



Mémoire de fin d'étude

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE MASTER

Filière : Physique
Option : Physique des Matériaux

THÈME

Effet de la pression sur la structure et les propriétés diélectrique du composé semi-conducteur binaire CdTe

Préparé par : Safi Riyadh

Soutenu le :

Devant le jury :

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

Année Universitaire 2020/2021

Remerciements



Remerciements

Je tiens à adresser en premier lieu mes plus sincères remerciements à mon directeur de mémoire Dr N. FARES. Je la remercie très chaleureusement de m'avoir fait découvrir un jardin de fleurs théoriques. Elle m'a transmis la passion de la recherche et n'a eu de cesse de m'encourager et de me soutenir. J'en profite pour lui exprimer ici ma plus profonde gratitude.

*J'adresse mes de sincères remerciements **aux membres de jury** d'avoir accepté d'examiner mon mémoire et de me faire l'honneur d'être membre.*

Dédicaces



Dédicace

Je dédie ce mémoire

À ma plus chère mère, celle qui croit toujours en moi, me soutient, me guide et me guide, source de mon bonheur. Ses prières ont été d'une grande aide pendant toute ma vie.

À mon très cher père laid, un travailleur acharné qui s'occupe de sa famille. Vous avez été et serez toujours mon modèle.

À mon enseignante Dr. Fares Nor El Houda pour m'avoir aidé durant mon travail et m'avoir donné des instructions précises qui me guident vers le bon chemin.

A mes frères khaled, sabrina, sifo et malak.

Aux deux familles safi et gassmi..

À mon ami de l'université noureddine senouci .

À Tous ceux que j'ai rencontrés ou rencontrés au cours de mon voyage qu'on appelle la vie. Il est assez difficile de vous mentionner tous dans ces petites lignes, mais vous serez toujours dans mon cœur.

Safi riyadh

Résumés



Abstract

In this work, we have studied the optical, electronic and dielectric properties of the binary semiconductor compound CdTe, and the main objective of this work is to study the effect of a pressure ranging from 0 Kbar to 20 Kbar on the semiconductor compound. This has shown us that the compound CdTe is mechanically stable in the pressure range.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés optiques, électroniques et diélectriques du composé semi-conducteur binaire CdTe, et l'objectif principal de ce travail est d'étudier l'effet de la pression allant de 0 Kbar à 20 Kbar sur le composé semi-conducteur binaire CdTe. Cela nous a montré que le composé InSb est mécaniquement stable dans la gamme de pression étudiée.

المخلص

قمنا في هذا العمل، بدراسة الخصائص البصرية و الإلكترونية و العازلة للمركب نصف الناقل الثنائي CdTe ، و الهدف الأساسي في هذا العمل دراسة تأثير الضغط الذي يتراوح من 0 kbar إلى 20 kbar على المركب نصف الناقل الثنائي ذلك باستعمال طريقة شبه الكون EPM و ظهرت لنا نتائجنا مقارنة بشكل عام مع النتائج النظرية في المقالات العلمية مما تبين لنا أنّ المركب CdTe مستقر ميكانيكياً في نطاق الضغط المدروس.

Sommaire



Sommaire

Remerciements	
Dédicaces	
Résumés	
Sommaire	
Liste des tableaux	
Liste des figures	
Introduction générale	
Références bibliographiques	1

Chapitre I	Généralités sur les semiconducteurs	
I. 1 Introduction		2
I. 2 Généralités sur les semiconducteurs		2
I. 2. 1 Types de Semiconducteurs		2
I. 2. 1. a Semiconducteur intrinsèque		2
I. 2. 1. b Semiconducteur extrinsèque		2
I. 2. 1. b. 1 Semiconducteur extrinsèque type n		3
I. 2. 1. b. 2 Semiconducteur extrinsèque type p		3
I. 3 Les semiconducteurs II-VI		4
I. 3. 1 Propriétés structurales des semiconducteurs II-VI		4
I. 3. 1. a Structure cristalline du tellure de cadmium (CdTe)		5
I. 3. 1. b Zone de Brillouin		6
I. 4 Propriétés électroniques		7
I. 4. 1 Structure de bande		7
I. 4. 2 Notion de gap direct et gap indirect		9
I. 4. 2. a Gap direct		9
I. 4. 2. b Gap indirect		9
I. 5 Les propriétés optiques		10
I. 5. 1 L'indice de réfraction		10
I. 6 Propriétés diélectriques		11
I. 6. 1 Constante diélectrique de haute fréquence		11
I. 7 Applications technologiques		12
I. 8 Conclusion		12
Références bibliographiques		

Chapitre II	Les méthodes de calcul des bandes d'énergies	
II.1. Introduction		13
II. 2. L'équation de Schrödinger		13
II.2.1. Approximation de Base		15
II.2.1.1. Approximation de Born Oppenheimer		15
II.2.1.2. Approximation du champ autocohérent		17
II.2.1.2.1. Approximation de Hartree		17
II.2.1.2.2. Approximation de Hartree-Fock		18
II.2.1.2.3. Approximation de Hartree-Fock-Slater		19
II.2.2. Méthodes des pseudopotentiels		19

II-3 Choix d'une base de la fonction d'onde	20
II-4 Formalisme mathématique du pseudopotentiel (Théorème de Phillips et Kleinman)	22
II-5 Modèles du pseudopotentiel	25
II-5-1 Modèle local	26
II-5-1-1 Modèle de Heirne et Aberenkov	27
II-5-1-2 Modèle d'Ashkroft	27
II-6 Méthode Empirique du Pseudopotentiel (EPM)	27
II-6-1 Méthode empirique locale	28
II.7 Conclusion	31
Références bibliographiques	

Chapitre III

Résultats et discussions

III. 1. Introduction	32
III. 2 Propriétés structurales	32
III. 2.1 Paramètre de maille	33
III. 2 Etude des propriétés électroniques	35
III. 2. 1 Structure de bandes électroniques	35
III. 2. 2 Le gap d'énergie	37
III. 3 Etude des propriétés optiques	41
III. 3. 1 L'indice de réfraction du composé binaire CdTe	41
III. 3. 1. 1 Modèle de Moss	42
III. 3. 1. 2 Modèle de Gupta et Ravindra	43
III. 3. 1. 3 Modèle de Reddy et Anjaneyulu	44
III. 3. 1. 4 Modèle de Ravindra	45
III. 4 Étude des propriétés diélectriques	47
III. 4. 1 Constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞}	47
III. 5 Conclusion	49
Références bibliographiques	

Conclusion générale	50
----------------------------	-----------

Liste des tableaux



Liste des tableaux

Tableau I.1 Partie du tableau périodique des éléments chimiques de Mendeleïev.	4
Tableau III.1 Les facteurs de forme pseudopotentiels du composé CdTe pour différentes Pressions	33
Tableau III. 2 Paramètre de réseau du composé binaire CdTe en fonction de la Pression	33
Tableau III. 3 Gap d'énergies direct E_F^Γ et indirects E_X^Γ et E_L^Γ pour le composé binaire CdTe	37
Tableau III. 4 Calcul des indices de réfraction du CdTe en fonction de la Pression P.	41
Tableau III. 5 Calcul des indices de réfraction du CdTe à pression nulle pour les quatre modèles comparés aux données théoriques.	46
Tableau III. 6 Validation du modèle empirique et détermination de la précision pour le composé binaire semi-conducteurs CdTe	47
Tableau III. 7 Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence pour CdTe en fonction de la pression p comparées aux données théoriques.	47

Liste des figures



Liste des figures

Figure I.1 Silicium dopé au Phosphore a) $T=0$ °K. b) $T\neq 0$ °K.	3
Figure I.2 Silicium dopé au Bore a) $T=0$ °K. b) $T\neq 0$ °K.	3
Figure I.3 a) structures Sphalérite (group d'espace F43m). b) structure Wurtzite de CdTe (group d'espace P63mc)	5
Figure I.4 Première zone de Brillouin d'un réseau blende de zinc	6
Figure I.5 Diagramme des bandes d'énergie des semiconducteurs	8
Figure I.6 Schéma théorique établi selon la théorie des bandes d'énergie indiquant suivant les cas la position respective de la bande de valence et de la bande d'énergie.	8
Figure I.7 Transitions électroniques entre les extrémums des bandes de valence et de conduction	9
Figure I.8. L'effet d'un champ électrique à l'échelle microscopique	11
Figure II.1 Pseudisation des fonctions d'onde de valence et du potentiel	24
Figure II. 2 Algorithme de la méthode Pseudopotentiel	30
Figure III. 1 La variation du paramètre de réseau en fonction de la Pression du composé binaire CdTe	34
Figure III. 2 La structure de bande électronique du composé binaire CdTe à Pression nulle	35
Figure III. 3 La structure de bande électronique du composé binaire CdTe à pression nulle est à pression 20 Kbar	36
Figure III. 4 La structure de bande électronique du composé binaire CdTe à Pression nulle et à Pressions :0-5-10-15- 20 kbar	36
Figure III. 5 La variation du gap d'énergie E_g en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur CdTe	38
Figure III. 6 La variation du gap d'énergie E_g^x en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur CdTe	39
Figure III. 7 La variation du gap d'énergie E_g^x en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur CdTe	39
Figure III. 8 Gaps d'énergies direct et indirect en fonction de la pression p du composé binaire semiconducteur CdTe	40
Figure III. 9 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Moss	42
Figure III. 10 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Gupta et Ravindra	43
Figure III. 11 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Reddy et Anjaneyulu	44

Figure III. 12 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Ravindra	45
Figure III. 13 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour les quatre modèles	46
Figure III. 14 La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la Pression du CdTe	48

Introduction



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.

Parmi les semi-conducteurs eux-mêmes, les composés formés des éléments III-V de la classification de Mendeleïev qui ont des propriétés physiques remarquables entrant dans la plupart des composants de télécommunication. Par ailleurs les semi-conducteur III-VI ont longtemps constitué le prototype de matériaux radiatifs, grâce à leur grande énergie du gap, conduisant à l'émission de photons situés dans le spectre visible.

Le travail présenté porte sur l'étude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé semi-conducteur CdTe. Notre étude utilise la méthode du pseudo potentiel empirique local. Cette méthode s'est avérée très efficace depuis son introduction dans l'investigation et la compréhension des propriétés électronique, diélectrique et optique des solides.

Ce mémoire se compose de trois chapitres. Après une introduction générale, dans le premier chapitre, nous parlerons de notions fondamentales sur la physique des semi-conducteurs, le deuxième chapitre un rappel des méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques, où une attention particulière sera accordée à la méthode du pseudopotentiel empirique utilisée dans nos calculs. Dans le troisième et dernier chapitre, nous présentons les résultats obtenus dans notre étude ainsi que leurs analyses. Enfin, notre travail se termine par une conclusion générale

Chapitre I

Généralités sur les semiconducteurs



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].

I. 2 Généralités sur les semiconducteurs

Un semi-conducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant. Un semi-conducteur à l'état pur (intrinsèque) n'est pas un bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments uniques les plus utilisés pour les semi-conducteurs sont le Silicium, le Germanium et le carbone.

Des éléments composés tels l'Arséniure de gallium sont aussi couramment pour les semi-conducteurs. Les semi-conducteurs à élément unique se caractérisent par des atomes à quatre électrons de valence [2].

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

I. 2. 1. Types de Semiconducteurs

I. 2 . 1. a Semiconducteur intrinsèque

Un semiconducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour 10^{13} atomes de l'élément semiconducteur).

I. 2 . 1. b Semiconducteur extrinsèque

Un semiconducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semiconducteur intrinsèque (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semiconducteur). Selon la nature des impuretés. Il existe deux types des semiconducteurs extrinsèques [3] :

I. 2 . 1. b. 1 Semiconducteur extrinsèque type n

Considérons par exemple les semiconducteurs 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 un niveau d'énergie appelé niveau donneur qui se situe juste en dessous de la bande de conduction. Dans ce cas, le semiconducteur est dit de type n.

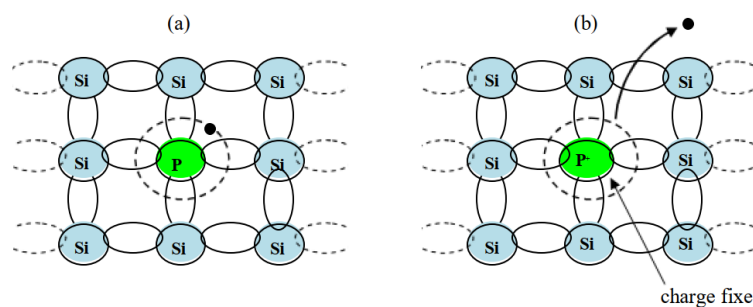


Figure I.1 Silicium dopé au Phosphore a) $T=0$ °K. b) $T\neq 0$ °K.

I. 2 . 1. b. 2 Semiconducteur extrinsèque type p

Si on introduit un atome d'impureté ayant trois électrons de valence (bore, aluminium ou galium). Cet atome ne peut saturer que trois liaisons. Ainsi une liaison par atome d'impureté manque et correspond à un niveau d'énergie situé au-dessus de la bande de valence appelé niveau accepteur. Le semiconducteur est dit de type p.

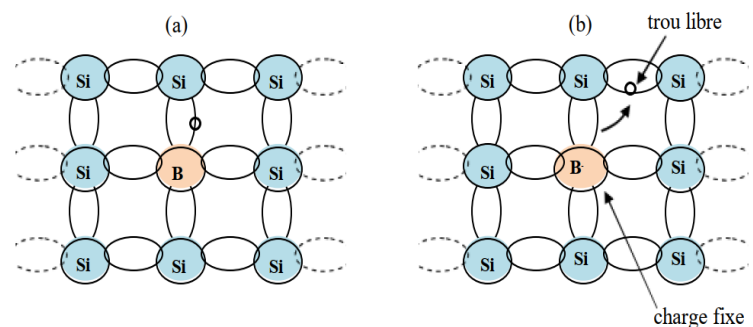


Figure I.2 Silicium dopé au Bore a) $T=0$ °K. b) $T\neq 0$ °K.

I. 3 Les semiconducteurs II-VI

Les semiconducteurs II-VI sont constitués par l'association des atomes de la colonne II avec ceux de la colonne VI de la table périodique des éléments chimiques. Tableau I.1 [4].

Les composés II-VI sont des semiconducteurs à gap direct. Ils ont en général une bande interdite assez large avec un gap supérieur à 2 eV [5,6].

							IIIA	IVA	VA	VIA
							¹⁰ ₅ B	¹² ₆ C	¹⁴ ₇ N	¹⁶ ₈ O
							²⁷ ₁₃ Al	²⁸ ₁₄ Si	³¹ ₁₅ P	³² ₁₆ S
⁵² ₂₄ Cr	⁵⁵ ₂₅ Mn	⁵⁶ ₂₆ Fe	⁵⁹ ₂₇ Co	⁵⁸ ₂₈ Ni	⁶³ ₂₉ Cu	⁶⁵ ₃₀ Zn	⁶⁹ ₃₁ Ga	⁷⁴ ₃₂ Ge	⁷⁵ ₃₃ As	⁸⁰ ₃₄ Se
⁹⁶ ₄₂ Mo	⁹⁸ ₄₃ Tc	¹⁰² ₄₄ Ru	¹⁰³ ₄₅ Rh	¹⁰⁶ ₄₆ Pd	¹⁰⁷ ₄₇ Ag	¹¹⁴ ₄₈ Cd	¹¹⁵ ₄₉ In	¹²⁰ ₅₀ Sn	¹²¹ ₅₁ Sb	¹³⁰ ₅₂ Te
¹⁸⁴ ₇₄ W	¹⁸⁷ ₇₅ Re	¹⁹² ₇₆ Os	¹⁹³ ₇₇ Ir	¹⁹⁵ ₇₈ Pt	¹⁹⁷ ₇₉ Au	²⁰² ₈₀ Hg	²⁰⁵ ₈₁ Tl	²⁰⁸ ₈₂ Pb	²⁰⁹ ₈₃ Bi	²¹⁰ ₈₄ Po

Métaux de transition	Métaux pauvres	Demi-métaux	Non-métaux
----------------------	----------------	-------------	------------

Activate

Tableau I.1 Partie du tableau périodique des éléments chimiques de Mendeleïev.

La dernière orbitale (s) des atomes du groupe II ne possède que deux électrons ; tandis que la couche électronique périphérique des atomes du groupe VI renferme six électrons de valence dont deux sur l'orbitale (s) et quatre sur l'orbitale (p). Un matériau II-VI comportera donc des liaisons hybrides de type sp^3 où chaque cation (élément II) se retrouve dans un environnement tétraédrique d'anions (élément VI) et inversement. Ces liaisons sont polaires, avec un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente [9].

I. 3. 1 Propriétés structurales des semiconducteurs II-VI

Les semi-conducteurs II-VI peuvent avoir des structures cristallines de deux types la structure cubique du type sphalérite (phase bêta) et la structure hexagonale du type Wurtzite, qui toutes les deux se caractérisent par une disposition tétraédrique des atomes. Les deux structures sont stables à température ambiante [7].

Dans ces composés on peut assister, sous certaines conditions, à des transitions d'une structure à l'autre ou bien à la coexistence des deux structures [8].

I. 3. 1. a Structure cristalline du tellure de cadmium (CdTe)

Le tellure de cadmium (CdTe) est un composé semiconducteur de la famille II-VI. Il cristallise soit dans la structure Sphalérite (Zinc Blende), soit dans la structure Wurtzite (hexagonale) (Figure I.3) [9]. Le CdTe appartient au groupe ponctuel $F4_3m$.

La structure Sphalérite est cependant la plus stable à la pression atmosphérique et à température ambiante ($T = 300 \text{ K}$), elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques faces centrées (cfc), l'un constitué d'atomes Cd, l'autre d'atomes Te, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale du cube. La maille élémentaire contient quatre molécules CdTe.

Le cadmium a deux électrons de valence sur une orbitale (s), alors que le tellure a 6 électrons de valences ($5s^25p^4$), le matériau II-VI (CdTe) comportera donc des liaisons hybrides de type sp^3 , où chaque anion se retrouve dans un environnement tétraédrique de cation et inversement. Ces liaisons sont polaires, avec un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente.

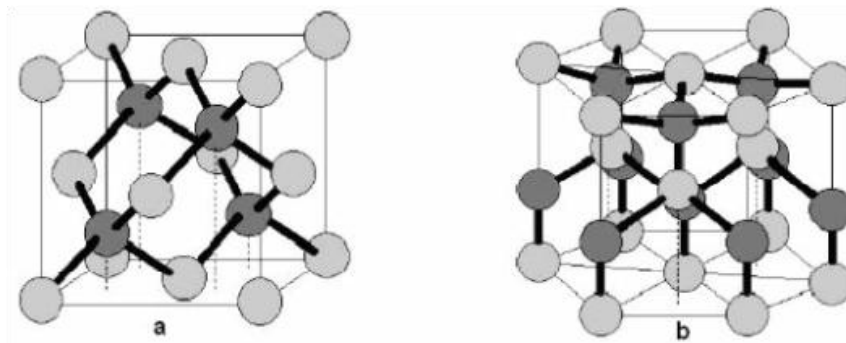


Figure I.3 a) structures Sphalérite (group d'espace $F4_3m$).

b) structure Wurtzite de CdTe (group d'espace $P6_3mc$) [11].

I. 3. 1. b Zone de Brillouin

La structure périodique du réseau réciproque permet de replier l'espace des k et de restreindre le vecteur d'onde à une cellule primitive, la première zone de Brillouin (Figure I.4) [13].

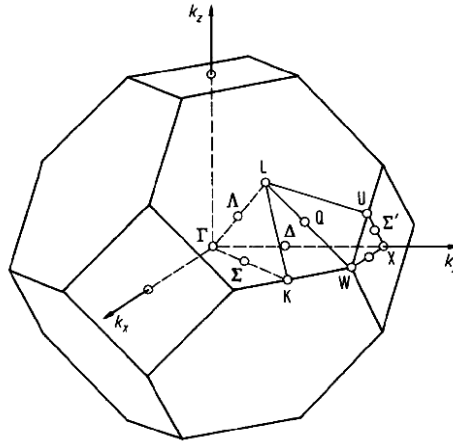


Figure I.4 Première zone de Brillouin d'un réseau blende de zinc [14].

- **Première zone de Brillouin** : est le plus petit volume sous la forme d'un octaèdre tronqué [15].

- **Les points de haute symétrie**

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

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

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

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

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

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

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

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

Z : ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins

de l'octaèdre avec les coordonnées : $K_Z = \frac{2\pi}{a} (1, \frac{1}{2}, 1)$

- **Les lignes de haute symétrie :**

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

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

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

I. 4 Propriétés électroniques

I. 4. 1 Structure de bande

Bien que les électrons d'un atome isolé aient des niveaux d'énergie permis bien définis, le comportement de ces électrons dans un réseau cristallin périodique est différent. Si la distance entre les atomes est suffisamment petite, comme dans le cas du réseau cristallin du silicium, la présence des atomes voisins génère une sorte d'interférence entre les niveaux permis de chaque atome. Cela entraîne une multitude quasi continue d'états autour de chaque niveau permis de l'atome individuel. Cet ensemble d'états, très proches entre eux, est plutôt considéré alors comme une bande d'énergie permise, avec une densité d'états associée.

Les niveaux d'énergie des électrons de valence et le niveau d'énergie d'ionisation génèrent ainsi deux bandes d'énergies permises particulièrement intéressantes, la bande de valence et la bande de conduction, séparées par une bande dépourvue de niveaux permis, nommée bande interdite (Figure I.5). La particularité de ces bandes permises tient au fait que les électrons peuvent circuler librement dans toute la maille cristalline et ainsi générer des courants de conduction électrique (s'agissant d'électrons partagés par les atomes du réseau cristallin) [17].

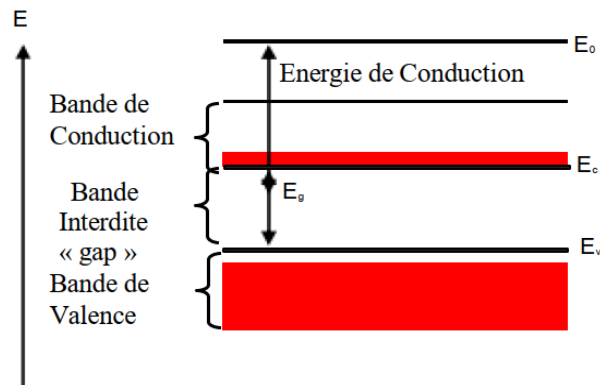


Figure I.5 Diagramme des bandes d'énergie des semiconducteurs

A des températures très basses, la bande de conduction se trouve vide d'électrons et la bande de valence est complètement occupée, car l'énergie thermique n'est pas suffisamment importante pour ioniser les atomes du réseau cristallin. A des températures ambiantes un bon nombre des atomes ionisés ont déjà cédé leurs électrons à la bande de conduction, dans laquelle ils participent à la conduction électrique avec une charge négative.

La bande de valence, même quasiment pleine, présente un nombre de niveaux inoccupés (trous) égal au nombre d'électrons dans la bande de conduction (dans le cas d'un semiconducteur intrinsèque) ; ces niveaux inoccupés peuvent être occupés par un électron de valence d'un atome voisin et ainsi se déplacer dans le réseau cristallin, et participer à la conduction électrique comme s'ils étaient des particules chargées positivement Figure I. 6.

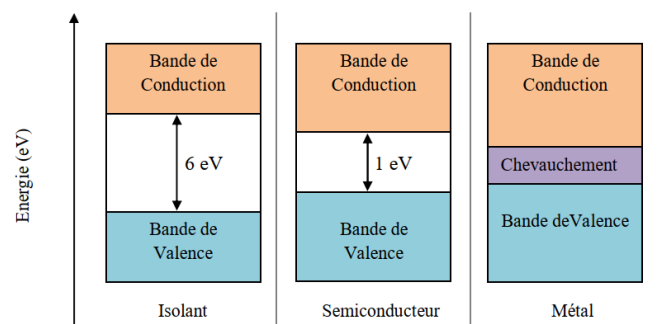


Figure I.6 Schéma théorique établi selon la théorie des bandes d'énergie indiquant suivant les cas la position respective de la bande de valence et de la bande d'énergie.

I. 4. 2 Notion de gap direct et gap indirect

La famille des matériaux semiconducteurs, isolant à bande interdite de l'ordre de 1eV, peut être divisée en deux groupes : les matériaux à gap direct, comme la plupart des composés issus des colonnes III et V du tableau périodique des éléments chimiques, et les matériaux à gap indirect, comme le silicium (colonne IV).

I. 4. 2 . a Gap direct

Un semiconducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde (Figure I.7 a).

I. 4. 2 . b Gap indirect

Un semiconducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k .

La distinction entre les semi- conducteurs à gap direct et indirect est très importante notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semiconducteurs à gap direct que dans les semiconducteurs à gap indirect (Figure .7b).

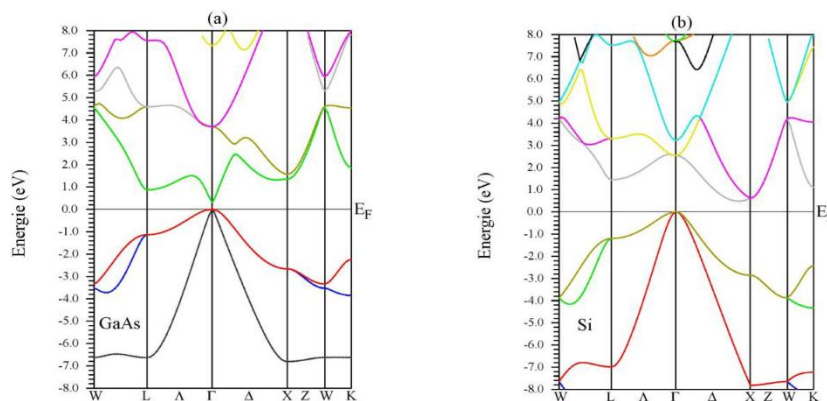


Figure I.7 Transitions électroniques entre les extrêmes des bandes de valence et de conduction. [17]

- a) Semiconducteur à gap direct (GaAs). b) Semiconducteur à gap indirect (Si).

I. 5 Les propriétés optiques

I. 5. 1 L'indice de réfraction

Indice de réfraction n est une grandeur sans dimension caractéristique d'un milieu décrivant le comportement de la lumière dans celui-ci il dépend de la longueur d'onde de mesure. C'est une constante très importante dans le domaine optique, liée aux propriétés optiques et cristallographiques de la matière [21]. Il dépend du type de matériau utilisé.

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

Connaitre l'indice de réfraction d'un matériau est très important dans la réalisation des dispositifs électronique tels que les guides d'ondes, les cellules solaires ..., plusieurs approches ont touchées cet indice qui est lié au gap énergétique fondamental du matériau [22]. Il est utilisé dans la fabrication des lentilles optiques, La réfractométrie est le nom du domaine de mesure d'indice de réfraction.

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

(i) Modèle de Moss [23]

$$n^4 E_g = 108$$

(ii) Modèle de Gupta et Ravindra [24]

$$n = 4.084 - 0.62E_g$$

(iii) Modèle de Reddy et Anjaneyulu [25]

$$E_g e^n = 36.3$$

(v) Modèle de Ravindra [26]

$$n = 4.16 - 0.85E_g$$

I. 6. Propriétés diélectriques

I. 6. 1 Constante diélectrique de haute fréquence

Un matériau est dit diélectrique si ses électrons ne peuvent pas, par définition, se déplacer sur des grandes distances (de façon macroscopique). Autrement dit, c'est un milieu ne pouvant pas conduire le courant électrique. De ce point de vue, on l'appelle parfois isolant électrique tels que le vide, le verre et de nombreux plastiques [27].

Malgré ce caractère d'impossibilité des milieux diélectriques de conduire le courant, ils présentent de nombreux critères électriques. La propriété la plus importante d'un diélectrique est la polarisation sous l'action d'un champ électrique externe. Comme le montre clairement la Figure ci-dessous.

En effet les atomes qui constituent le matériau peuvent se présenter sous forme de dipôles électrostatiques pouvant interagir avec un champ électrique. Cette interaction s'exprime sous forme d'une polarisation liée à ce champ électrique, au niveau microscopique, par une polarisabilité, et au niveau macroscopique, par la susceptibilité électrique.

Les semiconducteurs font partie des matériaux diélectriques et ils sont donc polarisables. Ils sont le siège d'un champ électrique interne s'ils sont soumis à un champ externe, caractérisé par un paramètre déterminant à l'échelle macroscopique qui est la constante diélectrique ϵ [28]. Les semiconducteurs sont alors des matériaux polarisables pouvant conduire de l'électricité conjuguant ainsi les propriétés des conducteurs et des diélectriques.

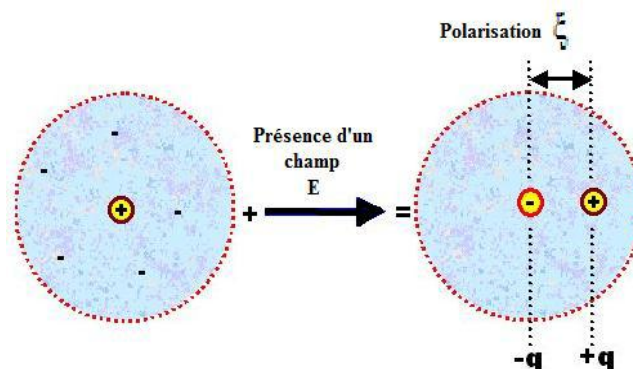


Figure.I.8. L'effet d'un champ électrique à l'échelle microscopique.

I. 7. Applications technologiques

Les semiconducteurs constituent un domaine d'application très important allant des dispositifs optoélectroniques, photovoltaïque, photonique à l'analyse biologique et le diagnostic médical [32].

- Le CdTe est un semi-conducteur permettant la conversion de l'énergie solaire en électricité (cellules solaires).

- Le CdTe est aussi utilisé dans la fabrication de détecteurs de rayonnements (rayons X et gammas) à des fins médicales (imagerie médicale).

I. 8. Conclusion

Les semiconducteurs II-VI sont à gap direct [33] et possèdent une bande interdite suffisamment élevée. Ces propriétés leur confèrent un intérêt particulier pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques fonctionnant dans les régions proche UV et visible du spectre de la lumière. Ils luminescent dans l'ultraviolet avec le MgTe, le rouge avec le CdTe, voire l'infrarouge grâce à l'incorporation de mercure. C'est en particulier dans l'infrarouge que les tellurures ont trouvé leur principale application (domaine militaire). Les diodes électroluminescentes vertes à base de ZnTe et les diodes lasers jaunes-vertes à base de ZnSe sont des exemples de luminescence dans le visible [34].

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] J. H. Davies, The physics of low-dimensional Semiconductors, Cambridge University Press, (1998)
- [2] A. U, Propriétés physiques des semi-conducteurs, 2019/2020
- [3] H. Mathieu. «Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques», Dunod, Paris
- [4] V. HUARD, thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble 1 (2000).
- [5] J. Coulombe, thèse de doctorat, Université de Montréal (2000).
- [6] H. Stocker, F. Jundt, G. Guillaume, Toute la physique, Dunod, Paris (1999).
- [7] P. Baranski, V. Klotchkov, I. Potykeritch, « Electronique des semi-conducteurs », Ed. Mir Moscow (1978).
- [8] O. Halimi, Thèse de doctorat, université Mentouri, Constantine (2005).
- [9] K. Zanio, semiconductors and semimetals, Academic Press New York (1978).
- [10] R.B. Bylisma, P. M .Bridenbaugh, D.H. Olson, A.M. Glass, Appl. Phys .Lett , 51, 889, 1987.
- [11] K.S. Ramaiah, R.D. Pilkington, A.E. Hill, R.D. Tomlinson and A.K. Bhatnagar, Mat. Chem. And Phys. 68: 22 (2001).
- [12] L. Börnstein. Semiconductors, volume III/17.B. Springer, Berlin, (1999).
- [13] S. Richard, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, 2004.
- [14] A.G. Rolo, M.I. Vasilevskiy, N.P. Gaponik, A.L. Rogach, and M.J. M. Gomes, phys. stat.sol.(b)229 ,No.1,433 –437 (2002) .
- [15] A Bechiri, Thèse de doctorat, Université de Mentouri-Constantine,
- [16] F. A. Sellim, V. Swaminathan, F. A. Karoger, Physic. Stat. Sol., A29, 465, (1975)
- [17] B. Benabdallah Nadia, Mémoire de Magister, Université Tlemcen (2006)
- [18] H. Mathieu, Physique des semi-conducteurs et composantes électronique Masson, 1987
- [19] F. Merzag , Thèse de doctorat, université Mohamed Khider Biskra
- [20] T.S. Moss, Proc. Phys. Soc. B 63 (1950) 167- 174.
- [21] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Phys. Status Solidi B 100 (1980) 715–719.
- [22] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609 - 615.
- [23] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Infrared Phys. Technol. 50 (2007) 21–29.

Références bibliographiques

- [24] M. Gerl, J.P. Issi , " Traité des matériaux: Physique des matériaux », Lausanne,1997.
- [25] R.R. Reddy, S. Anjaneyulu, Phys. Status Solidi B 174 (1992) k91–k93.
- [26] B. N. BRAHMI, Thèse de doctorat, Université Abou Bakr Belkaid – Tlemcen (2013).
- [27] P. Faller, Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg (1993).
- [28] F. Tijnoux, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble I (2003).

Chapitre II

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



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. L'équation de Schrödinger

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 [1].

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:

$$\hat{H}(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots)\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) = E\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) \quad \text{II-1}$$

Où :

\hat{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_α 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 présentées dans un cristal [2].

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn} \quad \text{II-2}$$

Avec :

L'énergie cinétique des électrons :

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{T}_i = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad \text{II-3}$$

Où :

N_e : Nombre total des électrons.

m : Masse de l'électron.

L'énergie cinétique des noyaux.

$$\hat{T}_n = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{T}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i \quad \text{II-4}$$

Où :

N_α : Nombre total des noyaux.

M : Masse du noyau.

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

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

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

$$\hat{V}_{nn} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|R_\alpha - R_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}_{\alpha\beta} \quad \text{II-6}$$

$Z_{\alpha\beta}$: charges des noyaux α et β .

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

$$\hat{V}_{en} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{V}_{i\alpha} \quad \text{II-7}$$

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

$$\begin{aligned} & (\hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn})\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) \\ & = E\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) \end{aligned} \quad \text{II-8}$$

L'équation II-8, contient un grand nombre de particules et de ce fait il est difficile de résoudre une telle équation à N éléments, des approximations s'imposent pour simplifier le problème.

II.2.1. Approximation de Base

II.2.1.1. Approximation de Born Oppenheimer

En 1929, Max Born et Julius Robert Oppenheimer [3] ont stipulé l'hypothèse de découplage de l'équation aux valeurs propres des noyaux de celle des électrons d'où l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme d'un système à deux équations indépendantes :

$$(\hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en})\psi_e(R, r) = E_e\psi_e(R, r) \quad \text{II-9}$$

$$(\hat{T}_n + \hat{V}_{nn})\psi_n(R) = E\psi_n(R) \quad \text{II-10}$$

En s'inspirant de l'idée de l'étude du mouvement de l'électron et du noyau, sachant que la masse d'un noyau est presque 1836 fois plus grande que la masse d'un électron, d'où on peut considérer le noyau comme immobile, ce qui rend sa vitesse presque négligeable et par conséquent son énergie cinétique \hat{T}_n nulle.

L'énergie de répulsion Coulombienne des noyaux entre eux \hat{V}_{nn} est considérée comme un terme constant, du fait qu'il ne dépend que de la distance des noyaux qui est traitée comme un paramètre constant dans l'approximation de Born-Oppenheimer, et par un choix conventionnel, \hat{V}_{nn} est considéré nul.

L'équation électronique de Schrödinger a la forme :

$$\hat{H}_e\psi_e(R, r) = E_e\psi_e(R, r) \quad \text{II-11}$$

Où :

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

Dans l'Hamiltonien il ne reste que les termes électroniques :

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} \quad \text{II-12}$$

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

L'étude du mouvement des électrons, en fixant la position des noyaux est une bonne approximation, elle réduit ainsi un grand nombre de variables, mais la résolution de l'équation de Schrödinger reste toujours complexe à cause des interactions électrons-électrons.

Une deuxième approximation s'impose, d'elle-même, c'est l'approximation du champ autocohérent.

II.2.1.2. Approximation du champ autocohérent

II.2.1.2.1. Approximation de Hartree

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 [4] :

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \dots \psi(r_n) \quad \text{II-13}$$

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 électrons se déplace dans le champ moyen des autres électrons et noyaux.

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

$$\hat{H}_i \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad \text{II-14}$$

Avec :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{\text{ext}}(r) + V_i(r) \quad \text{II-15}$$

Où :

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

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

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

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

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

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

On remplace II-17 dans I-16 :

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

L'équation de Schrödinger aura la forme :

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

L'équation II-19 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.

II.2.1.2.2. Approximation de Hartree-Fock

Pour pallier le problème de l'antisymétrie imposant à la fonction d'onde ψ de changer de signe lors de la permutation de deux électrons, l'approximation Hartree-Fock développe la fonction d'onde sous forme d'un déterminant de Slater qui vérifie

le principe de l'exclusion de Pauli [5, 6].

$$\psi(r_1\sigma_1, \dots, r_{N_e}\sigma_{N_e}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1\sigma_1) & \dots & \psi(r_{N_e}\sigma_{N_e}) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_{N_e}(r_1\sigma_1) & \dots & \psi_{N_e}(r_{N_e}\sigma_{N_e}) \end{vmatrix} \quad \text{II-20}$$

Où :

σ_i : représente le spin

En injectant l'équation I-20 dans l'équation de Schrödinger on a :

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

Où :

II.21

$\delta_{\sigma_i \sigma_j}$: Symbole de Kronecker

L'équation II-21 représente l'équation de Hartree-Fock à une particule, où on voit apparaître dans L'Hamiltonien le terme de Hartree et le terme résultant de l'application du principe de l'exclusion de Pauli (terme d'échange), ce qui rend les calculs plus complexes.

II.2.1.2.3. Approximation de Hartree-Fock-Slater

Tenant compte du caractère non local du potentiel d'échange présent dans l'approximation de Hartree-Fock, en 1951, Slater [5] propose un potentiel d'échange local de la forme :

$$V(r) = -6 \alpha \left(\frac{3\rho(r)}{4\pi} \right)^{1/3} \quad \text{II.22}$$

Avec :

α : Paramètre sans dimension.

Malgré la simplicité du potentiel par rapport à celui de Hartree-Fock, la méthode ne conduit pas à des résultats satisfaisants.

II.2.2. Méthodes des pseudopotentiels

La méthode du pseudopotentiel, comme la méthode OPW, utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et 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 [6].

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 [7].

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.

II.2.2. 1 Choix d'une base de la fonction d'onde

La résolution de l'équation d'un système à une seule particule sans interaction, nécessite un calcul d'une fonction d'onde de chaque électron parmi un nombre infini dans le système. Ce problème peut être surmonté en appliquant le théorème de Bloch [8], qui implique que la fonction d'onde d'un électron dans un potentiel périodique peut être exprimée dans une base d'ondes planes.

$$\Psi_i(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

Avec II.23

$$u_i(\vec{r}) = u_i(\vec{r} + \vec{R})$$

Où \vec{k} est le vecteur d'onde, i est l'indice de bande, \vec{R} est le vecteur du réseau direct.

La fonction $u_i(\vec{r})$ est écrite sous la forme :

$$u_i(\vec{r}) = \sum_G C_{iG} \exp(i\vec{G}\vec{r}) \quad \text{II.24}$$

Par suite la fonction d'onde peut être mise sous la forme :

$$\Psi_{ik}(\vec{r}) = \sum_G C_{i,G+\vec{k}} \exp(i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}) \quad \text{II.25}$$

\vec{G} : vecteur du réseau réciproque défini par $\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m$. (m est un entier)

Dans la pratique, on ne peut pas travailler avec un ensemble de base infinie (II-4), il faut limiter cette dernière. Cela est simple pour les ondes planes par la limitation de l'ensemble de vecteur \vec{k} avec la condition $\vec{k} < \vec{k}_{\max}$ qui correspond à une sphère de rayon k_{\max} centrée à l'origine de l'espace réciproque. Par suite tout les vecteurs à l'intérieur de cette sphère sont inclus dans l'ensemble de base. L'énergie associée au vecteur k_{\max} est une énergie spécifique nommée cut-off energy à l'expression suivante [8]:

$$E_{cut} = \frac{\hbar^2 k_{\max}^2}{2m_e} \quad \text{II.26}$$

II.3 Formalisme mathématique du pseudopotentiel (Théorème de Phillips et Kleinman)

Pour résoudre l'équation de Schrödinger, les états électroniques peuvent être divisés en deux régions avec des propriétés différentes ; les états du coeur qui sont fortement localisés et non affectés par l'environnement chimique et les états de valence qui sont responsable aux liaisons chimiques.

Le formalisme de pseudopotentiel est basé sur la méthode (OPW), pour le construire on emploie les états exacts de valence et du coeur Ψ_v, Ψ_c respectivement, vérifiant l'équation de Schrödinger.

$$H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle \dots i = c, v \quad \text{II.27}$$

Les pseudo fonctions d'ondes des états de valence Φ_v , sont données en fonction des ondes planes Ψ_v et des états atomiques occupés du coeur Ψ_c .

$$|\Phi_v\rangle = |\Psi_v\rangle + \sum_c |\Psi_c\rangle \alpha_{cv} \quad \text{II.28}$$

Avec

$$\alpha_{cv} = \langle \Psi_c | \Phi_v \rangle \quad \text{II.29}$$

En remplaçant l'expression (II-27) dans (II-26) avec α_{cv} est donnée par (II-29), nous obtenons :

$$H|\Phi_v\rangle = E_v|\Psi_v\rangle + \sum_c E_c|\Psi_c\rangle\alpha_{cv} \quad \text{II.30}$$

$$= E_v|\Psi_v\rangle + \sum_c (E_c - E_v)|\Psi_c\rangle\alpha_{cv} \quad \text{II.31}$$

E_v, E_c sont les énergies propres de valence et de coeur respectivement.

L'équation (II-31) peut être écrite aussi comme :

$$\left\{ H + \sum_c (E_c - E_v)|\Psi_c\rangle\langle\Psi_c| \right\} |\Phi_v\rangle = E_v |\Phi_v\rangle \quad \text{II.32}$$

Où

$$H^{ps}(E) = H + \sum_c (E_v - E_c)|\Psi_c\rangle\langle\Psi_c| \quad \text{II.33}$$

On définit le pseudo hamiltonien qui donne les mêmes valeurs propres que l'hamiltonien original, mais avec des pseudo-fonctions. La deuxième partie de l'équation (II-33) représente un potentiel supplémentaire de caractère répulsif, l'addition de ce potentiel avec le potentiel réel contenu dans l'hamiltonien H, va donner le pseudopotentiel qui est faible.

$$V^{PK} = V + \sum_c (E_c - E_v)|\Psi_c\rangle\langle\Psi_c| \quad \text{II.34}$$

Le pseudopotentiel (de Philips et Klienman) est défini comme étant la somme du potentiel cristallin V et le potentiel répulsif V_R .

$$V^{PK} = V + V_R \quad \text{II.35}$$

En pratique, les fonctions d'ondes Ψ_v ; représentant les électrons de valence, sont remplacées par des pseudo-fonctions d'onde $\Psi^{ps}(r)$ ou (Φ_v) (figure . L'égalité est imposée à l'extérieur d'une sphère de rayon r_c autour de l'atome et à l'intérieur de cette sphère, la forme de $\Psi^{ps}(r)$ est choisie de manière à supprimer les noeuds et les oscillations dû à l'orthogonalité des fonctions d'onde.

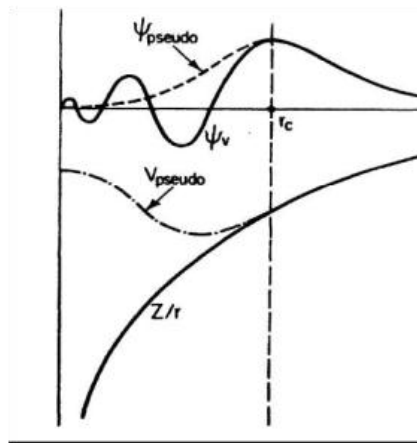


Figure II.1 Pseudisation des fonctions d'onde de valence et du potentiel.

La figure II.1 montre les pseudo états et le pseudo potentiel à l'intérieur de la région du coeur limité par le rayon du coeur r_c aussi les fonctions d'ondes et le potentiel de toute les électrons. Si on néglige l'effet du coeur, le pseudopotentiel devient local et dépend explicitement de la position si non, le pseudopotentiel devient non local et son expression dépend du moment angulaire par ce que V_r est la somme sur les états occupés du coeur. La forme la plus générale du pseudopotentiel est la suivante :

$$V_{ps}(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |lm\rangle V_{ps}^l(r) \langle lm| \quad \text{II.36}$$

- $|lm\rangle$ les harmoniques sphériques.
- V_{ps}^l pseudopotentiel pour un moment angulaire l .

Ce pseudopotentiel est dit pseudopotentiel non local à cause de différentes moments angulaires. Généralement, il y a une petite différence entre les moments angulaires présents dans la région du coeur, ce qui veut dire que pour une valeur de $l > l_{\max}$, l'action du pseudopotentiel sera la même. Cependant la sommation dans (II-36) peut être réduite à l_{\max} et sera écrite sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 V_{ps}(r) &= \sum_{l=0}^{\infty} V_{ps}^{loc}(r) \hat{P}_l + \sum_{l=0}^{l_{\max}} [V_{ps}^l(r) - V_{ps}^{loc}(r)] \hat{P}_l \\
 &= V_{ps}^{loc}(r) + \sum_{l=0}^{l_{\max}} \Delta V_{ps}^l(r) \hat{P}_l \\
 \Delta V_{ps}^l(r) &= V_{ps}^l(r) - V_{ps}^{loc}(r)
 \end{aligned}
 \tag{II.37}$$

Avec

$$\hat{P}_l = |lm\rangle \langle lm|$$

II. 4 Modèles du pseudopotentiel

L'approche de Philips-Klienman n'a pas une large application comme méthode de calcul pour obtenir la structure de bande d'un cristal, malgré la dépendance du moment angulaire des états du coeur. Ce qui fait que des modèles et des potentiels empiriques étaient utilisés pour résoudre un certain nombre de problèmes. Dans certains cas le pseudopotentiel est ajusté par rapport aux données atomiques expérimentales, puis il est utilisé dans le calcul de structure de bandes d'un solide [9].

En supposant que l'interaction d'échange des électrons n'est pas explicitement traitée ce qui justifie d'ignorer la non localité du pseudopotentiel et de le supposer comme fonction simple de la position. C'est le pseudopotentiel local.

II.4.1 Modèle local

La méthode du pseudo-potentiel local [10] dépend du potentiel atomique d'une part, et des facteurs de structures d'autre part. donc dépendant de la variable r pour cela l'hamiltonien d'un électron dans un cristal sera :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V_{ps}(r) \quad \text{II.38}$$

Selon le potentiel $V_{ps}(r)$, plusieurs modèles ont été proposés le plus simple consiste en un potentiel de Coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région du coeur ce potentiel a la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r}, & r \gg r_c \\ -\frac{Ze}{r_c}, & r \geq r_c \end{cases} \quad \text{II.39}$$

Z est le nombre d'électrons.

r_c est le rayon du coeur utilisé pour ajuster les données atomiques .

II.4.2 Modèle de Heine et Aberenkov

Heine et Aberenkov ont introduit un potentiel A considéré comme constant dans la région du coeur pour plus de flexibilité, aura la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad \text{II.40}$$

II.4.3 Modèle d'Ashkroft

Une autre forme de potentiel similaire qui est beaucoup utilisé, c'est le potentiel du coeur inoccupé proposée par Ashkroft donnée par :

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad \text{II.41}$$

II.5 Méthode Empirique du Pseudopotentiel (EPM)

La méthode empirique de pseudopotentiel (EPM) est extensivement appliquée avec succès dans quelques semiconducteurs ayant la structure diamant ou zinc blende. C'est une approche pour calculer les facteurs de forme du pseudopotentiel. Dans cette approximation, les expériences de la réflectivité, la photo émission des rayons X et des ultraviolets, jouent un rôle très important dans la détermination des paramètres entrant dans le calcul de la structure de la bande [10].

II. 5. 1 Méthode empirique locale

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

$$V_{ps}(r) = \sum_g V(g) \exp(ig \cdot r) \quad \text{II.42}$$

Avec

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

g : Vecteur de réseau réciproque.

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

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

$$S_{\alpha}(g) = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_i \exp(ig \cdot r_{i\alpha}) \quad \text{II.43}$$

N_{α} : nombre d'atomes.

$r_{i\alpha}$: 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 :

$r_A(0, 0, 0)$ et $r_B(1/4, 1/4, 1/4)$ (a est le paramètre de réseau), les facteurs de forme et de structure s'écrivent [13] :

$$V(g) = S_A(g)V_A(g) + V_B(g)S_B(g) \quad \text{II.44}$$

Avec

$$S_A(g) = \frac{1}{2} e^{-ig \cdot a}$$

$$S_B(\mathbf{g}) = \frac{1}{2} e^{-ig r_B} \quad \text{II.45}$$

En prenant l'origine au milieu de la droite qui joint les deux atomes A et B

$$r_A = \frac{a}{8} (1,1,1) = -r_B = S \quad \text{II.46}$$

On obtient

$$V(\mathbf{g}) = e^{-igS} V_A(\mathbf{g}) + V_B(\mathbf{g}) e^{igS} \quad \text{II.47}$$

On définit Les facteurs de forme symétriques V^S et antisymétriques V^A par :

$$V^S(\mathbf{g}) = \frac{1}{2} [V_A(\mathbf{g}) + V_B(\mathbf{g})] \quad \text{II.48}$$

$$V^A(\mathbf{g}) = \frac{1}{2} [V_A(\mathbf{g}) - V_B(\mathbf{g})]$$

On remplace (II-29) et (II-30) dans (II-28) on trouve :

$$V_{ps}(\mathbf{r}) = V^S(\mathbf{g}) \cos(gS) + V^A(\mathbf{g}) \sin(gS) \quad \text{II.49}$$

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 résolu 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 $V(\mathbf{G})$ 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 [14].

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

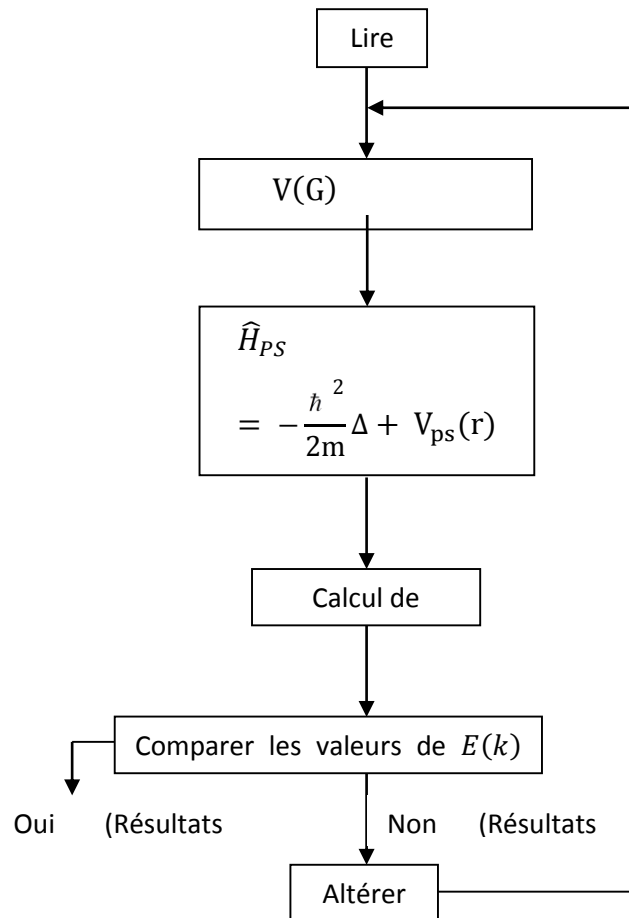


Figure II.2 L'approche du pseudopotentiel empirique local [6]

II.6 Conclusion

Dans le deuxième chapitre nous avons donné la méthode de calcul de la structure de bandes d'énergie de ces matériaux. L'approche du pseudopotentiel est actuellement l'approche la plus utilisée pour la détermination des structures de bandes électroniques et d'autres propriétés telles que la bande interdite.

Le choix de la méthode des pseudopotentiels 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.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] E. Schrödinger, Ann. Phys., 79, 489, (1926) ; E. Schrödinger, Ann. Phys., 79, 361 (1926).
- [2] M. Born, R. Oppenheimer, Ann. Physik., 84, 457, (1927).
- [3] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24, 89, (1928).
- [4] A. Sommerfeld, Z. Phys. 47, 1 (1928).
- [5] C. Kittel, « Quantum theory of solids », Wiley, N. Y. (1963).
- [6] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Dunod université (2001).
- [7] F. Gautier, Journal de physique, C3 (1967).
- [8] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B14: 556, 1976.
- [9] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70 th ed, edited by R.C. Weast, D.R. Lide,
M.J. Astle, and W.H. Beyer, (Chemical Rubber, Boca Raton, 1990), pp. E -106 and E -110
- [10] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B14: 556, 1976.
- [11] A. Continenza, S. Massidda and A. J. Freeman, Phys. Rev. B38: 12996, 1988.
- [12] M. Rohlfing, P. Krüger, and J. Pollmann, Phys. Rev. Lett. 75: 3489, 1995.
- [13] S. Froyen, Phys. Rev. B39: 3168, 1989.
- [14] D. Beeman, J. Comput. Phys. 20: 130, 1976.

Chapitre III

RESULTATS ET DISCUSSIONS



III. 1. Introduction

Les semiconducteurs II-VI sont des composés formés par les éléments des groupes II et VI du tableau périodique, dont les propriétés sont généralement similaires à celles des semi-conducteurs des groupes III-V. Ils représentent actuellement une classe importante de matériaux dans le domaine technologique. Ils sont très intéressants dans le domaine de l'optoélectronique.

Le tellure de cadmium CdTe est utilisé dans l'imagerie médicale est bien connu dans le domaine de l'énergie photovoltaïque pour ces capacités d'absorption et sa largeur de bande interdite adaptée au spectre solaire.

Dans notre travail on étudie l'effet de la pression sur la structure et les propriétés diélectrique du composé semi-conducteur binaire CdTe, les calculs sont sur la Méthode Empirique Pseudopotentiel (EPM).

III. 2 Propriétés structurales

Dans la méthode du Pseudopotentiel Empirique (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 connues aux points choisis dans la zone de Brillouin. La nature empirique de la méthode du pseudopotentiel consiste à ajuster les facteurs de forme symétriques et antisymétriques afin de réaliser l'accord le plus étroit des niveaux d'énergies calculés avec les valeurs théoriques [1].

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

P (kbar)	Vs(3)	Vs(8)	Vs(11)	Va(3)	Va(4)	Va(11)
0	-0.396388 ^a	0.198298 ^a	0.459541 ^a	0.1311 ^a	0.28 ^a	0.708151 ^a
5	-0.396388 ^b	0.200665 ^b	0.462658 ^b	0.131100 ^b	0.28 ^b	0.711223 ^b
10	-0.396388 ^b	0.203019 ^b	0.465645 ^b	0.131100 ^b	0.28 ^b	0.714218
15	-0.396388 ^b	0.205355 ^b	0.468533 ^b	0.131100 ^b	0.28 ^b	0.717174
20	-0.396388 ^b	0.207710 ^b	0.471384 ^b	0.131100 ^b	0.28 ^b	0.720119

Tableau III.1 Les facteurs de forme pseudopotentiels du composé CdTe pour différentes Pressions.

^aRef[2]

^bRef[Nos calcul]

III. 2.1 Paramètre de maille

Le tellure de cadmium (CdTe) est un composé semiconducteur de la famille II-VI. Il cristallise soit dans la structure Sphalérite (Zinc Blende), soit dans la structure Wurtzite (hexagonale) [10]. Le CdTe appartient au groupe ponctuel $F4_3m$.

La structure Sphalérite est cependant la plus stable à la pression atmosphérique et à température ambiante ($T = 300$ K), elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques faces centrées (CFC), l'un constitué d'atomes Cd, l'autre d'atomes Te, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale du cube. La maille élémentaire contient quatre molécules CdTe.

Le calcul de la variation du paramètre de réseau en fonction de la pression est présenté dans le Tableau III. 2

P(kbar)	a (u.atm)	a (Å°)
0	12.2495	6.48 ^a
5	12.2031677	6.46 ^b
10	12.1601370	6.43 ^b
15	12.1199778	6.41 ^b
20	12.0823387	6.39 ^b

Tableau III. 2 Paramètre de réseau du composé binaire CdTe en fonction de la Pression

^aRef[3]

^bRef[Nos calcul]

La variation du paramètre de réseau en fonction de la Pression du composé binaire semiconducteur CdTe est représentée sur la figure III.1

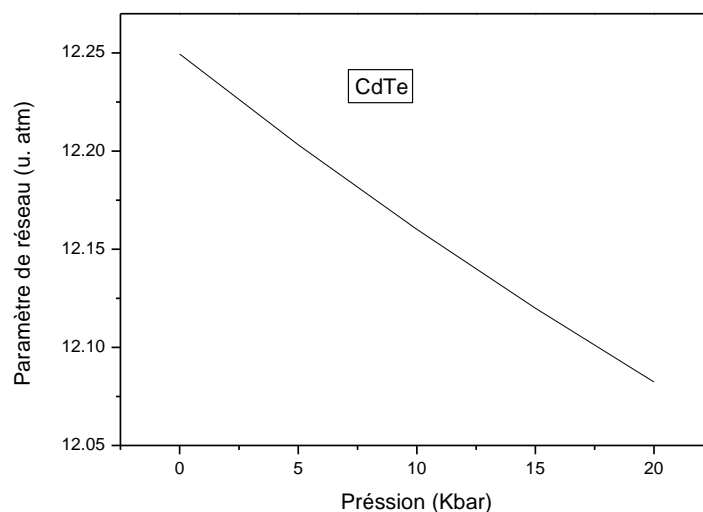


Figure III. 1 La variation du paramètre de réseau en fonction de la Pression du composé binaire CdTe.

On remarque sur la figure III.1 que la variation du paramètre de réseau en fonction de la pression du composé binaire CdTe est une courbe décroissante et linéaire. Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur les deux courbes nous donne l'expression analytique de la forme :

$$a \text{ (u. atm)} = -0.0095 x + 12.249 \quad \text{III. 1}$$

On sait que la pression conduit à la diminution du paramètre de maille, et par conséquent aux changements dans les distances interatomiques. Ces changements conduisent à une variation dans les distributions de charges et des liaisons covalentes, et par conséquent agissent sur tous les paramètres importants, tel que l'énergie du gap, ce qui entraîne une influence sur le type de transition électronique. Donc, il est nécessaire d'étudier la variation des propriétés de ces matériaux sous l'effet de la pression hydrostatique. [4]

III. 2 Etude des propriétés électroniques

III. 2. 1 Structure de bandes électroniques

L'effet de la pression sur la structure de bande électronique du CdTe calculée aux points de hautes symétries de la zone de Brillouin en utilisant l'EPM est représenté sur les figures (III. 2-III. 4) à pression nulle et à pression : 0-5-10-15- 20 kbar respectivement.

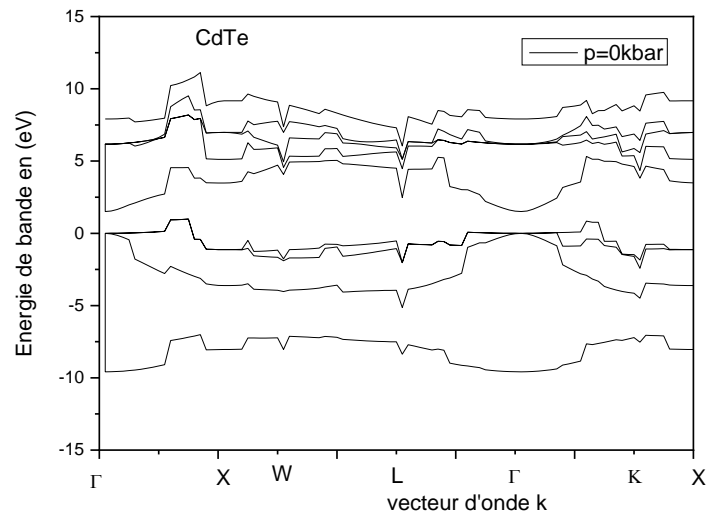


Figure III. 2 La structure de bande électronique du composé binaire CdTe à Pression nulle

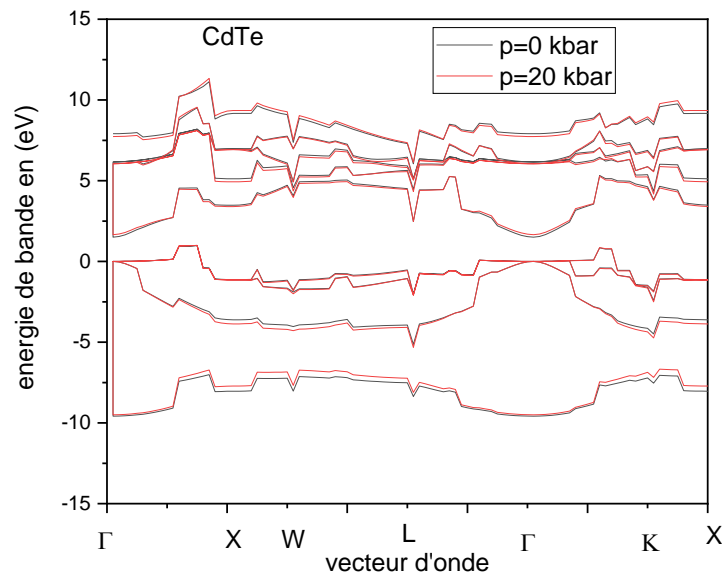


Figure III. 3 La structure de bande électronique du composé binaire CdTe à pression nulle est à pression 20 Kbar

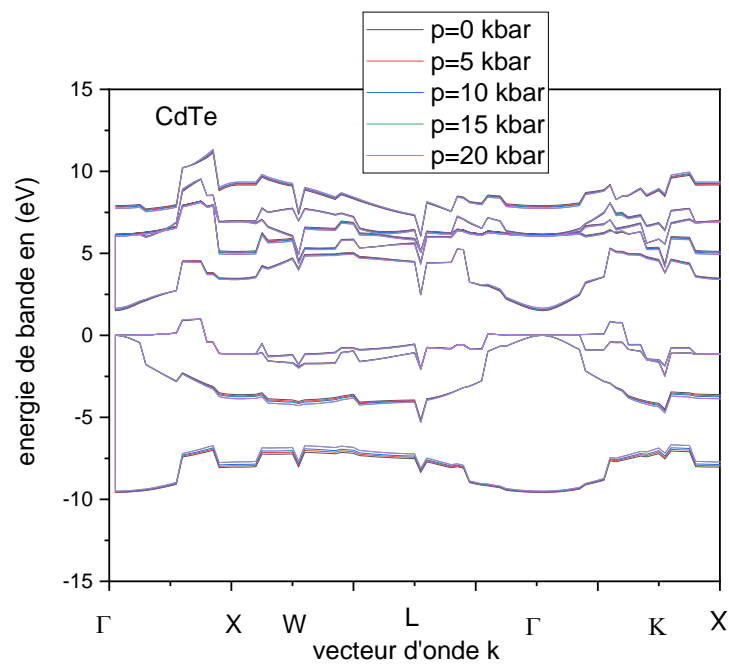


Figure III. 4 La structure de bande électronique du composé binaire CdTe à Pression nulle et à Pressions :0-5-10-15- 20 kbar.

Pour pouvoir interpréter les Figures (III. 2 - III. 4) qui illustrent les structures de bandes du composé binaire CdTe, on note que la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence.

On remarque une similitude de courbes sur les figures (III.2 – III.4), le maximum de la bande de valence est au point Γ et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ , donc le composé binaire CdTe est un semiconducteur à gap direct $E(\Gamma-\Gamma)$ pour différentes pressions.

De plus, on remarque sur les figure (III.3 – III.4) que l'effet de la pression sur la structure de bande électronique du composé binaire CdTe est négligeable.

III. 2. 2 Le gap d'énergie

Les gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{X}^{Γ} et E_{L}^{Γ} du composé binaire CdTe ont été calculés pour différentes pressions. Nos résultats sont présentés dans le Tableau (III.3).

CdTe	E_{Γ}^{Γ} (eV)	E_{X}^{Γ} (eV)	E_{L}^{Γ} (eV)
P=0 kbar	1.50456 ^{a,b}	3.48 ^{a,c}	2.47 ^{a,c}
P=5 kbar	1.543 ^a	3.459 ^a	2.47333 ^a
P=10 kbar	1.58165 ^a	3.4388 2 ^a	2.47683 ^a
P=15 kbar	1.6199 ^a	3.4175 2 ^a	2.4795 ^a
P=20 kbar	1.65955 ^a	3.3964 7 ^a	2.48244 ^a

Tableau III. 3 Gap d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{X}^{Γ} et E_{L}^{Γ} pour le composé binaire CdTe

^aRef[Nos calcul]

^bRef[5]

^cRef[6]

La variation de l'énergie de gap direct du composé binaire CdTe est illustrée sur la Figure III. 5.

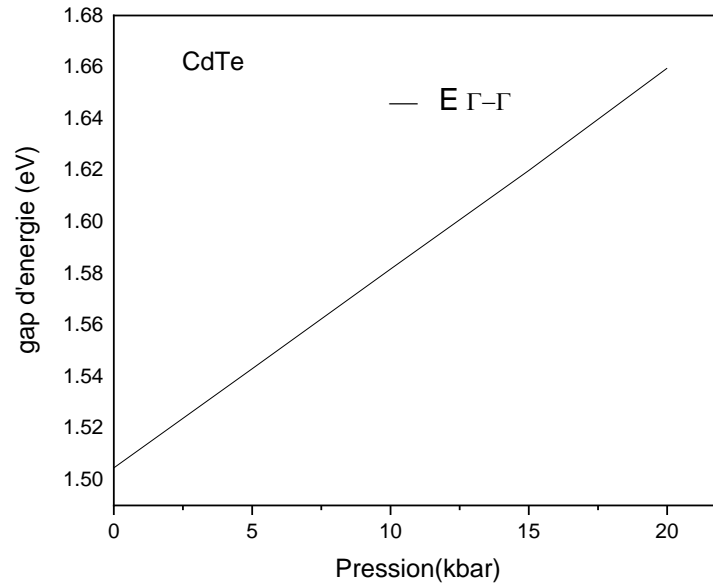


Figure III. 5 La variation du gap d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur CdTe.

Nous observons que le gap direct E_{Γ}^{Γ} suit une interpolation quadratique de la forme :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = 1.50464 + 0.00762 P + 5.77143 \times 10^{-7} P^2$$

Nous remarquons que, le paramètre de courbure de cette équation tend vers zéro ce qui confirme la variation linéaire et monotone du gap direct E_{Γ}^{Γ} en fonction de la pression et que le gap augmente chaque fois que la pression augmente de 0 à 20 kbar, chose qui peut être expliqué physiquement par : lors de l'application d'une pression sur un matériau le paramètre de maille diminue, ce qui provoque l'augmentation des interactions et par la suite l'augmentation du gap énergétique.

La variation de l'énergie de gap indirect du composé binaire CdTe est illustrée sur les Figure III. 6. et Figure III. 7

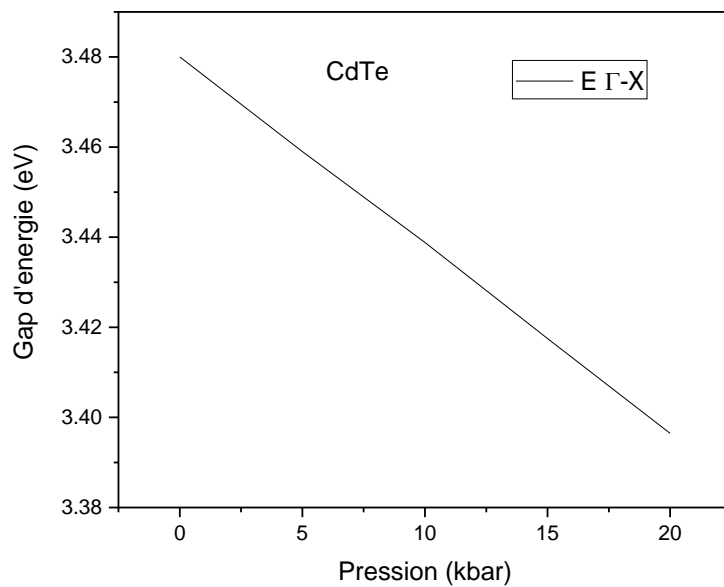


Figure III. 6 La variation du gap d'énergie $E_{\Gamma-X}$ en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur CdTe.

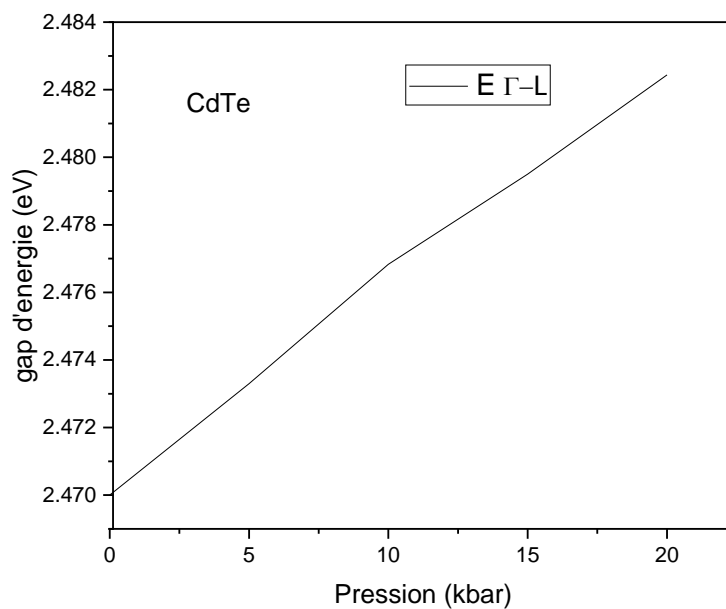


Figure III. 7 La variation du gap d'énergie $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la pression du composé binaire semiconducteur CdTe.

On remarque que le gap indirect E_{Γ}^L sur la figure III. 7 le gap augmente à chaque fois que la pression augmente, par contre le gap indirect E_{Γ}^X sur la figure III. 6 le gap diminue à chaque fois que la pression augmente. Leur variation en fonction de la pression est linéaire et monotone

Les gaps indirects E_{Γ}^X et E_{Γ}^L des Figure (III.6 – III.7), suivent une interpolation quadratique de la forme :

$$E_{\Gamma}^X = 3.4799 - 0.0041P - 3.48571 \times 10^{-6}P^2.$$

$$E_{\Gamma}^L = 2.47 + 7.12 \times 10^{-4}P - 4.51429 \times 10^{-6}P^2$$

Afin de voir s'il y'a une transition de gap pour le CdTe sous pression, nous avons tracé les trois gaps énergétiques en fonction de la pression sur la même figure III. 8. on note que lorsqu'on augmente la pression les trois gaps d'énergies varient d'une façon monotone sans interaction indiquant qu'il y'a pas de transition de gap (il n'y'a pas de croisement entre les gaps énergétiques direct et indirect). Et que le gap direct est le gap fondamental ce qui permet de conclure que le CdTe est un semi-conducteur à gap direct dans l'intervalle de pression [0,20] Kbar.

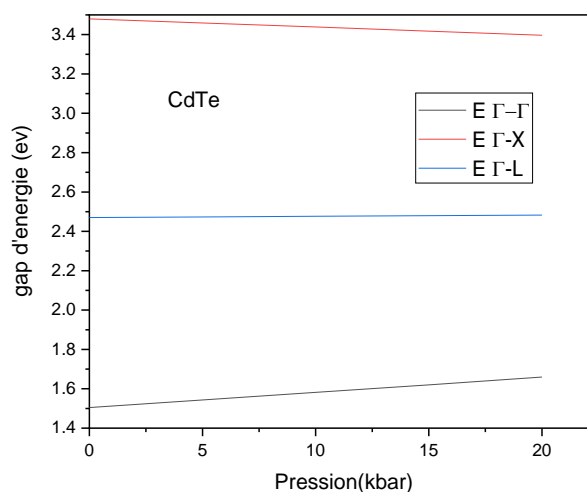


Figure III. 8 Gaps d'énergies direct et indirect en fonction de la pression p du composé binaire semiconducteur CdTe.

III. 3 Etude des propriétés optiques

III. 3. 1 L'indice de réfraction du composé binaire CdTe

L'indice de réfraction (n) des semiconducteurs est d'un intérêt important pour des considérations à la fois fondamentales et appliquées. En outre, les dispositifs tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs, nécessitent une connaissance préalable de l'indice de réfraction. Une corrélation entre (n) et E_g a des répercussions importantes sur la structure de bande des semiconducteurs, il serait utile de trouver une valeur acceptable de (n) d'un matériau quelconque à partir de cette relation. Dans le présent travail, l'indice (n) a été calculé en utilisant quatre modèles différents, qui sont tous directement liés à E_g .

Les valeurs de l'indice de réfraction du CdTe pour tous les modèles sous pression sont présentées dans le tableau (IV-4) comparés aux valeurs théoriques, nous pouvons conclure que le modèle de Ravindra et Srivastava donne des valeurs qui sont proches des valeurs théoriques.

CdTe	n calculé à partir de			
	Modèle de Moss	Modèle de Gupta et Ravindra	Modèle de Reddy et Anjaneyulu	Modèle de Ravindra
P=0kbar	2.91053	3.1509	3.18302	2.88075
P=5 kbar	2.89244	3.12734	3.15809	2.84845
P=10 kbar	2.87461	3.10338	3.13335	2.8156
P=15 kbar	2.85748	3.07966	3.10945	2.78308
P=20 kbar	2.84026	3.05508	3.08527	2.74938

Tableau III. 4 Calcul des indices de réfraction du CdTe en fonction de la Pression P.

III. 3. 1. 1 Modèle de Moss

La Figure III. 9 illustre la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composé binaire CdTe selon le modèle de Moss.

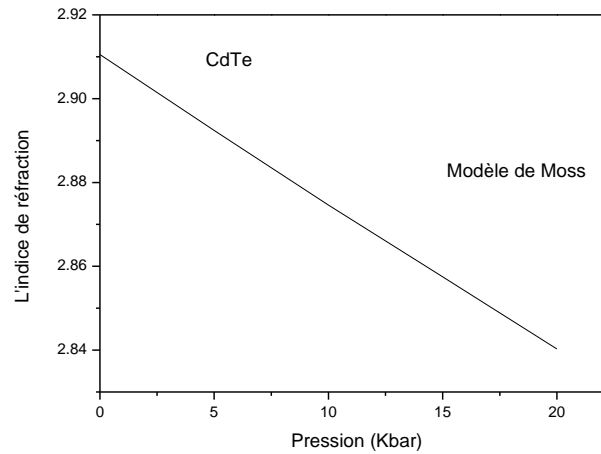


Figure III. 9 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Moss

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

$$n(P) = 2.91051 - 0.00365 P + 6.97143 \text{ E-}6 P^2$$

D'après la Figure III. 9 on peut conclure que qualitativement pour ce modèle la variation est linéaire et monotone et que l'indice diminue à chaque fois que la pression augmente.

III. 3. 1. 2 Modèle de Gupta et Ravindra

La Figure III. 10 illustre la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composé binaire CdTe selon le modèle de Gupta et Ravindra.

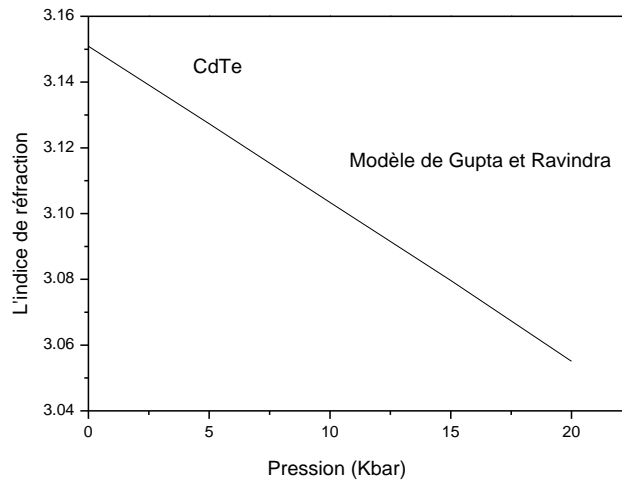


Figure III. 10 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Gupta et Ravindra

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

$$n(P) = 3.15088 - 0.00468 P - 5.14286 \text{ E-6 } P^2$$

D'après la Figure III. 9 on peut conclure que qualitativement pour ce modèle la variation est linéaire et monotone et que l'indice diminue à chaque fois que la pression augmente.

III. 3. 1. 3 Modèle de Reddy et Anjaneyulu

La Figure III. 11 illustre la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composé binaire CdTe selon le modèle de Reddy et Anjaneyulu.

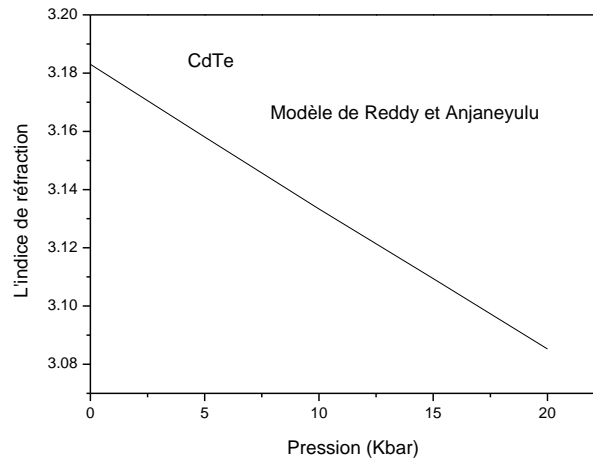


Figure III. 11 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Reddy et Anjaneyulu

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

$$n(P) = 3.183 - 0.00502 P + 6.68571E-6 P^2$$

D'après la Figure III. 11 on peut conclure que qualitativement pour ce modèle la variation est linéaire et monotone et que l'indice diminue à chaque fois que la pression augmente.

III. 3. 1. 4 Modèle de Ravindra

La Figure III. 12 illustre la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression du composé binaire CdTe selon le modèle de Ravindra.

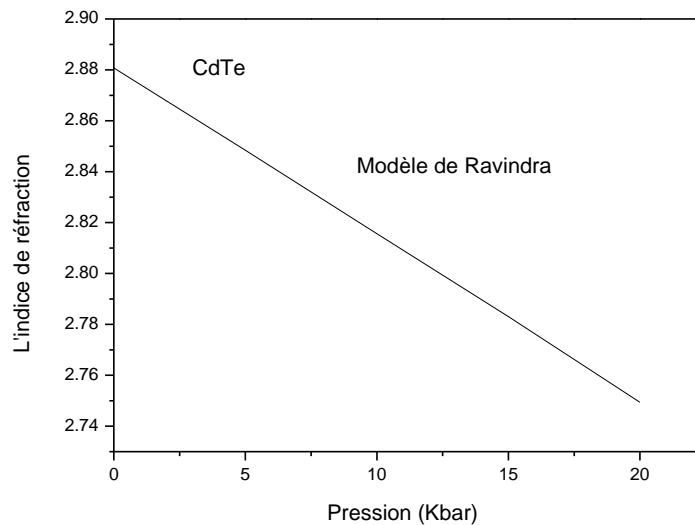


Figure III. 12 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour le Modèle de Ravindra

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

$$n(P) = 2.88072 - 0.00642 P - 7.05714E-6 P^2$$

D'après la Figure III. 12 on peut conclure que qualitativement pour ce modèle la variation est linéaire et monotone et que l'indice diminue à chaque fois que la pression augmente.

Pour l'étude quantitative de la variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression nous avons tracé les quatre modèles de l'indice de réfraction sur la même Figure III. 13

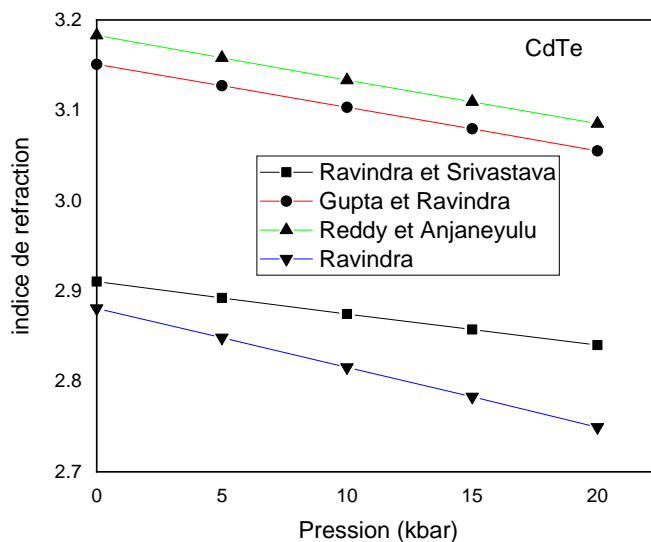


Figure III. 13 La variation de l'indice de réfraction en fonction de la pression P pour les quatre modèles

L'indice de réfraction (n) calculé à partir des différentes relations empiriques utilisées varie d'une manière monotone et linéaire en fonction de la pression.

Les valeurs d'indice de réfraction du CdTe pour tous les modèles à pression nulle sont présentées dans le Tableau III. 5

CdTe	n calculé à partir de				n_{Exp} ^a
	Modèle de Moss	Modèle de Gupta et Ravindra	Modèle de Reddy et Anjaneyulu	Modèle de Ravindra	
P=0kbar	2.91053	3.1509	3.18302	2.88075	

Tableau III. 5 Calcul des indices de réfraction du CdTe à pression nulle pour les quatre modèles comparés aux données théoriques.

^aRef[7]

Composé	Modèle de calcul le plus proche	Valeur de l'erreur relative
CdTe	Modèle de Moss	8.19%

Tableau III. 6 Validation du modèle empirique et détermination de la précision pour le composé binaire semi-conducteurs CdTe

Comparés à la valeur théorique, nous pouvons conclure que le modèle de Moss donne des valeurs qui sont proches des valeurs théoriques.

III. 4 Étude des propriétés diélectriques

III. 4. 1 Constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞}

Basé sur le modèle choisit de l'indice de réfraction (n) qui est le modèle de Moss, la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} a été estimé en utilisant l'expression suivante [1],

$$\epsilon_{\infty} = n^2$$

Nos résultats de calcul de la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} pour le modèle de Moss sont présentés dans le Tableau III. 7

Pression (kbar)	ϵ_{∞}	ϵ exp
0	8.47117	7.21 ^a
5	8.36621	
10	8.26336	
15	8.16522	
20	8.06709	

Tableau III. 7 Valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence pour CdTe en fonction de la pression p comparées aux données théoriques.

^aRef[7]

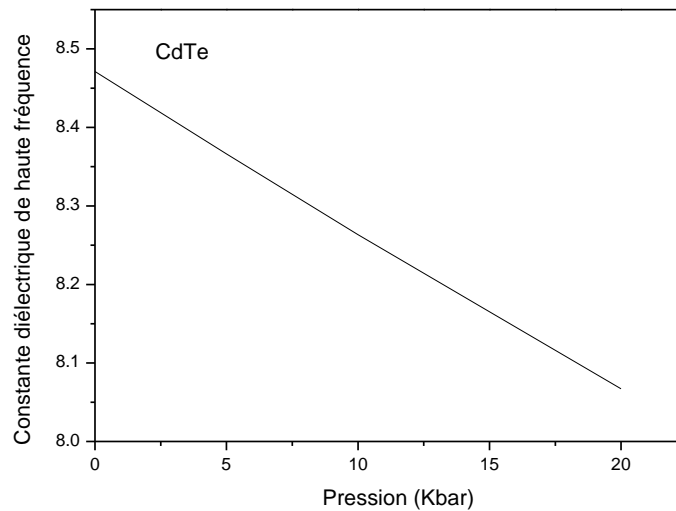


Figure III. 14 La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la Pression du CdTe

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

$$\epsilon_{\infty}(P) = 8.47106 - 0.02123 P + 5.24857E-5 P^2$$

On observe que ϵ_{∞} varie de façon monotone et non linéaire, elle diminue en allant de la pression 0 à 20 Kbar. Ce comportement est qualitativement semblable à celui de l'indice de réfraction en fonction de la pression P. Cela n'est pas surprenant, étant donné que ϵ_{∞} est obtenue à partir de la relation $\epsilon_{\infty} = n^2$. La diminution de la constante diélectrique de haute fréquence lorsqu'on augmente la pression indique que le CdTe est un bon isolant pour les hautes pressions, autrement dit, la capacité du stockage de l'énergie électrique potentiel sous l'influence d'un champ électrique diminue.

III. 5 Conclusion

Nos calculs sont effectués par l'emploi de la Méthode du Pseudopotentiel Empirique EPM. La corrélation de la pression P avec les propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques telles que, le paramètre de maille, la structure de bande, le gap énergétique, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence, du composé binaire CdTe ont été étudiés. Le CdTe est un semi-conducteur à gap direct pour toutes les pressions et que les valeurs des gaps dépendent vraiment de la pression. L'indice de réfraction n calculé à partir des différentes relations empiriques utilisées varie d'une manière monotone et linéaire en fonction de la pression, Ce comportement est similaire pour la variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la pression. Nos résultats coïncident avec résultats expérimentaux.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] F. Mezrag, Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des matériaux semi-conducteurs, (Thèse de doctorat, Université Biskra), (2012).
- [2] N. Bouarissa, S. Saib, M. Boucenna, F. Mezrag, Computational Condensed Matter, V 17 (2018).
- [3] L. Hannachi, N. Bouarissa, Superlattices and Microstructures 44 (2008).
- [4] G. Belgoumri, Etude théorique des propriétés électroniques et optiques des alliages semiconducteurs binaires et/ou ternaires, (Thèse de doctorat, Université Batna), (2019).
- [5] J. Yang, Y. Zidon, Y. Shapira, J. Appl. Phys. 91 (2002) 703.
- [6] A. Kobayashi, O. F. Sankey, J. D. Dow, Phys. Rev. B 25 (1982) 6367.
- [7] D.T.F. Marple, J. Appl. Phys. 35 (1964) 539.

Conclusion générale



Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques telles que, le gap énergétique, l'indice de réfraction n et la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} , du semi-conducteur CdTe dans la phase Zinc-blende.

La méthode des pseudopotentiels utilisée dans ce travail, est un outil de calcul puissant en physique du solide. Cette approche permet avec une grande facilité et un temps de calculs raisonnable par rapport à d'autres méthodes, d'obtenir par simulations informatiques, les propriétés physiques des différents matériaux.

Ces propriétés ont été examinées en fonction de la pression P , la variation du paramètre de maille du composé binaire CdTe en fonction de la pression est monotone et linéaire. Cet effet a conduit à la diminution du paramètre de maille, et par conséquent aux changements dans les distances interatomiques. Ces changements conduisent à une variation dans les distributions de charges et des liaisons covalentes,

Nos résultats ont montré que la bande interdite énergétique du composé binaire semi-conducteur sous investigation varie d'une façon monotone avec l'augmentation de la pression. Nos calculs ont montré aussi que l'effet de la pression est négligeable sur la structure de bande.

L'indice de réfraction a aussi montré un comportement linéaire et monotone par rapport à la pression, cela est vrai pour tous les modèles optiques utilisés. Quantitativement, le modèle de Moss a donné les plus proches valeurs pour l'indice de réfraction comparées aux valeurs théoriques.

Le constant diélectrique de haute fréquence du CdTe diminue lorsqu'on augmente la pression ce qui indique que le CdTe est un bon isolant pour les hautes pressions.

Finalement, L'effet de la pression P sur le composé binaire CdTe influe sur les propriétés structurales, électroniques optiques et diélectriques.