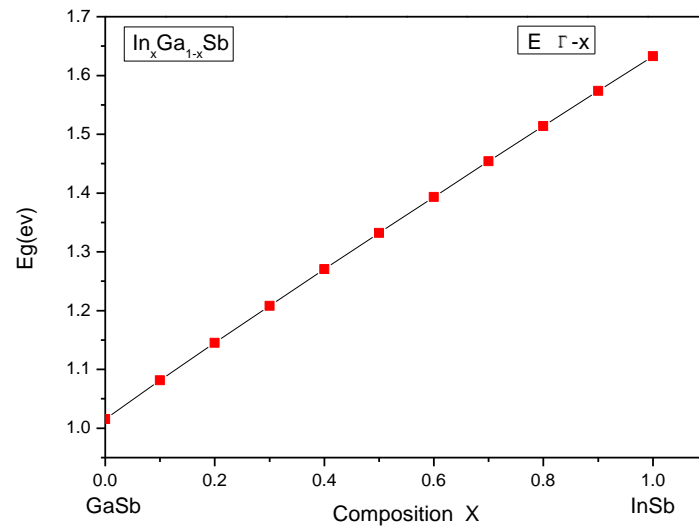
**Figure III-1 :** La variation du gap fondamental ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$ .

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

$$E_{\Gamma-\Gamma} = 0.042 x^2 - 0.579 x + 0.71 \quad (\text{III-5})$$

On remarque d'après la courbe que la variation est monotone et décroissante allant de 0.71 eV pour GaSb jusqu'à 0.18 eV pour l'InSb.

La variation du gap ( $E_{\Gamma}^X$ ) de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$  est présentée sur la figure (III-2).



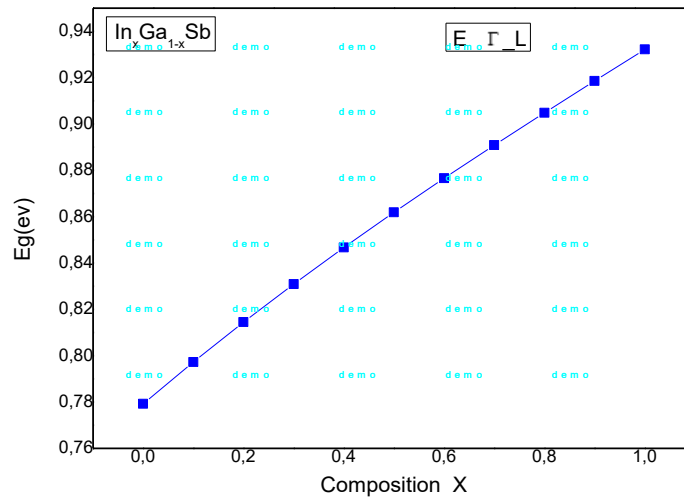
**Figure III-2** : La variation du gap ( $E_{\Gamma}^X$ ) de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$ .

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

$$E_{\Gamma-x} = -0.03145 x^2 + 0.64749 x + 1 \quad (\text{III-6})$$

On remarque d'après la courbe que la variation est monotone et croissante allant de 1.01563eV pour GaSb jusqu'à 1.63283eV pour l'InSb.

La variation du gap ( $E_{\Gamma}^L$ ) de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$  est présentée dans la figure (III-3).



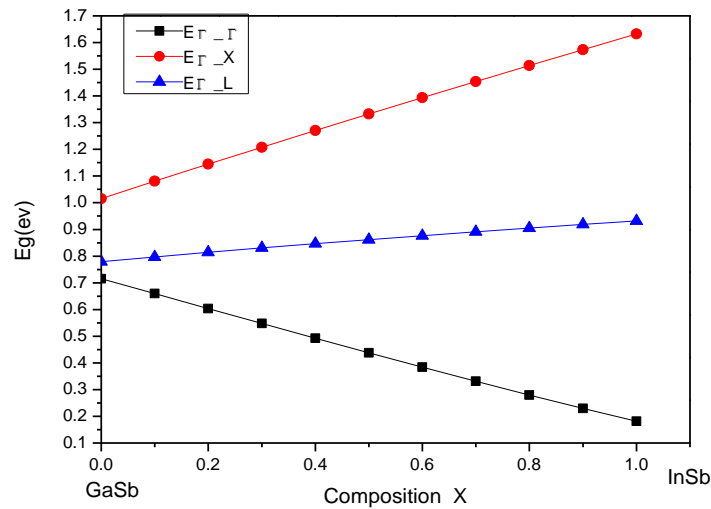
**Figure III-3** : La variation du gap ( $E_{\Gamma}^L$ ) de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$ .

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

$$E_{\Gamma-L} = -0.02476 x^2 + 0.17664 x + 0.77973 \quad (\text{III-7})$$

On remarque d'après la courbe que la variation est monotone et croissante allant de 0.18 eV pour GaSb jusqu'à 0.725 eV pour l'InSb.

Pour voir une éventuelle transition des gaps direct et indirect, la figure (III-4) a été tracée :



**Figure III-4 :** La variation du gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) et des gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ), ( $E_{\Gamma}^L$ ) de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$ .

A travers cette figure, nous constatons que le gap direct décroît avec l'augmentation de la composition  $x$ , cette variation est monotone et linéaire et la variation des gaps indirects ( $E_{\Gamma}^X$ ), ( $E_{\Gamma}^L$ ) avec l'augmentation de la composition  $x$  cette variation est aussi monotone et linéaire.

L'alliage ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  est un semi-conducteur à gap direct ( $E_{\Gamma}^{\Gamma}$ ) dans toute la gamme de composition d'alliage  $x$ . Son gap varie entre 0.71575 eV pour GaSb et 0.18111 eV pour l'InSb. Cet alliage cristallise dans la structure blende. Son Paramètre du réseau variant de 6.118 Å pour GaSb à 6.46 Å pour l'InSb

Les résultats suggèrent un gap direct pour l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  pour toutes les compositions  $x$ , ce qui permet de conclure que l'alliage est un semi-conducteur à gap direct. Et que sa valeur varie de 0.71575 eV à 0.18111 eV chaque fois que  $x$  varie de 0 à 1.

### III.2.3. La masse effective des électrons

Le calcul des masses effectives des électrons est fortement lié à la mobilité des porteurs de charges qui sont des paramètres importants des matériaux décrivant les propriétés du transport des semi conducteurs.

La masse effective de l'électron a été déterminée dans la première bande de conduction au point  $\Gamma$ .

Nos résultats ont montré que la masse effective des électrons pour GaSb est de  $0,047m_0$ , et pour InSb est de  $0,028m_0$ , où  $m_0$  est la masse de l'électron libre.

Nos valeurs sont raisonnables avec les valeurs expérimentales qui sont  $0.039 m_0$  [S. Adachi, « Properties of Group-IV, III–V, and II–VI Semiconductors », Ed Wiley, New york, (2005).] et  $0.013 m_0$  [S. Adachi, « Properties of Group-IV, III–V, and II–VI Semiconductors », Ed Wiley, New york, (2005).] rapporté par Adachi pour les composés binaires GaSb et InSb respectivement.

En utilisant l'équation (I.7), nous avons calculé les masses effectives des électrons pour le  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  et leurs cristaux quasi-binaires (InSb), (GaSb) pour différentes valeurs de la composition  $x$  ( $0 < x < 1$ ).

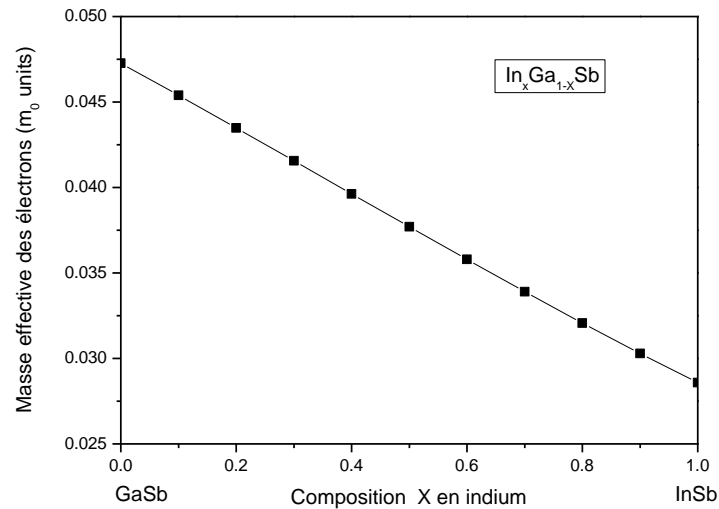
$$\left(\frac{1}{m_e^*}\right) = \frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{d^2(k)}{dk^2}\right) \quad (\text{III.8})$$

Nos résultats concernant la limite des masses effectives des électrons concernant les bandes de conduction et de valence (par unité de masse d'électron libre  $m_0$ ) au point  $\Gamma$  de la zone de Brillouin se trouvent être respectivement comme suit :

$$\frac{m_e}{m_0} = 8.96 * 10^{-4}x^2 - 0.0197 x + 0.047 \quad (\text{III-9})$$

Si en partant de GaSb ( $x=0$ ) à InSb ( $x=1$ ), la variation de la masse effective des électrons au point  $\Gamma$ , qui décroît linéairement.

La variation des masses effectives des électrons en fonction de la composition  $x$  en indium, sans tenir compte de l'effet du désordre est montrée dans les figures (III-5) .



**Figure III-5 :** La variation de la masse effective de l'électron dans  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$  en indium.

### III.2.4. Structure de bandes électroniques

L'étude de la structure de bande électronique de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  est calculée aux points de hautes symétries dans la zone de Brillouin, en utilisant la VCA sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Pour pouvoir interpréter les figures (III-6, III-7) qui illustrent les structures de bandes des alliages binaires respectivement, on note que la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence.

Dans la figure (III-6) 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  $\text{InSb}$  est un semi-conducteur à bande interdite directe, l'écart relevé entre le minimum et le maximum vaut 0.1811 eV, et ceci coïncide avec la valeur reportée dans la référence[28].



Par contre dans la figure (III-7), on remarque 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 semi-conducteur à bande interdite directe, l'écart relevé entre le minimum et le maximum vaut 0.71575 eV, et ceci coïncide avec la valeur reportée dans la référence [28].

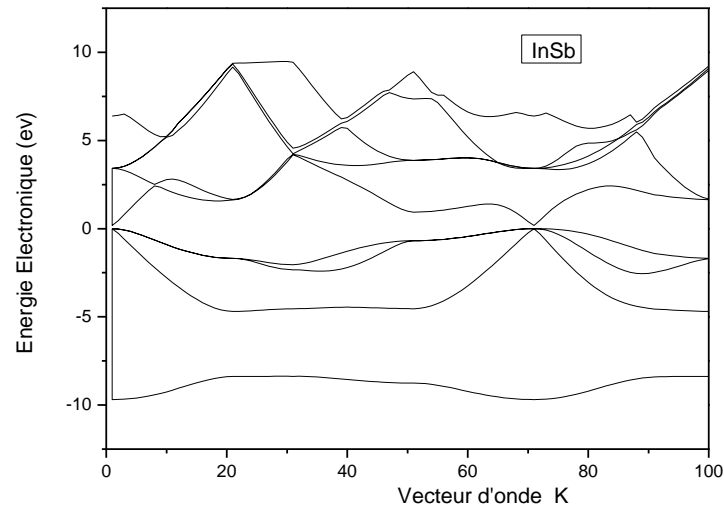


Figure III-6 : Structure de bande électronique du composé binaire InSb

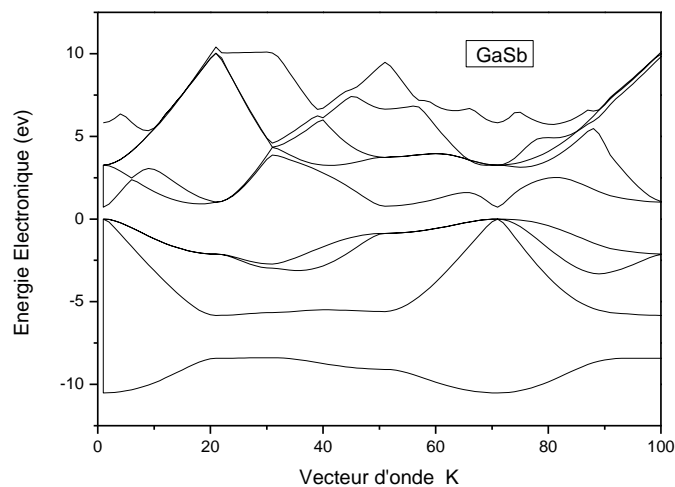
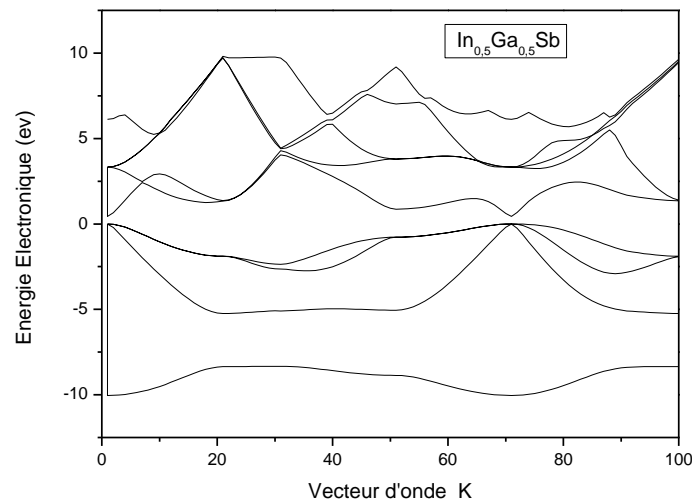


Figure III-7 : Structure de bande électronique du composé binaire GaSb

La structure de bande d'énergie de l'alliage ternaire  $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Sb}$ , est schématisée sur la figure (III-8) où le gap d'énergie est direct, et il est associé à la vallée  $\Gamma$ , dont le minimum se situe à 0.43792 eV du maximum de la bande de valence.



**Figure III-8** : Structure de bande électronique de l'alliage ternaire  $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Sb}$

### III.3. Etude des propriétés optiques :

#### III.3. 1. Indice de réfraction :

L'indice de réfraction ( $n$ ) des semi-conducteurs est un paramètre physique très important lié aux interactions atomiques microscopiques, il est souvent relié à l'énergie de gap.

Plusieurs approches ont été envisagées pour corrélérer le gap énergétique des semi-conducteurs à leur indice de réfraction.

La corrélation entre  $n$  et  $E_g$  a des répercussions importantes sur la structure de bande des semi-conducteurs, il serait utile de trouver une valeur acceptable de  $n$  d'un matériau quelconque à partir de cette relation.

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques, les fibres optiques.

Il y'a plusieurs modèles pour calculer ce paramètre, Moss était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction  $n$  et le gap énergétique  $E_g$  basée sur le modèle atomique, sa formule est donnée comme suite :

### 1. Modèle de Ravindra et Srivastava

$$n^4 E_g = k \quad (\text{III-10})$$

Où la constante  $k=108\text{eV}$  est établie par Ravindra et Srivastava [29]

### 2. Modèle de Gupta et Ravindra

La forme linéaire de Gupta et Ravindra [30]

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{III-11})$$

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

### 3. Modèle de Hervé et vandamme

La relation empirique de Hervé et Vandamme donnée par [31]:

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \quad (\text{III-12})$$

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

### 4. Modèle de Reddyat Anjaneyulu

La relation de Reddyat Anjaneyulu [32]

$$E_g e^n = 36.6 \quad (\text{III-13})$$

### 5. Modèle de Ravindra

La forme linéaire de Ravindra [33]

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{III-14})$$

$\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes avec  $\alpha=4.16 \text{ eV}$  et  $\beta=-0.85 \text{ eV}^{-1}$

En utilisant ces cinq modèles, nous avons calculé l'indice de réfraction des alliages semi-conducteurs  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  à partir des valeurs de leurs gaps d'énergie.

Nos résultats de calcul de l'indice de réfraction pour chaque modèle sont présentés sur le tableau (III-3).

	<b>n<sub>1</sub></b>	<b>n<sub>2</sub></b>	<b>n<sub>3</sub></b>	<b>n<sub>4</sub></b>	<b>n<sub>5</sub></b>	<b>n exp</b>
<b>GaSb (X=0)</b>	3,50481904	3,640235	3,45237947	3,92624208	3,5516125	3.8 <sup>a)</sup>
<b>In<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>Sb (X=0.5)</b>	3,96284644	3,8124896	3,6819835	4,41753677	3,787768	
<b>InSb (X=1)</b>	4,94163121	3,9717118	3,92715732	5,30046844	4,0060565	4 <sup>a)</sup>

**Tableau III-3** : Calcul des indices de réfraction de l'alliage In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>Sb en fonction de la composition x du l'indium.

Où :

<sup>a)</sup> Valeur théorique indiquée dans Ref [M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol. 2, World Scientific, Singapore, (1999). ]

Pour- faire une comparaison, nous avons présenté également la valeur théorique citée dans référence (a,b), Il en résulte de ces comparaisons que, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique selon la relation suivante :

$$\Delta n = \frac{n_{exp} - n_{cal}}{n_{exp}} \quad (III-15)$$

	<b>Δn<sub>1</sub></b>	<b>Δn<sub>2</sub></b>	<b>Δn<sub>3</sub></b>	<b>Δn<sub>4</sub></b>	<b>Δn<sub>5</sub></b>
<b>GaSb (X=0)</b>	0.0776792	0.04204342	0.09147909	0.0332216	0.06536513
<b>InSb (X=1)</b>	-0.2354078	0.00707205	0.01821067	-0.32511711	-0.00151412

**Tableau III-4** : Calcul de la variation pour chaque indice de réfraction de l'alliage In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>Sb en fonction de la composition x du l'indium.

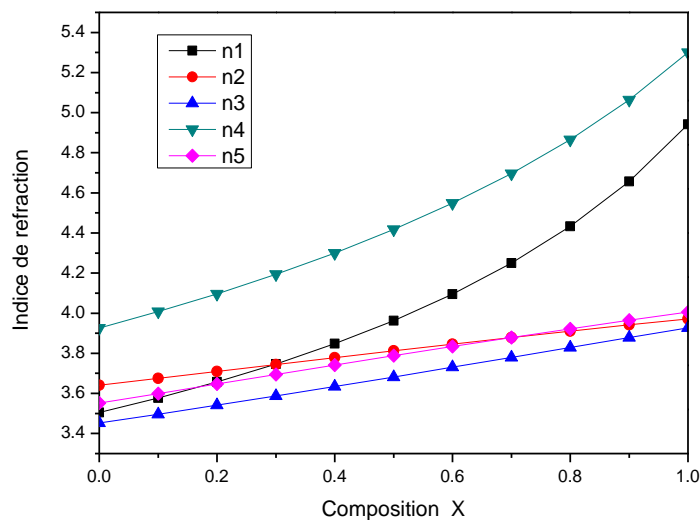
Le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique de composé InSb est donné par les relations du modèle de Gupta et Ravindra et celui de Ravindra.

Mais il faut dire que le modèle qui donne la valeur la plus approche de la valeur théorique est celui de modèle de Ravindra.

Le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique de composé GaSb est donné par les relations du modèle de Gupta et Ravindra et du modèle de Reddyat Anjaneyulu.

Mais il faut dire que le modèle qui donne la valeur la plus approche de la valeur théorique est celui de modèle de Reddyat Anjaneyulu.

La figure (III-9) donne la variation de l'indice de réfraction de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$  du l'indium les cinq modèles.



**Figure III-9 :** la variation de l'indice de réfraction de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  en fonction de la composition  $x$  du l'indium des cinq modèles.

Nous observons que tous les modèles présentent le même comportement, l'augmentation de l'indice de réfraction avec l'augmentation de composition  $x$  du l'indium.

L'augmentation de l'indice de réfraction est directement liée à la valeur du gap en fonction de la composition  $x$ . Il augmente quand le gap diminue.

### III.4. Etude des propriétés diélectriques

#### III.4.1. Constante diélectrique de haute fréquence

Basé sur les valeurs calculées de l'indice  $n$  obtenu à partir de la relation de Moss, la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_\infty$ , a été estimée pour différentes compositions  $x$  en utilisant l'expression suivante :

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (\text{III-16})$$

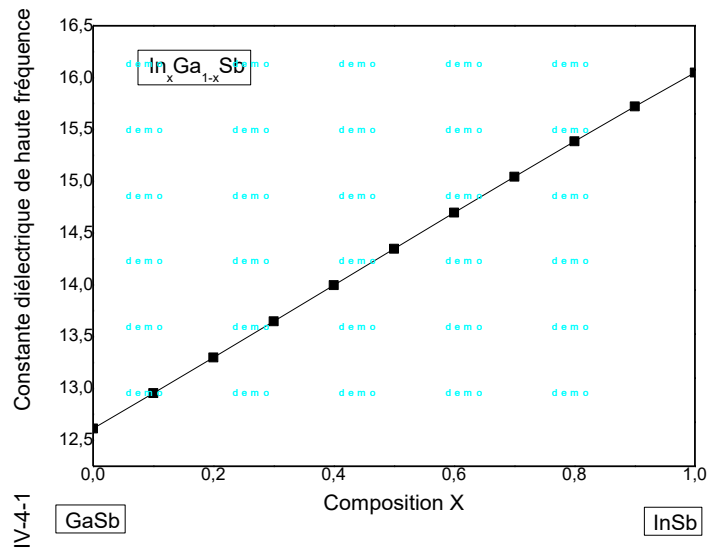
Le calcul de l'indice de réfraction ( $n$ ) pour le modèle choisi de Ravindra, les valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_\infty$  pour GaSb et InSb sont 12,6139514 et 16,0484887.

La variation de la constante diélectrique de haute fréquence  $\epsilon_\infty$  en fonction de la concentration de l'indium des alliages  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  est tracée dans la Figure.III.8 III.9.

On notera qu'en augmentant la concentration de l'indium,  $\epsilon_\infty$  augmentant de façon monotone. La tendance de  $\epsilon_\infty$  est envolée à celle  $x$  et qualitativement semblable à celle de ( $n$ ).

Ceci est un résultat attendu car  $\epsilon_\infty$  est obtenue à partir de l'équation III-14. Le comportement de  $\epsilon_\infty$  par rapport à  $x$  indique que dès qu'on procède de GaSb ( $x = 0$ ) vers InSb ( $x = 1$ ), l'alliage ternaire d'intérêt ( $0 < x < 1$ ) devient progressivement un bon conducteur électrique.

La variation de la constante  $\epsilon_\infty$  pour l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  partir des différents modèles, pour différentes composition  $x$  du l'indium dans l'intervalle ( $0 \leq x \leq 1$ ) est présentée dans La figure suivante :



**Figure III-10 :** La variation de la constante diélectrique de haute fréquence de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$

### Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés électroniques, optiques et diélectriques telles que le gap énergétique, l'indice de réfraction et les constantes diélectriques de haute fréquence, de l'alliage semi-conducteurs ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ . Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode empirique des pseudopotentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel. Toutes les propriétés ont été examinées en fonction de la composition  $x$  de l'indium.

Dans les deux composés binaires GaSb, InSb. L'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  est à gap direct pour toutes les concentrations de l'indium.

L'indice de réfraction a été calculé selon cinq modèles existants, il varie d'une manière monotone et linéaire en fonction de la composition  $x$  de l'indium, Ce comportement est similaire pour la variation des constantes diélectriques de haute fréquence en fonction de la composition  $x$  de l'indium.

# ***Conclusion Générale***



### Conclusion général

Dans ce travail nous avons cherché à comprendre les propriétés structurales et électroniques, optiques et diélectriques des alliages ternaires  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  semi-conducteurs. Toutes ces propriétés ont été examinées en fonction de la composition  $x$  de l'indium. Les calculs sont principalement effectués par l'emploi de la méthode du pseudo-potentiel empirique EPM, couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA.

Nos résultats ont montré que pour l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ , de paramètre de maille compris entre 6.118 Å (GaSb) et 6.49 Å (InSb),

Un gap direct ( $E_F^I$ ) et présentant un écart considérable par rapport aux gaps ( $E_F^X$ ), ( $E_F^L$ ) et qu'aucune transition de gaps n'est remarquée. Sa valeur varie de 0.71575 eV à 0.18111 eV chaque fois que  $x$  varie de 0 à 1. Le gap direct décroît avec l'augmentation de la composition  $x$ , cette variation est monotone et linéaire. Et l'augmentation des gaps indirects ( $E_F^X$ ), ( $E_F^L$ ) avec l'augmentation de la composition  $x$  cette variation est aussi monotone et linéaire.

La masse effective des électrons pour GaSb est de 0,04726448  $m_0$ , et pour InSb est de 0,02858132  $m_0$ , où  $m_0$  est la masse de l'électron libre.

L'indice de réfraction a été calculé selon cinq modèles empiriques. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition  $x$  pour l'alliage semi-conducteur ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  montre une augmentation de l'indice de réfraction avec l'augmentation de la composition  $x$  de l'indium pour tous les modèles utilisés. Avec le composé InSb, le meilleur accord entre nos résultats et la valeur théorique est celle donnée par le modèle de Ravindra, et pour le composé GaSb le modèle de Reddy et Anjaneyulu donne la valeur qui est la plus proche de la valeur théorique.

La constante diélectrique haute fréquence  $\epsilon_\infty$  est calculé pour le meilleur modèle, leur comportement en fonction de la composition  $x$  de l'indium est le même, monotone et linéaire.

Le contrôle de ces paramètres en faisant varier la composition  $x$  pour l'alliage ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  est d'une importance capitale pour la conception de nouveaux dispositifs optoélectroniques.

**Références bibliographique**

- [1] John H. Davies, The physics of low-dimensional Semiconductors, Cambridge University Press, (1998)
- [2] Bahi Wafa. Les semi-conducteurs binaires utilisés dans la composante optoélectronique.
- [3] M. Labidi, Thèse Doctorat, Univ Badji Mokhtar Annaba (2011)
- [4] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 6 Ed. DUNOD (2009)
- [5] S.Adachi, « Properties of Group IV, III-V and II-VI Semi-conducteur »,
- [6] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012)
- [7] bechiri. abderrachid. Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique
- [8] P. Kiréev, « La Physique des semi-conducteurs », édition Mir, Moscou (1975).
- [9] <http://infoterre.brgm.fr/rapports/RP-61342-FR.pdf> (consulté le 17.03.2016)
- [10] I. Vurtgafman and J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan. J. Appl. Phys. Vol.89, No. 11, 1 June 2001.
- [11] E. Schrödinger, Ann. Phys., 79, 489, (1926) ; E. Schrödinger, Ann. Phys., 79, 361 (1926).
- [12] M. Born, R. Oppenheimer, Ann. Physik., 84, 457, (1927).
- [13] D. R. Hartree, Proc. Combridge Philos. Soc. 24, 89, (1928).
- [14] J. Chelikowsky and M. L Cohen Phys. Rev B14, 552 (1976).
- [15] P. Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties, springer-Verlag, Berlin Heidelberg New-York (2001).
- [16] C. Herring, Phys. Rev. 57, 1169 (1940).
- [17] D. Brust, J. C. Phillips and F.Bassani, Phys. Rev. Lett. 9, 94 (1962).
- [18] I. V. Abarenkov and V. Heine, Phil. Mag. 13, 529 (1965).
- [19] H. Hellmann, W. Kassatotschkin, Acta Physicochim. U.R.S.S. 5, 23 (1936).
- [20] J. C. Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. 116, 287 (1959).
- [21] J. C. Phillips. Phys. Rev. 112, 685 (1958);  
F. Bassani and V. Celli, J. Phys. Chem. Solid 20, 64 (1961);  
M. L. Cohen and V. Heine, Phys. Rev. 122, 1821 (1961);  
B. I. Austin, V. Heine and L. I. Shen, Phys. Rev. 127, 276 (1962).
- [22] M. L. Cohen and V. Heine, Solid State Physics 24, Eds, H. Enrenreich, F. Seitz and D. Turnbull , Academic press, New-York (1970).
- [23] M. L. Cohen and T. Bergstresser Phys. Rev. 141, 789 (1966);

- M. L. Cohen and T. Bergstresser Phys. Rev. 164, 1069 (1976).
- [24] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 32, 674 (1974);  
W. A. Harrison, Phys. Rev. B14, 702 (1976).
- [25] F. Mezrag, Thèse de doctorat, Univ Mohamed Khider Biskra (2012)
- [26] A. Bechiri, N. Bouarissa, Superlattices Microstruct. 39 (2006) 478.
- [27] N. Bouarissa, H. Aourag, Infrared Physics & Technology 36 (1995) 973.
- [28] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [29] N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, Infrared Phy. 19 (1979) 603.
- [30] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [31] R.R. Reddy, S.Anjaneyulu, Phys. Stat. Sol. (b) 174 (1992) K 91.
- [32] M. Ravindra, P. Ganapathy, J.Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21.
- [33] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) 100 (1980) 715.

## Résumé

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés électroniques, optiques et diélectriques et la masse effective de l'alliage ternaire semi-conducteur  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  dans la structure zinc blende. Ces alliages ont un intérêt important pour la conception des dispositifs optoélectroniques. Les calculs sont principalement basés sur l'approche du pseudo-potential empirique combinée avec l'approximation du cristal virtuel VCA.

Nos résultats ont montré qu'en faisant varier la concentration de l'indium, l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  présente un gap direct pour l'intervalle  $(0 \leq x \leq 1)$ . Ce travail pourrait nous fournir des diverses possibilités pour l'obtention des indices de réfraction et des constantes diélectriques en faisant varier les compositions  $x$ .

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

**Mots clés :** Les semi-conducteurs III-V. l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ . l'approximation du cristal virtuel VCA, pseudo-potential empirique EPM.

## Abstract

The aim of this work is to study the electronic, optical and dielectric properties and the effective mass of the ternary semiconductor alloy  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  in the zinc blende structure. These alloys have an important interest for the design of optoelectronic devices. The calculations are mainly based on the empirical pseudo-potential approach combined with the VCA virtual crystal approximation.

Our results have shown that by varying the concentration of indium, the  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  alloy presents a direct gap for the interval  $(0 \leq x \leq 1)$ . This work could provide us with various possibilities for obtaining refractive indices and dielectric constants by varying the composition  $x$ .

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

## Keywords :

semiconductors III-V. the alloy  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ . The virtual crystal approximation VCA, empirical pseudo-potential EPM.

## المخلص:

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخواص الإلكترونية والضوئية والعازلة والكتلة الفعالة لسبائك أشباه الموصلات الثلاثي  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  في هيكل مزيج الزنك، وهذه السبائك لها أهمية كبيرة في تصميم الأجهزة الإلكترونية الضوئية. تعتمد الحسابات بشكل أساسي على نهج الإمكانات الزائفة التجريبية جنباً إلى جنب مع التقريب البلوري الافتراضي VCA. أظهرت نتائجنا أنه من خلال تغيير تركيز الأنديوم، تقدم سبيكة  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  فجوة مباشرة للمجال  $(0 \leq x \leq 1)$ . يمكن أن يوفر لنا هذا العمل إمكانيات مختلفة للحصول على مؤشرات الانكسار وثوابت العزل الكهربائي عن طريق تغيير تكوين  $x$ .

تتوافق نتائجنا جيداً مع النتائج التجريبية والنظرية الأخرى.

**الكلمات الدالة :** أشباه الموصلات III-V. السبيكة  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ . التقريب البلوري الافتراضي VCA، الإمكانيات الزائفة التجريبية

EPM.