



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université de Larbi Tébessi – Tébessa



Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Département des Sciences de la matière

**MEMOIRE DE MASTER**

Domaine: Sciences de la matière

Filière: Physique

Option: Physique des matériaux

*Thème:*

**Effet du désordre compositionnel sur les propriétés  
électroniques de l'alliage ternaire (Zn, Hg)Te**

*Présenté par:*

*Bouthaina Bradji et Djihad Djebbari*

*Devant le jury:*

Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Nouari Rouag	MCA	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le Samedi 26 / 05 / 2018 à 09<sup>h</sup>:00

## ملخص:

يتضمن عملنا دراسة الخصائص الالكترونية للسبيكة الثلاثية النصف ناقلية  $Zn_xHg_{1-x}Te$  متبلورة في بنية كيريت الزنك. استخدمنا طريقة شبه الكمون (E.P.M) مقرونا مع تقريب البلورة الافتراضية (VCA) بأخذ و بدون اخذ بعين الاعتبار تأثير العشوائية التركيبية. قمنا بحساب عصابات الطاقة  $E_T^X, E_T^L$  و  $E_X^X, E_L^L$  و  $E_T^T$ ، عرض عصابة التكافؤ بالإضافة إلى العصابة ضد متناظرة بدلالة التركيز  $x$  للزنك. كما قمنا بإيجاد بنية عصابات الطاقة لهذه السبيكة. و قد تم تركيز الاهتمام على تأثير العشوائية التركيبية. نستطيع أن نستخلص أن الطرق المستعملة بسيطة و فعالة.

وعموما هناك تطابق مرضي بين نتائجنا المتعلقة بالخصائص الالكترونية مع النتائج التجريبية والنظرية المتوفرة.

***Abstract:***

Our work consists to study the electronic properties of ternary alloy semiconductor  $Zn_xHg_{1-x}Te$  in the structure zinc-blende. We used the empirical pseudopotential method (E.P.M) coupled with virtual crystal approximation (VCA) with and without taking account the compositional disorder effect. We calculated the energy gaps  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  and  $E_X^X, E_L^L$  and  $E_{\Gamma}^X, E_{\Gamma}^L$  and the width of the valence band as well as the antisymmetric gap as a function of composition x of Zinc. We also determined the bands structures of this alloy. A special attention was accentuated on the compositional disorder effect. We can conclude that the methods used are simple and reliable.

Generally, the agreement between our results for the electronic properties, with the experimental and theoretical results available is satisfactory.

**Résumé:**

Notre travail consiste à étudier les propriétés électroniques de l'alliage ternaire semiconducteur  $Zn_xHg_{1-x}Te$  dans la structure zinc-blende. Nous avons utilisé la méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Nous avons calculé les gaps d'énergies  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et  $E_X^X, E_L^L$  et  $E_{\Gamma}^X, E_{\Gamma}^L$  et la largeur de la bande de valence ainsi que le gap antisymétrique en fonction de la composition  $x$  de Zinc. Nous avons déterminé aussi les structures de bandes de cet alliage. Une attention particulière a été accentuée sur l'effet du désordre compositionnel. On peut conclure que les méthodes utilisées sont simples et fiables.

Généralement, l'accord entre nos résultats pour les propriétés électroniques, avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles sont satisfaisant.

## *Remerciements*

*Je remercie en premier lieu Dieu le tout puissant de nous avoir accordé la puissance et la volonté pour terminer ce travail.*

*Je tiens à exprimer ma reconnaissance au **Dr. Abderrachid Bechiri**, Professeur à l'Université de Tébessa, pour m'avoir proposé ce thème de recherche et pour m'avoir dirigé ce mémoire, pour son suivi permanent, ses lectures attentives, ses conseils judicieux et le soutien constant qu'il m'a prodigué au cours de l'élaboration de ce travail. Il a été toujours très proche de nous. Ces critiques et ces conseils nous ont permis d'évoluer et de comprendre le sujet de recherche. Qu'il trouve ici nos respects les plus profonds, c'est un homme au grand cœur, toujours présent et à l'écoute de nos préoccupations.*

*J'exprime mes sincères remerciements à **Dr. Fella Benmakhlouf**, Professeur à l'Université de Tébessa, d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire. Je remercie sincèrement Monsieur **Nouari Rouag** Maître de conférence A, à l'université de Tébessa, d'avoir accepté d'examiner ce travail et de faire partie de ce jury.*

*J'adresse un vif remerciement à l'ensemble des enseignants qui ont assuré notre formation le long de toutes mes années d'études.*

*Mes remerciements les plus sincères à toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin.*

***Djihad Djebbari et Bouthaina Bradji***



## *Dédicace*

*Je dédie ce modeste travail à mes très chers parents, ma mère, exemple de la gentillesse, symbole grandiose de patience, mon père exemple de l'encouragement.*

*A la mémoire de mon grand père Saïd.*

*A l'esprit de grande mère.*

*A mes adorables frères: Hayder, Ossama et mon beau-frère farid.*

*A mes chères sœurs : Amel, Selma, Roufaïda, Chaima et Tassnime.*

*A ma nièce l'ange Sabaa.*

*A mon mari: Cherif pour son soutien et ses encouragements.*

*A ma belle- famille et surtout ma belle- mère Farida.*

*A mon binôme: Djihad.*

*Une spéciale dédicace à une personne qui a été très paternaliste et patient avec moi:*

***Prof. Abderrachid Bechiri.***

*A tous ceux que j'aime, Je dédie ce travail.*

***Bouthaina Bradji***



# Dédicace

*Merci Allah (mon dieu) de m'avoir donné la capacité d'écrire et de réfléchir, la force d'y croire, la patience d'aller jusqu'au bout du rêve et le bonheur de lever mes mains vers le ciel et de dire*

*" Ya Mouïn "*

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

*A mon père, école de mon enfance, qui a été mon ombre durant toutes les années des études, et qui a veillé tout au long de ma vie à m'encourager, à me donner l'aide et à me protéger.*

*Que dieu les gardes et les protège.*

*A mon adorable frère Aimen et ma belle sœur Sana.*

*A ma grande mère.*

*A toute la famille Djebbari et la famille Mecherie.*

*A mes meilleurs amis.*

*A tous ceux qui me sont chères.*

*A tous ceux qui m'aiment.*

*A tous ceux que j'aime.*

*Je dédie ce travail.*

*Une spéciale dédicace à une personne qui a été très paternaliste avec nous: Prof. Abderrachid Bechiri. Trouvez dans ce modeste travail mes sincères gratitude et reconnaissances. Ce travail est le votre.*

***Djebbari Djihad***





*Sommaire*



Sommaire

الملخص.

Abstract.

Résumé.

Dédicace.

Remerciement

Liste des tableaux..... i

Liste des figures..... ii

Liste des symboles. ....iii

- **Introduction générale**.....1

### *Chapitre 1*

#### **Les méthodes de calcul des structures de bandes**

I.1. Introduction.....4

I.2. Les hypothèses fondamentales d'un calcul de structure de bandes.....4

I.3. Difficultés d'un calcul de structure de bandes.....4

I.4. L'Hamiltonien total du cristal.....5

I.5. Les approximations de base.....5

- I.5.1. L'approximation adiabatique.....5

- I.5.2. L'approximation à un électron.....6

I. 6. Les théories de calcul élémentaires.....6

- I. 6.1. La théorie de l'électron presque libre.....6

- I.6.2. La théorie des liaisons fortes.....8

I. 7. Les méthode de calcul des structures des bandes.....8

- I.7.1. La méthode cellulaire.....8

- I.7.2. La méthode des ondes planes.....9

- I.7.3. La méthode des ondes planes Augmentées(APW).....10

- I.7.4. La méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW).....10

- I.7.5. La méthode multi-bandes (K.P).....11

- I.7.6. Méthode de Kohn-Korinnng-Rostoker (K.K.R).....12

- I.7.7. La méthode des pseudopotentiels (P.M).....13

- **Références**.....14

### *Chapitre 2*

#### *La méthode du pseudopotentiel*

II.1. Introduction.....15

II.2. La méthode du pseudopotentiel.....	15
II.3. Formalisme mathématique .....	15
II.4. Les Caractéristiques du pseudopotentiel .....	17
II.5. Les modèles des pseudopotentiels.....	17
II.5.1. Le modèle local.....	17
II.5.1.a. Le premier modèle.....	18
II.5.1.b. Le modèle d'Ashcroft .....	18
II.5.1.c. Le modèle de Heine-Abarenkov.....	18
II.5.2. Le modèle non local.....	18
II.5.2.a. La fonction Heine et Abarenkov.....	18
II.5.2.b. La fonction de Gauss.....	19
II.5.2.c. La fonction d'Ashcroft.....	19
II.6. La méthode empirique du pseudopotentiel.....	20
II.7. La méthode de calcul du (E.P.M).....	21
II.8. Approximation du cristal virtuel (VCA).....	22
II.9. Approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).....	23
▪ Références.....	24

### Chapitre 3

#### Résultats et discussions

III.1. Introduction.....	25
III.2. Etude des propriétés électroniques.....	25
III.2.1. Etude des gaps énergétiques de l'alliage ternaire $Zn_xHg_{1-x}Te$ .....	26
III.2.2. Etude des structure de bandes électronique de l'alliage ternaire $Zn_xHg_{1-x}Te$ ..	37
III.2.3. L'effet de concentration sur les structures de bandes.....	43
▪ Références.....	45
▪ <b>Conclusion générale</b> .....	46

**Liste des tableaux**

N°	Titre	Page
III-1	<i>Les facteurs de forme symétriques (<math>V_s</math>) et antisymétriques (<math>V_A</math>) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs ZnTe et HgTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau <math>a</math> en (u.a) et en (<math>Å</math>).</i>	26
III-2	<i>Les gaps énergétiques aux points <math>\Gamma</math>, X et L de l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math></i>	27
III-3	<i>Le gap antisymétrique des alliages ternaires <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math></i>	34
III-4	<i>La largeur de la bande de valence au point <math>\Gamma</math> des alliages ternaires <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math></i>	36
III-5	<i>La variation du gap antisymétrique <math>E^X_{(2-1)v}</math> et l'ionicté des composants binaires.</i>	40

Liste des figures

N°	Titre	Page
II-1	<i>Le potentiel d'interactions entre deux atomes en fonction de la distance <math>r</math></i>	16
II-2	<i>Fonction de Heine - Abarenkov</i>	19
II-3	<i>Fonction de Gauss</i>	19
II-4	<i>La fonction d'Ashcroft</i>	20
II-5	<i>L'organigramme d'E.P.M.</i>	22
III-1	<i>la variation du gap <math>E_{\Gamma}^{\Gamma}</math> en fonction de la concentration "x" de Zinc de l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.</i>	28
III-2	<i>la variation du gap <math>E_{\Gamma}^L</math> en fonction de la concentration "x" de Zinc de l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel</i>	29
III-3	<i>la variation du gap <math>E_{\Gamma}^X</math> en fonction de la concentration "x" de Zinc de l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel</i>	30
III-4	<i>la variation du gap d'énergie <math>E_X^X</math> en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel</i>	31
III-5	<i>la variation du gap d'énergie <math>E_L^L</math> en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel</i>	31
III-6	<i>gaps d'énergies direct et indirects en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> calculés sans tenant compte de l'effet du désordre compositionnel</i>	32
III-7	<i>gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.</i>	33
III-8	<i>la variation du gap antisymétrique d'énergie <math>E_{(2-1)_v}^X</math> en fonction de la composition "x" de l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel</i>	35
III-9	<i>la variation de la largeur de bandes de valence <math>E_{(4-1)_v}^{\Gamma}</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel</i>	37
III-10	<i>la structure de bande électronique de la composition binaire <math>HgTe</math></i>	38
III-11	<i>la structure de bande électronique de la composition binaire <math>ZnTe</math></i>	38
III-12	<i>la structure de bande électronique de l'alliage ternaire <math>Zn_{0.1}Hg_{0.9}Te</math></i>	41
III-13	<i>la structure de bande électronique de l'alliage ternaire <math>Zn_{0.3}Hg_{0.7}Te</math></i>	41
III-14	<i>la structure de bande électronique de l'alliage ternaire <math>Zn_{0.5}Hg_{0.5}Te</math></i>	42
III-15	<i>la structure de bande électronique de l'alliage ternaire <math>Zn_{0.7}Hg_{0.3}Te</math></i>	42
III-16	<i>la structure de bande électronique de l'alliage ternaire <math>Zn_{0.9}Hg_{0.1}Te</math></i>	43
III-17	<i>l'effet de la concentration "x" de Zinc sur les structures de bandes de l'alliage ternaire <math>Zn_xHg_{1-x}Te</math></i>	44

Liste des Symboles

Symboles	Sens physique
$T_e$	L'énergie cinétique des électrons.
$T_n$	L'énergie cinétique des noyaux.
$V_{ee}$	L'énergie d'interaction des électrons (deux par deux).
$V_{en}$	L'énergie d'interaction entre électron et noyaux.
$V_{nn}$	L'énergie d'interaction des noyaux (deux par deux).
$R$	Les coordonnées des noyaux.
$r$	Les coordonnées des électrons.
$E$	L'énergie totale du système.
$\psi$	La fonction d'onde du système.
$H$	L'Hamiltonien.
$V$	Potentiel moyen cristallin.
$E_a$	L'énergie de l'atome isolé.
$\phi_c$	L'Etat atomique qui occupe le cœur.
$V_R$	Potentiel répulsive positif.
$V_c$	Potentiel attractif du cœur négatif.
$\hbar$	Constante réduite de Planck.
$m$	La masse de l'électron.
$E_v$	L'énergie de valence.

$E_c$	L'énergie du cœur.
$Z$	La valence atomique
$r_c$	Le rayon du cœur ionique.
$A$	Potentiel constant dans la région du cœur.
$V_L(\vec{r})$	Potentiel locale.
$V_{NL}(\vec{r})$	Potentiel non locale.
$A_I(E)$	L'énergie des états profonds.
$f_I(r)$	La fonction qui représente l'effet de l'état du cœur.
$P_I$	L'opérateur de projection de la 1 <sup>ème</sup> composante du moment angulaire.
$\vec{R}$	Le vecteur du réseau direct.
$\vec{\tau}$	Le vecteur de translation du réseau direct.
$V_a(\vec{G})$	Le facteur de forme.
$S(\vec{G})$	Le facteur de structure.
$n$	L'indice de la bande.
$E_{\text{exp}}^{ij}$	Les énergies observées expérimentalement.
$E_{\text{cal}}^{ij}$	Les énergies calculées.
$N_a$	Le nombre d'atomes de base.
$N$	Le nombre des paramètres du pseudopotentiel empirique.
$V_s(3)$	Les facteurs de formes symétriques à G(111).
$V_a(3)$	Les facteurs de formes antisymétriques à G(111).



*Introduction générale*

## **Introduction générale**

Depuis la première réalisation de dispositifs électroniques dans les années 1950, tel que la diode et le transistor, les matériaux semi-conducteurs portés par leur importance industrielle ont suscités un vif intérêt de la communauté scientifique tant dans leur analyse expérimentale que dans leur développement théorique [1].

Les alliages représentent une classe importante des matériaux utilisés dans l'industrie des nouvelles technologies, couvrant une gamme allant des alliages métalliques mis au point dans le but de contrôler les propriétés mécaniques et magnétiques de ces systèmes, aux cristaux semi-conducteurs mixtes où les propriétés électroniques sont ajustées par la teneur en un composant de l'alliage [1].

La réalisation d'alliages à base de semi-conducteurs II-IV semble la mieux avancée avec la commercialisation à moindre coût de diodes laser et de diodes électroluminescentes exploitables dans la région faible du visible (2.0-2.2 eV) [2].

En générale, les composés semiconducteurs binaires II-VI sont des composés formés à partir d'éléments de la 2<sup>ème</sup> colonne de la classification périodique des éléments : Zinc (Zn), Cadmium (Cd), Mercure (Hg), Copernicium (Cn) et l'un des éléments de la 6<sup>ème</sup> colonne.

Ici le travail de notre mémoire est consacré à l'étude d'un alliage ternaire semi-conducteur de type II-VI de la forme  $A_xB_{1-x}C$ . Ces types des alliages sont miscibles entre eux en toute proportion. Notre alliage d'intérêt est  $Zn_xHg_{1-x}Te$ . Ces composés binaires sont ZnTe et HgTe. ZnTe a été d'un grand intérêt en raison de son faible coût et son meilleur coefficient d'absorption optique [3].

Le tellure de zinc (ZnTe) un candidat favorable pour des technologies optiques telles que les dispositifs luminescents dans le visible et le proche UV, les mémoires optiques de haute densité, les conducteurs transparents, les photo-détecteurs et les cellules solaires [4, 5].

Le tellure de zinc a une bande interdite directe de 2,21 à 2,26 eV à température ambiante. Il est utilisé comme substrat pour la croissance de CdTe et les hétérostructures basées sur ZnTe et HgTe est utilisé pour l'optique infrarouge. Lorsqu'il est dopé au vanadium, ZnTe devient un matériau semi-conducteur photo réfractif et a de bonnes applications potentielles pour la limitation de puissance optique. Aussi, il a été étudié pour ses utilisations comme laser à semiconducteur à émission de lumière visible [6]. Il contient des excellentes caractéristiques, compris un grand écart d'énergie, une faible résistivité et une grande transparence de la gamme visible, il est utilisé dans divers dispositifs microélectroniques et optoélectroniques, et il a été largement étudié pour les applications dans la diode électroluminescente verte [7].



Alors que, le tellure de mercure est caractérisés par l'inversion de la structure de bandes des particules légères de HgTe et les nouvelles possibilités d'élaboration, ce type de matériau a attiré l'attention des théoriciens dès 1979 montrant l'intérêt que pouvait avoir ces super réseaux dans les applications comme détecteurs d'infrarouge, spécialement aux grande longueurs d'onde. Le faible écart du paramètre de maille de HgTe induit malgré tout une contrainte bi axiale aux interfaces ce qui peut avoir comme effet de provoquer l'ouverture d'une bande interdite dans HgTe et de modifier les bandes du super réseau [8], HgTe est connu pour être un composé semi-métallique avec une structure de zinc blende. Il présente, pour une forme poly cristalline, une structure de bande inversée. Ainsi, l'écart interdit dans HgTe est nul [9].

Ce mémoire est composé de trois chapitres en plus d'une introduction générale et une conclusion générale, alors que :

- Le premier chapitre présente l'étude de quelques méthodes de calculs de la structure de Bande.
- Le deuxième chapitre rassemble un aperçu sur la méthode du pseudopotentiel empirique.
- Le troisième chapitre est consacré à l'interprétation des résultats obtenus dans notre travail de recherche.

**Références :**

- [1] A. Berghouth, thèse de doctorat, Université de Paul Verlain-Metz, (France), 2007.
- [2] A. Waag, T. Litz, F. Fischer, H.-J. Lugauer, T. Baron, K. Schüll, U. Zehnder, T. Gerhard U. Lunz, M. Keim, G. Reuscher and G. Landwehr, J. Cryst. Growth, Appl. Phys 1998, **10**, 185.
- [3] S. Jeetendra, H. Nagabhushana, K. Mrudula, C. S. Naveen, P.Raghu, H. M. Mahesh, Int. J. Electrochem. Sci , 2014, **9**, 2944.
- [4] D. Lee, J. Zucker, M. D. Divino, R. F. Austin, R. D. Feldman, K. L. Jones et A.M. Johnson, Appl. Phys. Lett, 1991, **59**, 1867.
- [5] S. Valette, G. Labrunie, J.C. Deutsch, J. Lizet, Appl. Opt., 1977, **16**, 1289.
- [6] R. Amutha , A. Subbarayan, R. Sathyamoorthy, K. Natarajan. S. Velumani, J. New Mat. Electrochem. Systems, 2007, **10**, 27.
- [7] W. A. Syed, S.Ahmed, M. S. Saleem, N. A. Shah, Chalcogenide Letters, 2015, **12**, 215.
- [8] A. El Abidi , thèse de doctorat, université Ibn Zohr, Agadir, (Maroc), 2010.
- [9] M. A. M. Seyam, A. Elfalaky, Vacuum, 2000, **57**, 31.

# *Chapitre 1*

## *Les méthodes de calcul des structures des bandes*

## I.1. Introduction

L'étude des structures des bandes permet d'interpréter plusieurs phénomènes physiques, qui se déroulent dans les corps solides. Dans ces corps, cette structure peut être obtenue en tenant compte de toutes les interactions existant entre les noyaux et les électrons. Les résolutions des équations générales sont impossibles, mais on peut toujours adopter des modèles simplifiés pour pouvoir obtenir des solutions approchées [1].

Dans ce chapitre, nous allons étudier quelques méthodes de calcul des structures des bandes.

## I.2. Les hypothèses fondamentales d'un calcul des structures des bandes :

Tout calcul des structures des bandes repose sur deux hypothèses essentielles :

- 1<sup>ère</sup> Hypothèse:** Le système électronique se réarrange adiabatiquement au mouvement des noyaux.  
**2<sup>ème</sup> Hypothèse:** la fonction d'onde de l'état de base d'un système à N électrons en interaction est approchée par un déterminant de Slater N x N à partir de N fonctions monoélectronique inconnues [2].

## I.3. Difficultés d'un calcul des structures des bandes :

Outre les difficultés liées à un calcul numérique très lourd, nous insistons en conclusion sur deux points importants [2] :

- ❖ Self consistence : les équations de Hartree Fock Slater (HFS) doivent avoir pour solutions des fonctions  $\psi(r)$  créant le potentielle  $V_c + v(r)$  qui apparait précisément dans la fonction suivante [2] :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + v(r) + V_c(r) + V_{ech}^{HF}(r) \right\} \psi(r) = \varepsilon \psi(r) \quad (I-1)$$

La self consistence assurée par itération n'est faite que très rarement, cependant, les calculateurs actuels permettent une self consistence de plus en plus satisfaisante : à cet égard, le calcul d'Herman pour le germanium est remarquable puisque chaque niveau est self consistence à  $\pm 0.05 \text{ eV}$  [2, 3].

- ❖ Calcul des bandes et mesures expérimentales : Un calcul du type HFS s'appuie nécessairement sur un certain nombre d'approximations basées sur un traitement incorrect des corrélations ; de plus, à l'intérieur même de la théorie de HF, n'est plus exact si on utilise une approximation pour le potentiel d'échange. On ne doit donc pas s'attendre à une coïncidence exacte entre un calcul HFS self consistant par exemple et ensemble de données expérimentales. C'est pourquoi Herman a récemment calculé la structure de bandes de germanium en ajoutant au potentiel self consistant HFS un potentiel perturbateur déterminé par un ajustement expérimentale de certains niveaux : l'erreur introduite par le calcul HFS semble, dans ce cas, être assez faible  $\Delta E \approx 0.3 \text{ eV}$  dans le spectre de largeur 5 eV ; elle croit lorsque la zone d'énergie considérée s'élargit [1].

**I. 4. L'Hamiltonien total du cristal :**

Le cristal est un ensemble de noyaux et des électrons en interaction. il est décrit par l'Hamiltonien total définit par [4] :

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

$T_e$  : Représente l'énergie cinétique des électrons.

$T_n$  : L'énergie cinétique des noyaux.

$V_{ee}$  : L'énergie d'interaction des électrons (deux par deux).

$V_{en}$  : L'énergie d'interaction entre électron et noyaux.

$V_{nn}$  : L'énergie d'interaction des noyaux (deux par deux).

Les énergies propres et les fonctions d'ondes propres sont données par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$H \psi (R, r) = E \psi (R, r) \quad (\text{I-3})$$

$R$  représente les coordonnées des noyaux et  $r$  celle des électrons.  $E$  l'énergie totale du système et  $\psi(R, r)$  la fonction d'onde du système [5].

Cette équation donne précisément les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde du solide, mais ne peut pas être résolu sauf si on incorpore approximation [5].

**I. 5. Les approximations de base :****I. 5. 1. L'approximation adiabatique :**

L'une des premières approximation utilisée , lorsqu' on veut résoudre l'équation de Schrödinger pour les systèmes complexes contenant un ou deux électrons , c'est l'approximation dite adiabatique de Born Oppenheimer, elle sépare le mouvement de l'électron de celui de noyau, en se basant sur la notion de différence de masse entre celle du noyau et celle de l'électron, par conséquent, on peut négliger en 1<sup>ère</sup> approximation, l'énergie cinétique des noyaux devant celle des électrons.

Les états propres du système sont alors caractérisés par des fonctions d'onde qui sont produit d'une fonction d'onde électronique par une fonction d'onde nucléaire [6, 7].

$$\psi(R, r) = \psi_n(R) \psi_e(R, r) \quad (\text{I-4})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$[T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn}] \psi_n(R) \psi_e(R, r) = E \psi_n(R) \psi_e(R, r) \quad (\text{I-5})$$

L'Hamiltonien est découpé en deux Hamiltoniens, l'un électronique et l'autre nucléaire lié aux noyaux, ces derniers étant supposés fixes à leurs positions d'équilibre et l'équation de Schrödinger devient :

$$[T_e + V_{ee} + V_{en}] \psi_e(R, r) = E_e(R) \psi_e(R, r) \quad (\text{I-6})$$

Pour connaître l'énergie et la fonction du système. Il faut résoudre cette équation à plusieurs variables, connue sous le nom du problème à N corps qui reste pratiquement impossible à résoudre.

Pour simplifier le problème. On fait appel à l'approximation à un électron dite l'approximation de Hartree-Fock [7].

## 5. 2. L'approximation à un électron :

Cette approximation ramène le problème à N corps au problème à un électron [7, 8], elle suppose que chaque électron évolue dans un potentiel moyen, créé par les noyaux et les autres électrons, se problème est simplifié, en représentant le potentiel par un terme global  $V(r)$  qu'on appelle potentiel du cristal, formé des potentiels atomique relatifs à chaque atome et possède la périodicité du réseau  $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$  pour tous les vecteurs  $\vec{R}$  du réseau, il l'on résulte que l'équation de Schrodinger aura pour forme [7] :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V(r) \right] \psi(r) = E(k) \psi(r) \quad (\text{I-7})$$

$\psi(r)$  : représente la fonction d'onde propre du système.

$E(k)$  : Energie propre du système.

$k$  : Vecteur d'onde.

En fait, la détermination du potentiel du cristal  $V(\vec{r})$  reste un problème majeur pour le calcul de la structure de bandes électronique. Pour palier à cet inconvénient, on fait appel à la théorie des électrons presque libres et celle des électrons fortement liés [7].

## I. 6. Les théories de calcul élémentaires :

### I. 6. 1. La théorie de l'électron presque libre :

Cette méthode considère que l'énergie d'interaction de l'électron avec le champ potentiels du réseau et beaucoup plus faible que son énergie cinétique et que l'influence du potentiel du réseau est analogue à une perturbation périodique [9].

Mettons l'Hamiltonien du champ périodique:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(r) \quad (\text{I-8})$$

Sous la forme de l'Hamiltonien d'un système « non perturbé »  $\hat{H}_0 = \hat{T}$ , et d'une « perturbation »  $\hat{W}(\vec{r}) = \hat{U}(\vec{r})$ .

La théorie de perturbation permet la détermination des corrections portées sur l'énergie  $E^0$  et la fonction  $\psi^0(r)$  d'un système non perturbé quand on lui impose une perturbation [9].

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r}) = \hat{T} + \hat{U}(\vec{r}), \hat{U}(\vec{r}) \equiv U(\vec{r}) \quad (\text{I-9})$$

L'équation de Schrödinger d'une particule libre. Donc d'une particule pour laquelle

$\hat{H}_0 = \hat{T}$  s'écrit :

$$H_0 \psi^0(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^0(r) = E^0(k) \psi^0(r) \quad (I-10)$$

En approximation d'ordre zéro. Les électrons presque libres n'ont une énergie :

$$E^0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{P^2}{2m} \quad (I-11)$$

Et admet une solution sous la forme des ondes de Broglie :

$$\psi_k^0(\vec{r}) = A e^{i(\vec{k}\vec{r})} \quad (I-12)$$

Les fonctions d'onde  $\psi^0(r)$  sont orthonormées pour  $E(k)$  et  $\psi(r)$  de la première approximation le calcul nécessite la connaissance des éléments de matrice de perturbation [9].

Nous savons que le potentiel du cristal est périodique : on peut en faire une analyse de fourier.

$$V(r) = \sum_G V_G e^{iG \frac{2\pi}{a} r} \quad (I-13)$$

Ou l'on a rappelé que les vecteurs  $G$  appartiennent au réseau réciproque [9].

- En première approximation, la correction est donnée par les éléments de matrice de la perturbation :

$$E^1 = \psi_{k'}^0(r) | V(r) | \psi_k^0(r) \int \psi_{k'}^0(r) V(r) \psi_k^0(r) d\tau = W_{kk'} \quad (I-14)$$

$$E^1 = \begin{cases} 0 & \text{pour } k \neq \frac{n\pi}{a} \\ \pm V_G & \text{pour } k = \frac{n\pi}{a} \end{cases} \quad (I-15)$$

Ainsi

$$E^1 = E^0(k) + E^1 = E^0(k) + \begin{cases} 0 & \text{pour } k \neq \frac{n\pi}{a} \\ \pm V_G & \text{pour } k = \frac{n\pi}{a} \end{cases} \quad (I-16)$$

- En seconde approximation, la théorie de perturbation donne :

$$E^2 = \sum_{k'} \frac{|W_{kk'}|^2}{E^0(k) - E^0(k')} = \sum_{k'} \frac{|\psi_{k'}^0(r) | V(r) | \psi_k^0(r)|^2}{E^0(k) - E^0(k')} \quad (I-17)$$

Ainsi l'énergie totale du système s'écrit :

$$E(k) = E^0(k) + W_{kk'} + \sum_{k'} \frac{|W_{kk'}|^2}{E^0(k) - E^0(k')} \quad (I-18)$$

### I. 6. 2. La théorie des liaisons fortes :

La méthode des liaisons fortes est une méthode très efficace pour les problèmes où les fonctions d'ondes sont localisées. Elle est largement utilisée pour le calcul des états d'impuretés [10].

Cette méthode s'est imposée comme un outil puissant pour le calcul des états électroniques des solides, elle suppose que l'interaction de l'électron avec le noyau est bien supérieure à son énergie cinétique et que l'état de l'électron ne diffère que peu de son état dans un atome isolé [11].

L'Hamiltonien total du cristal prend la forme suivante :

$$H\psi_a(r) = E_a \psi_a(r) \quad (\text{I-19})$$

$E_a$  : L'énergie de l'atome isolé.

$\psi_a(r)$  : Fonction d'onde correspondant à cette énergie .

La fonction d'onde du cristal est écrite sous la forme d'une somme de Bloch d'orbitale atomique :

$$\psi(r) = \sum_n C_n \psi_a(r-n) \quad (\text{I-20})$$

$\psi_a(r-n)$  : Est la fonction d'onde de l'électron appartenant au  $n^{\text{ième}}$  atome.

$C_n$  : Coefficient choisis de telle sorte que  $\psi(r)$  vérifie la condition de périodicité de Bloch.

$$C_n = e^{ikn} \quad (\text{I-21})$$

En résumé, la méthode des liaisons fortes est bien adaptée au calcul des bandes profondes étroites, un peu moins adaptée au calcul de la bande de valence et peu adaptée au calcul de la bande de conduction [12].

### I. 7. Les méthodes de calcul des structures des bandes :

#### I. 7. 1. La méthode cellulaire :

C'est la première tentative de calcul de la structure de bande introduite par Wigner et Seitz [9], cette méthode consiste à diviser la maille élémentaire en cellules secondaires, chaque cellule compose d'un seul atome .

La méthode cellulaire déduite que la relation de Bloch est une bonne solution de l'équation de Schrödinger à l'intérieur d'une cellule primitive, en respectant les conditions de Bloch suivantes :

$$\psi(r+R) = e^{ikR} \psi(r) \quad (\text{I-22})$$

$$\psi(r) = e^{-ikR} \psi(r+R) \quad (\text{I-23})$$

$$n(r) \Delta\psi(r) = -e^{-ikR} n(r+R) \Delta\psi(r+R) \quad (\text{I-24})$$

Avec  $r$  et  $r+R$  appartiennent à la surface de la même cellule.



La première approximation dans cette méthode est de remplacer le potentiel  $V(r)$  de la cellule unitaire par un potentiel sphérique  $U(r)$  et de le choisir comme potentiel d'un seul ion à l'origine, en ignorant la contribution des ions voisins.

La solution complète de l'équation de Schrödinger est de la forme suivante :

$$\psi_{lm}(r) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (\text{I-25})$$

Où :  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  Sont les harmoniques sphériques et  $\chi_l(r)$  les fonctions radiales qui satisfaisant l'équation de Schrödinger :

$$\ddot{\chi}_l(r) + \frac{2}{r} \dot{\chi}_l(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right] \chi_l(r) = 0 \quad (\text{I-26})$$

Donc, n'importe quelle combinaison linéaire de  $\psi_{lm}(r)$  et aussi solution de l'équation de Schrödinger.

$$\psi(r) = \sum_{lm} A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_l(r) \quad (\text{I-27})$$

Les conditions aux limites donnent un système d'équation en  $A_{lm}$  qui sert à calculer l'énergie  $E$  en annulant le déterminant du système. de cette façon, on détermine le spectre  $E(k)$  pour  $k$  fixe [12, 13].

### I.7. 2. La méthode des ondes planes:

Dans cette approche, le potentiel du cristal  $V(r)$  est considéré comme un potentiel périodique qu'on peut écrire la forme de série de Fourier [6, 7].

$$V(r) = \sum_G V(G) e^{iGr} \quad (\text{I-28})$$

La fonction d'onde est aussi périodique et pour forme :

$$\psi(r) = \sum_k C(k) e^{ikr} \quad (\text{I-29})$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r) \psi(r) = E(k) \psi(r) \quad (\text{I-30})$$

En reportant les développements des équations (I-28) et (I-29) dans (I-30), avec une multiplication par terme  $e^{-ik'r}$  et en intégrant par la suite sur  $dr^3$ , on déduit finalement le système d'équation pour les coefficients  $C(k')$  [7]:

$$\frac{\hbar^2}{2m} C(k') k'^2 + \sum_G C(k' - G) V(G) = E(k) C(k) \quad (\text{I-31})$$

Une fois les coefficients  $V(G)$  et  $V(r)$  sont connus, les énergies  $E(k)$  seront calculées à partir du système d'équation en  $C(k')$  [7].

### I.7. 3. La méthode des ondes planes Augmentées(APW):

Dans cette méthode proposée par J. C. Slater, la fonction d'onde  $\psi_k(r)$  est considérée comme une superposition d'ondes planes dans les régions interatomique et de fonctions d'ondes atomique dans la région du cœur ionique [7, 14].

Cette méthode qui a été inspirée de la méthode cellulaire, consiste à supposer que, le solide est formé d'un ensemble d'atomes, chaque atome contient un cœur sphérique de rayon  $r_0$ , régit par un potentiel sphérique et une région interstitielle dont le potentiel est constant, la forme de ce potentiel est donnée comme suite [8]:

$$V(r) = \begin{cases} V(|r-R|) & \text{si } |r-R| < r_0 \\ 0 & \text{si } |r-R| > r_0 \end{cases} \quad (\text{I-32})$$

Ce type de potentiel est appelé le potentiel de muffin-tin (nid d'abeilles); cette forme de potentiel la fonction d'onde s'écrit d'une façon équivalente :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_k(r) = E \psi_k(r) \quad (\text{I-33})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_k(r) + V(|r-R|) = E \psi_k(r) \quad (\text{I-34})$$

Ces fonctions d'ondes sont appelées ondes planes augmentées, elle continue en  $r=r_0$  et ne présentent de ce fait, aucun problème de conditions aux limites [5]. Pour un électron cette fonction d'onde est représentée par cette équation :

$$\psi_k(r) = \Theta(r-r_0) A e^{ikr} \sum_n \Theta(r-r_0) \psi_n^0(r) A_n \quad (\text{I-35})$$

En admettant que :

$$\Theta(r-r_0) = \begin{cases} 1 & \text{pour } r > r_0 \\ 0 & \text{pour } r < r_0 \end{cases} \quad (\text{I-36})$$

Techniquement, cette méthode nécessite un temps de traitement considérable, donc des machines plus performantes [1].

### I.7. 4. La méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW):

Cette méthode a été proposée par Herring en supposant que, dans un solide la fonction d'onde d'un électron de conduction était presque plane dans la région interatomique mais vu les oscillation rapides de la région du cœur, il est donc souhaitable qu'au voisinage du noyau d'utiliser des fonctions d'ondes atomique  $\psi_r^a(r)$  d'où le nom d'ondes planes orthogonalisées satisfaisant aux condition de Bloch et sont définies ainsi par [7] :

$$\Psi_k(r) = e^{ikr} + \sum_c b_c \Phi_k^c(r) \quad (\text{I-37})$$

C : définit le cœur

$\Phi_k^c(r)$  : est une fonction atomique.

$b_c$  : une constante calculée par l'orthogonalité de  $\Psi_k$  avec chaque niveau du cœur.

$$\int dr \Phi_k^c(r) \Psi_k(r) = 0 \quad (\text{I-38})$$

Il l'en résulte qu'on peut écrire :

$$b_c = - \int dr \Phi_k^c(r) e^{ikr} \quad (\text{I-39})$$

En s'étend nécessairement à ce que l'on ait toujours pour la résolution de l'équation de Schrödinger, une solution qui est une combinaison linéaire d'ondes planes orthogonalisées de forme [7] :

$$\Psi(r) = \sum_k C_k \Psi_k(r) \quad (\text{I-40})$$

Les coefficients  $C_k$  sont calculés à partir des conditions de Bloch alors que les énergies  $E_k$  sont obtenues en utilisant la méthode variationnelle [15].

En résumé, la technique a été adoptée avec succès dans l'étude des semiconducteurs du type (IV-IV) et (III-V), par ailleurs, l'inconvénient de cette méthode réside dans le fait qu'il est vraiment nécessaire, pour résoudre un tel système, de séparer les états du cœur des états de valence et de conduction [7].

### I.7.5. La méthode multi-bandes (K. P):

Bien que connues depuis longtemps, toutes les méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques n'ont cessé de progresser ces dernières années, il n'y a pas de supériorité d'une méthode par rapport à une autre, tout dépend du but recherché [2].

La description la plus économique des bandes d'énergie dans les semiconducteurs est l'approximation de masse effective, ce qui est également connu comme étant l'approche k.p elle utilise un ensemble minimal de paramètres qui sont déterminés empiriquement à partir de l'expérience. Par l'emploi de la théorie de perturbation, elle fournit une continuité des bandes d'énergie, en un vecteur d'onde  $k$  au voisinage de certains points de haute symétrie, Seitz fut le premier à appliquer cette méthode [16].

Les fonctions d'onde électronique obtenues, solutions de l'équation de Schrödinger dans un potentiel du cristal périodique sont des fonctions de Bloch de la forme :

$$\Phi_{km}(r) = e^{ikr} \Psi_{nk}(r) \quad (\text{I-41})$$

Avec  $n$  désignant l'indice de la bande et  $k$  le vecteur d'onde [7, 17].

**I.7.6. Méthode de Kohn-Korinng-Rostoker (K.K.R) :**

Considérons un système dont l'hamiltonien  $H$  est indépendant du temps. Nous supposons pour simplifier que les spectres de  $H$  soit discret et non dégénéré [18]. La valeur moyenne de l'opérateur  $H$  prise pour un état  $|\psi\rangle$  est égale à:

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (\text{I-42})$$

Et comme  $E_0$  correspond à l'effet fondamental, l'équation devient :

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_n |C_n|^2 E_n}{\sum_n |C_n|^2} \geq E_0 \quad (\text{I-43})$$

Avec :

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n \quad (\text{I-44})$$

Et

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle \quad (\text{I-45})$$

Donc, quelle que soit la fonction  $|\psi\rangle$ , que nous appellerons fonction d'essai, nous avons toujours une limite inférieure qui est égale dans le meilleur des cas à la valeur de l'énergie du système dans son état fondamental [1].

Le principe de la méthode est donc choisir une fonction d'essai dépendante d'un ou plusieurs paramètres que l'on ajuste de façon à ce que l'énergie obtenue soit minimale [1].

Le choix d'un état  $|\psi\rangle$  peut être pris comme combinaison linéaire de plusieurs autres états.

$$|\psi\rangle = \sum_n \lambda_n |X_n\rangle \quad (\text{I-46})$$

En minimisant l'équation (I-42), nous obtiendrons un système de  $n$  équations à  $n$  inconnues qui sont les  $\lambda_n$ . Ce système n'admet des racines non nulles que si le déterminant est nul. La plus petite des racines (elles sont toutes réelles) correspond à l'énergie la plus proche de l'état fondamental pour ce système.

Les fonctions d'ondes  $X_n(r)$  sont prises quelques fois comme des orbitales atomiques qui tiennent compte des symétries du problème [1].

**I. 7. 7. La méthode des pseudopotentiels (P.M) :**

La méthode du pseudopotentiel est utilisée pour calculer les énergies  $E_n(k)$  et d'autres propriétés des semiconducteurs, la vertu majeure de cette approche est seulement les électrons de valence qui sont considérés [7].

Autrement dit, les électrons du cœur sont supposés gelés dans la configuration atomique et les électrons de valence se meuvent dans un potentiel périodique d'un seul électron .

L'explication se repose également, sur une hypothèse importante qui utilise les propriétés d'orthogonalités des états de valence et de conduction avec les états du cœur ,il faut dire que, dans ce contexte cette approche est similaire à la méthode des ondes planes orthogonalisées.

Toutefois, l'effet de l'orthogonalité est incluse dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel. Néanmoins, l'effet d'orthogonalisation aux états du cœur . Le pseudopotentiel  $V_p$  est alors lentement variable, se qui autorise à envisager un traitement du problème en terme de perturbation [5, 7].

Nous allons voir cette méthode avec une forme plus détaillée dans le deuxième chapitre.

**Références :**

- [1] A. Bechiri, thèse de doctorat, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [2] F. Gautier, J. Phys. Colloques 1967, **28**, 3.
- [3] F. Herman, Quantum theory of atoms, molécules and the solide state, Academic Press, 1966.
- [4] C. Hajlaoui, thèse de doctorat, INSA de Rennes, (France), 2014.
- [5] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 4<sup>ème</sup> ed. Masson, 1998.
- [6] P. Kiréev, La Physique des semiconducteurs, ed. Mir, Moscou 1975.
- [7] F. Mezrag, thèse de doctorat, Université de Biskra, (Algérie), 2012.
- [8] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid state physics, ed. Holt, Rinehart and Winston Philadelphia, 1976.
- [9] C. Kittel, Physique de l'état solide, Ed. Dunod 7, Paris, 1998.
- [10] M. M. Diarra, thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille, (France), 2009.
- [11] G. Böhan, K. Unger, Physic State Solid. (b) 1999, **216**, 961.
- [12] N. Y. Aouina, mémoire de magister, Université de M'sila, (Algérie), 2003.
- [13] S. Yousfi, mémoire de magister, Université de M'Sila, (Algérie), 2004.
- [14] J. C. Slater Phys. Rev. 1937, **51**, 846.
- [15] E. Elbaz, Mécanique quantique, ed. Hermann, 1985.
- [16] F. Seitz, The modern theory of solids, New-York 1964.
- [17] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, J. appl phys. 2001, **89**, 5815.
- [18] G. Olivier, Mécanique quantique approfondie, ed. O. P. U., (Algérie), 1983.

## *Chapitre 2*

### *La méthode du pseudopotentiel*

### II.1. Introduction :

Dans les dernières années, les chercheurs ont trouvé une nouvelle technique de calcul plus rapides, plus précises qui permettant d'obtenir avec une grande rapidité à calculer les propriétés de nombreux solides, cette technique de calcul est appelé la méthode du pseudopotentiel [1].

L'idée de base de la méthode du pseudopotentiel 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, c'est-à-dire le concept de base du pseudopotentiel est l'approximation du cœur gelé [2] qui suppose que les états électroniques des électrons du cœur sont insensibles à la configuration électronique voisine.

Dans ce chapitre on s'intéresse à l'utilisation la méthode du pseudopotentiel par semiconducteur.

### II .2. La méthode du pseudopotentiel :

La méthode du pseudopotentiel fut introduite par Fermi en 1934 pour étudier les états atomiques des couches mince [3, 4]. Dans l'année suivante, Hellman, proposa que cette méthode puisse être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des métaux alcalins.

Cependant, c'est à par de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Philips et Kleinman en 1959 qui s'est basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées [5].

L'intérêt de cette méthode est que seuls les électrons de valence sont pris en compte. Les électrons du cœur sont supposés « gelés » et seuls les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électronique.

Les coefficients utilisés dans cette méthode O.P.W pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur, peuvent être utilisés pour construire un potentiel orthogonal. Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valence loin du cœur [6].

Et on obtient par effet d'annulation un potentiel faible ou « pseudopotentiel ». Cette méthode fut appliquée notamment pour le calcul des structures électroniques des solides et liquides, les interactions électron phonon, la supraconductivité, les vibrations des réseaux, les liaisons et structures des cristaux...etc. [5].

### II .3. Formalisme mathématique :

Dans un atome ou dans un solide le potentiel agissant sur un électron de valence est très attractif à l'intérieur du cœur.

Dans cette région la fonction d'onde oscille rapidement (figure (II-1)), 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 [7, 8].



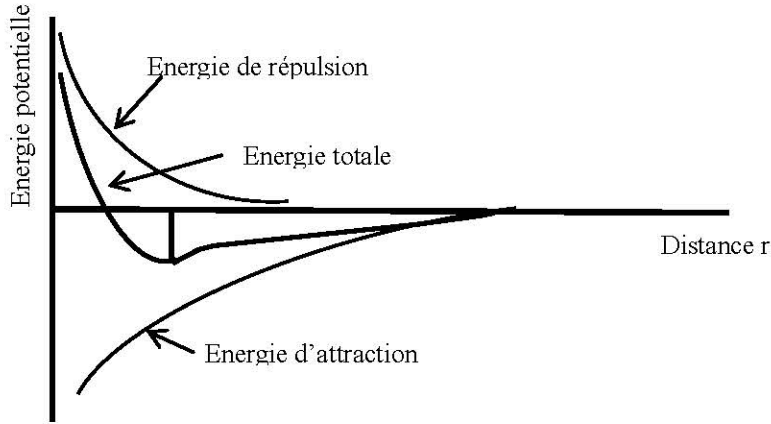


Figure (II-1): Le potentiel d'interactions entre deux atomes en fonction de la distance  $r$  [8].

Comme dans la méthode O.P.W la fonction  $\psi$  est donnée par la somme d'onde planes  $\Phi_k^v$  et des états atomiques occupés du cœur  $\Phi_k^c$ .

$$\psi_k(r) = \Phi_k^v(r) + \sum b_c \Phi_k^c(r) \tag{II-1}$$

La fonction d'onde  $\psi_k$  doit être orthogonale aux états du cœur  $\Phi_k^c$  [9].

$$\langle \Phi_k^c | \psi_k \rangle = 0 \tag{II-2}$$

Vérifier l'équation de Schrodinger :

$$H\psi_k = E_k\psi_k \tag{II-3}$$

En utilisant l'expression (II-1) et (II-3), nous pouvons démontrer que :

$$H\Phi_k^v(r) - H \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k\psi_k \tag{II-4}$$

On sait que :

$$H\Phi_k^c = E_k^c\Phi_k^c \tag{II-5}$$

Donc :

$$H\Phi_k^v + E_k^c H \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \left[ \Phi_k^v + E_k^c \sum_c \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c \right] \tag{II-6}$$

$$H\Phi_k^v + \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c = E_k \Phi_k^v \tag{II-7}$$

Avec :

$$V(r)\Phi_k^v = \sum_c (E_k - E_k^c) \langle \Phi_k^c | \Phi_k^v \rangle \Phi_k^c \tag{II-8}$$

On peut écrire l'équation (II-7) d'une façon condensé.

$$(H + V_R)\Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (\text{II-9})$$

Où :

$$\left( \frac{P^2}{2m} + V_C + V_R \right) \Phi_k^v = E_k \Phi_k^v \quad (\text{II-10})$$

On pose :  $V_P = V_C + V_R$ ,  $V_P$  : représente le pseudopotentiel car c'est la somme d'un potentiel attractif  $V_C$  et  $V_R$  un potentiel répulsif et devient faiblement attractif dans la région du cœur faiblement répulsif dans la région des électrons de valence. [10]

Dans l'équation de Schrodinger on peut considérer le pseudopotentiel comme perturbation [5].

#### II. 4. Caractéristiques du pseudopotentiel :

Le pseudopotentiel est considéré comme une perturbation, les éléments de matrice du pseudopotentiel  $V_R$  sont donnés par [11, 12] :

$$\psi V_R \psi = \sum_c (E_v - E_c) \int dr |\psi^* \psi|^2 \quad (\text{II-11})$$

Etant donné que  $E$  est légèrement supérieure à  $E_C$ , donc  $V_R$  est toujours positif ainsi  $V_P = V_C + V_R$  est très faible d'où l'utilisation de la théorie des électrons presque libres pour le calcul des niveaux de valences.

Si on néglige l'effet du cœur le pseudopotentiel devient local et dépend explicitement de la position  $r$ , il peut être comme suit [12, 13]:

$$V_R = V(r, r_0) = \sum_c (E_v - E_c) \langle F(r) | F_c(r) | F(r) \rangle \quad (\text{II-12})$$

Si on tient compte de l'effet du cœur, le potentiel devient non local [14].

#### II. 5. Les modèles des pseudopotentiels :

Le nom de cette méthode vient du fait que le potentiel exercé par les noyaux et les électrons de cœurs est remplacé par un potentiel effectif qui s'applique uniquement aux électrons de valence [15].

Le pseudopotentiel a une large application comme outil pour les structures de bandes électroniques des matériaux dans ce cas le modèle et le potentiel empirique (EPM) sont utilisés pour ajuster quelque propriété des semiconducteurs et de leurs alliages [16].

##### II. 5. 1. Le modèle local :

Dans cette méthode, pour déterminer les fonction propres et les valeurs de l'équation de Schrodinger, on s'attend nécessairement que l'on ait toujours une forme du potentiel.

En fait, un potentiel local dépendant de la variable  $r$ , reste le modèle le plus simple pour ce fait, plusieurs formes du potentiel ont été proposées [14, 17].

**II. 5. 1. a. Le premier modèle:** consiste en un potentiel de coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région du cœur. La forme de ce potentiel est [9] :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ -\frac{Z_e}{r_c} & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-13})$$

Où

$Z$ : la valence atomique.

$r_c$  : Le potentiel utilisé pour ajuster les données atomique.

**II. 5. 1. b. Le modèle d'Ashcroft :**

Dans se modèle, le potentiel est toujours similaire et souvent utilisé, appelé aussi « the empty core potential » c'est le potentiel des cœur inoccupés présenté comme suit [18] :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ 0 & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-14})$$

**II. 5. 1. c. Le modèle de Heine-Abarenkov :**

On rencontre ici un modèle qui ajoute une flexibilité [17, 16] pour cet ajustement en utilisant un potentiel  $A$  supposé constant dans la région du cœur , dans ce cas le potentiel est [17] :

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z_e}{r} & \text{pour } r > r_c \\ A & \text{pour } r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-15})$$

**II. 5. 2. Le modèle non local :**

Le pseudopotentiel est à l'origine non local, il dépend de  $r$  et de l'énergie  $E$ . La dépendance en énergie peut être ainsi introduite, en remplacement la constante  $A$  par des constantes différentes  $A_l(E)$  dans la région du cœur et cela pour chaque valeur  $l$  du nombre quantique[17].

On peut donc écrire le pseudopotentiel non local sous la forme suivante[17,19] :

$$V_P = V_{NL}(r, E) = \sum_l A_l(r, E) f_l(r) P_l \quad (\text{II-16})$$

Où  $A_l(E)$  : est la constane de la dépendance du potentiel en énergiedes états du cœur.

$P_l$  est l'opérateur de projection de la  $l^{\text{ième}}$  composante des moments angulaires.

$f_l(r)$  est la fonction qui représente l'effet de l'état du cœur elle a plusieurs formes, les plus utilisées sont celles Heine et Abarenkov et la forme Gaussienne [17].

**II. 5. 2. a. La fonction de Heine-Abarenkov :**

Cette fonction a une forme carrée (figure (II-2)), son expression est la suivante [20] :

$$f_l(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r \geq r_c \\ 1 & \text{si } r < r_c \end{cases} \quad (\text{II-17})$$

Avec  $r_c$  le rayon du cœur ionique.

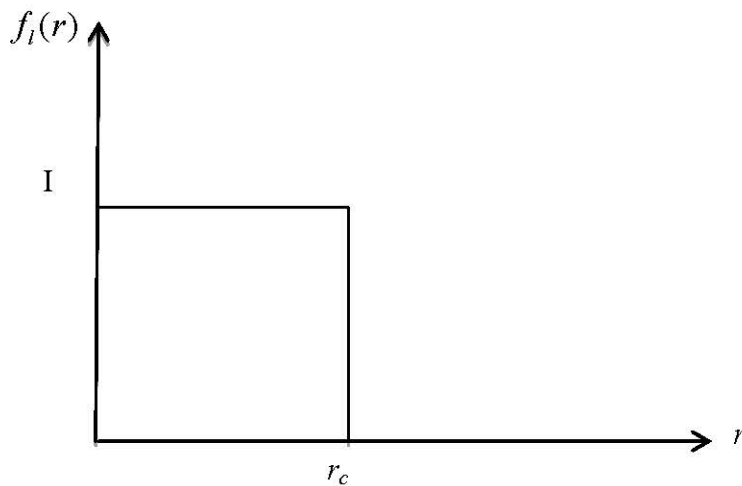


Figure (II-2): Fonction de Heine –Abarenkov

### II. 5. 2. b. La fonction de Gauss :

La forme Gaussienne est représentée dans la figure (II-3) est donnée par l'expression suivante [17, 21]:

$$f_i(r) = e^{\left(\frac{-r^2}{R_c^2}\right)} \quad (\text{II-18})$$

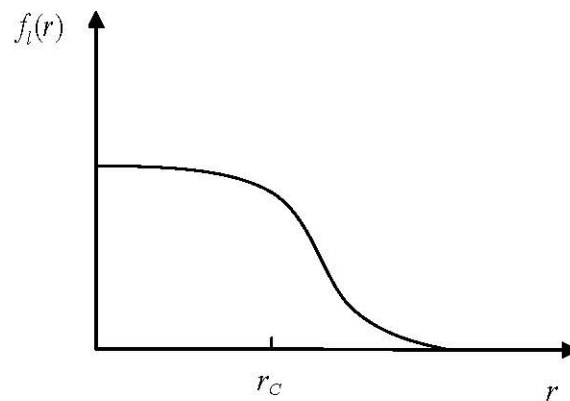


Figure (II-3) : Fonction de Gauss

### II. 5. 2. c. La fonction d'Ashcroft :

Dans ce cas, on emploie pour la fonction  $f_i(r)$  la forme carrée, à cause de sa simplicité, sa précision et sa large application [17, 19, 22], l'effet du cœur est pris en considération dans une fenêtre unitaire pour  $r < r_c$  et plus en s'éloigne plus l'effet est atténué jusqu'à l'annulation comme c'est indiqué sur la figure (II-4) [17].

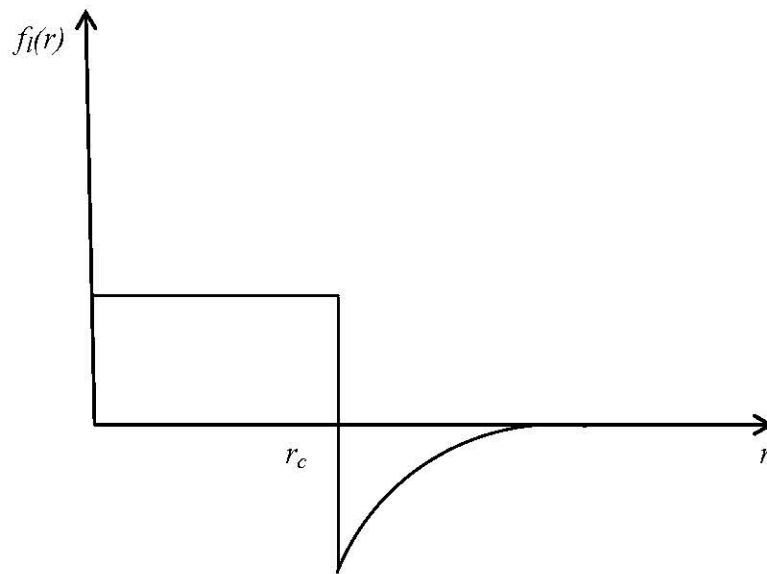


Figure (II-4): Fonction d'Ashcroft

## II. 6. Méthode empirique du pseudo potentiel (E.P.M) :

C'est une autre variante de la méthode du pseudopotentiel, elle est utilisée pour déterminer les facteurs de forme et les données expérimentales, et largement utilisée pour les semiconducteurs où elle a donné de très bons résultats pour le Ge et le Si [23], et aussi pour les semiconducteurs de structure diamant et zinc-blende. Les facteurs de structures peuvent être déterminés de l'analyse des expériences de diffraction des rayons X ou par les neutrons [24]. La méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux  $V(G)$  du pseudopotentiel  $V_p(r)$  qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques donnée par l'expression suivante [19,23, 24] :

$$V_p(r) = \sum_{R,\tau} V_a(r - R - \tau) \quad (\text{II-19})$$

$R$ : est un vecteur du réseau direct.

$\tau$  : est un vecteur de la translation réseau direct.

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

$$V_p(r) = \sum_r S(G) V_a(G) \exp(iGr) \quad (\text{II-20})$$

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

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-iGr) \quad (\text{II-21})$$

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

$N_a$ : Le nombre d'atome de base.

La fonction d'onde  $\psi_{n,k}(k)$  et les valeurs des bandes d'énergie  $E_n(k)$  sont les solutions de l'équation:

$$\left[ \frac{P^2}{2m} V_P(r) \right] \psi_{n,k}(r) = E_n(k) \psi_{n,k}(k) \quad (\text{II-22})$$

$n$  : L'indice de la bande.

Les fonction  $\psi_{n,k}(k)$  ont la forme de Bloch et peuvent être développées en une série d'ondes planes [25].

Les facteurs de forme des structures étudiées sont donnés comme suit [26] :

$$V(G) = V^S(G) \cos(Gr) + iV^A(G) \sin(Gr) \quad (\text{II-23})$$

Avec :

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) + V_B(G)] \quad (\text{II-24})$$

$$V^A(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) - V_B(G)] \quad (\text{II-25})$$

$$\tau = \pm \frac{1}{8} (1,1,1)a \quad (\text{II-26})$$

Où :  $a$  est le paramètre du réseau

### II-7- La méthode de calcul du (E.P.M) :

Le procédé de calcul de la méthode du pseudopotentiel empirique est comme suit :

- ❖ Choisir les facteurs de forme  $V(G)$ .
- ❖ Remplacer  $V(G)$  dans la relation du pseudopotentiel qui inclut le facteur de structure.
- ❖ Résoudre l'équation de Schrödinger pour les pseudofonctions d'onde et les valeurs propre d'énergie.
- ❖ Comparer la valeur propre d'énergie avec l'expérience.
- ❖ Si les valeurs propres d'énergie sont en bon accord avec l'expérience, arrêter les calculs.
- ❖ Sinon altérer les calculs et choisir d'autres valeurs de  $V(G)$ .

La procédure de calcul de la méthode (E.P.M) est illustrée dans le diagramme suivant (figure (II-5)) [9, 27] :

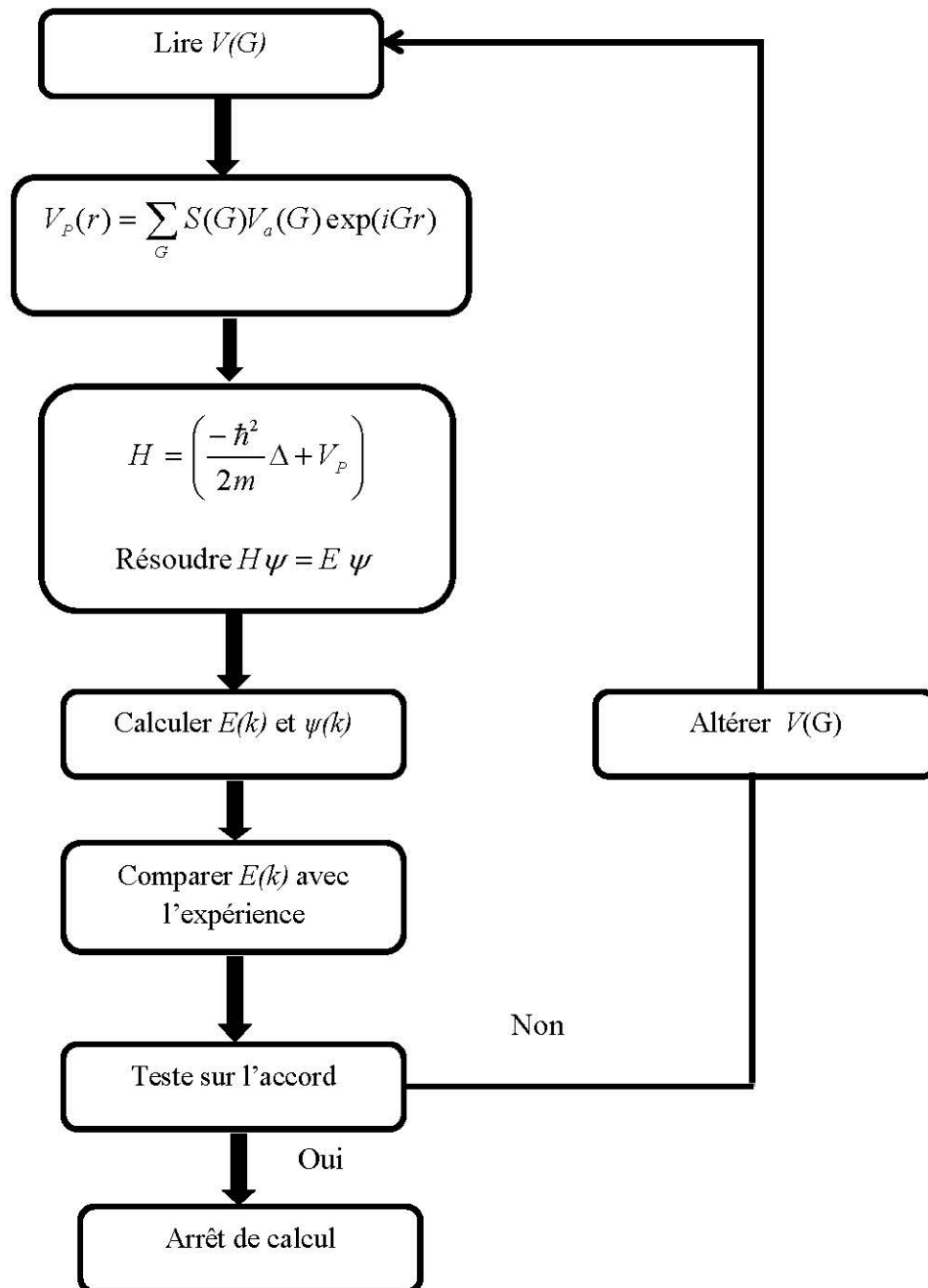


Figure (II-5) : L'organigramme d'E.P.M

La méthode pseudopotentiel empirique locale est utilisée pour étudier les propriétés électroniques des alliages semiconducteurs, combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) introduisant l'effet du désordre comme un potentiel effectif.

### II.8. Approximation du cristal virtuel (VCA) :

Dans l'approximation du cristal virtuel (Virtual-Crystal Approximation VCA), on considère que les distorsions sont suffisamment faibles (théorie de perturbation du premier ordre). Pour préserver la structure de bande du cristal parfait, ce qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Ce modèle prévoit une variation linéaire des

principaux paramètres dans l'alliage. En particulier, le potentiel cristallin l'alliage ternaire  $A_xB_{1-x}C$  est défini par interpolation linéaire entre ceux des composants constituant le cristal [28].

$$V(x) = xV_{AC} + (1-x)V_{BC} \quad (\text{II-27})$$

L'hamiltonien considéré dans la VCA est donné par :

$$H(x) = \frac{P^2}{2m} + V(x) \quad (\text{II-28})$$

Pour établir le calcul de la structure de bandes, il est nécessaire de construire le potentiel de l'alliage en fonction de la composition, en tenant compte de l'effet du désordre [28].

### II.9. Approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA) :

Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel du au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système devient [17] :

$$0V(r) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (\text{II-29})$$

$$V(r) = V_{VCA} - p(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{II-30})$$

$V_{VCA}$  : le potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}$  : le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel.

$p$  : le paramètre ajustable.

L'équation (II-29) peut être écrite sous une forme plus étendue :

$$V(r) = xV_{AC}(r) + (1-x)V_{BC}(r) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} (V_{AC} - V_{BC}) \quad (\text{II-31})$$

Sous une forme plus condensée, en termes de séries de Fourier,  $V(r)$  devient [17] :

$$V(r) = \sum_G S(G)V(G) \exp(iGr) \quad (\text{II-32})$$

Avec  $V(G)$  est le facteur de forme donné par [17] :

$$V(G) = xV_{AC}(G) + (1-x)V_{BC}(G) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{AC}(G) - V_{BC}(G)] \quad (\text{II-33})$$

$V_{AC}(G)$  et  $V_{BC}(G)$  sont les facteurs de formes des composés AC et BC respectivement de l'alliage ternaire  $A_xB_{1-x}C$ .

Ces facteurs de formes ont été utilisés pour le calcul des gaps d'énergie de l'alliage ternaire semiconducteur  $Zn_xHg_{1-x}Te$  en faisant varier la valeur du paramètre  $p$  jusqu'à avoir un bon accord avec les valeurs expérimentales. Les facteurs de forme de cet alliage sont calculés selon l'expression (II-34) d'où :

$$V_{Zn_xHg_{1-x}Te} = xV_{ZnTe}(G) + (1-x)V_{HgTe}(G) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} [V_{ZnTe}(G) - V_{HgTe}(G)] \quad (\text{III-34})$$



## Références :

- [1] B. Bertrand, mémoire de master de physique, université Claude Bernard Lyon 1, (France), 2010.
- [2] U. Von Barth, C.D. Gelatt. Phys. Rev. B, 1980, **21**, 2222.
- [3] Y. Al- Douri, H. Abid, A. Zaoui, H. Aourag, Physica B, 2001, **301**, 295.
- [4] W. M. Haynes, D. R. Lide and T. J. Bruno, CRC Handbook of chemistry and physics, 87th ed CRC Press, Taylor & Francis Group, LLC, New-York, 2017.
- [5] H. Zenasni, mémoire de magister, Université de Tlemcen, (Algérie), 2008.
- [6] C. Frayret, thèse de doctorat, Université de Bordeaux, (France), 2004.
- [7] M. L. Cohen and V. Heine, Solid State Physics 24, Eds, H. Enrenreich, F. Seitz and D. Turnbull, Academic press, New-York, 1970.
- [8] A. Bechiri, thèse de doctorat d'état, Université Constantine, (Algérie), 2006.
- [9] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical, Properties of Semiconductors, Springer Series Solid-State Sciences, Berlin, 1988.
- [10] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys, 2001, **72**, 387.
- [11] J. Wang, J. Li, S. Yip, S. Phillpot, D. Wolf, Phys. Rev B, 1995, **52**, 12627.
- [12] H. Mekahlia, mémoire de master, Université de Tébessa, (Algérie), 2016.
- [13] A. Kan Garlu, Phys. Rev. B, 1988, **38**, 9790.
- [14] G. Böhan, K. Unger, Physics State Solide (b), 1999, **216**, 961
- [15] J. Dura, thèse de doctorat, Université Aix-Marseille, (France), 2012.
- [16] V. Heine, I. Abarankov, Phil. Mag. 1964, **9**, 451.
- [17] F. Mezrag, thèse de doctorat, Université de Biskra, (Algérie), 2012.
- [18] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics, ed. Holt, Rinehart and Winston Philadelphia, 1976.
- [19] H. Aourag, Pseudopotential Method theory and Practice, Winter College on Computational condensé de matter physics, University of Sidi-Bel-Abes, 1995.
- [20] I. V. Abarenkov and V. Heine, Phil. Mag. 1965, **12**, 529.
- [21] H. Nara and T. Kobayasi, J. Phys. Soc. Japan 1976, **41**, 1429.
- [22] N. W. Ashcroft, Phys. Lett. 1966, **23**, 48.
- [23] J. Chelikowsky, M.L. Cohen, Phys. Rev. B 1976, **14**, 552.
- [24] H. Larbi, thèse de doctorat, Université de Setif, (Algérie), 2010.
- [25] N. Hamidane, mémoire de master, Université de Tébessa (Algérie), 2015.
- [26] W. M. Kara, thèse de doctorat, Université de Biskra, (Algérie), 2012.
- [27] S. Y. Davydov and S. K. Tikhonov, Semiconductors, 1998, **32**, 947.
- [28] M. A. Monire, thèse de doctorat, Université de Mascara, (Algérie), 2016.

# *Chapitre 3*

## *Résultats et discussions*

## Résultats et discussion

### III.1 Introduction :

Les matériaux semiconducteurs II-VI suscitent un intérêt particulier à cause de leurs propriétés remarquables la plus intéressante et l'énergie de bande interdite comprise entre le visible et l'ultraviolet. Les matériaux II-VI présentent la particularité d'être des matériaux à gap directe, dans la probabilité de transition de bande à bande pour les porteurs est considérable, d'où l'intérêt dans le domaine d'application pour l'optique [1].

Le  $Zn_xHg_{1-x}Te$  est un alliage de tellure de mercure (HgTe) et de tellure de zinc (ZnTe). Il fait partie des semiconducteurs "II -V I" car les atomes mis en jeu sont sur les colonnes II (Hg et Zn) et VI (Te) du tableau périodique des éléments.

La structure cristallographique de l'alliage  $Zn_xHg_{1-x}Te$  est une structure dite zinc-blende, formée de deux réseaux cubiques à faces centrées, imbriqués, et décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale [2].

### III.2. Etude des propriétés électroniques:

Plusieurs méthodes théoriques ont été développées pour l'étude des propriétés chimiques et physiques de ces matériaux. Cependant la méthode empirique des pseudopotentiels reste la méthode la plus simple qui offre les résultats les plus compatibles à l'expérience [3].

La méthode du pseudopotentiel empirique locale, couplée à l'approximation du cristal virtuel qui introduit l'effet du désordre compositionnel, comme un potentiel effectif est utilisée pour étudier les propriétés électroniques, à savoir : le gap énergétique, la structure de bandes électronique, la densité des charges électroniques ... etc. [4].

Le pseudopotentiel est défini comme étant une superposition linéaire des pseudopotentiels atomiques de la forme [4] :

$$V_P(r) = V_L(r) + V_{NL}(r) \quad (\text{III-1})$$

$V_L(r)$ : La partie locale.

$V_{NL}(r)$ : La partie non locale.

Dans nos calculs on a omis les parties non locales et on a considéré les composants de Fourier de  $V_L(r)$  comme des paramètres du pseudopotentiel [2].

Donc :

$$V_P(r) = V_L(r) = \sum_G S(G)V(G) \exp(iGr) \quad (\text{III-2})$$

Où  $V(G)$  sont les facteurs de forme.

On détermine les paramètres du pseudopotentiel empirique par la méthode non linéaire des moindres carrés [5], dans laquelle tous les paramètres sont optimisés simultanément sous un critère bien défini de la minimisation de la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux

d'énergie calculés par la méthode des pseudopotentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement. Il est donné par [5, 6]:

$$\delta = \left[ \sum_{i,j} \frac{(\Delta E_{i,j})^2}{m - N} \right]^{1/2} \quad (III-3)$$

$\delta$  : doit être minimal.

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

$E_{\text{exp}}^{ij}$  et  $E_{\text{cal}}^{ij}$  sont, respectivement, les énergies mesurées et celles calculées entre le  $i^{\text{ème}}$  état au vecteur d'onde ( $K = K_i$ ) et le  $j^{\text{ème}}$  état au vecteur d'onde ( $K = K_j$ ) dans les  $m$  paires choisis ( $i, j$ ),  $N$  étant le nombre des paramètres du pseudopotentiel empirique.

Les valeurs de départ des facteurs de forme sont améliorées par itération jusqu'à minimiser le  $\delta$ , où  $\delta = 10^{-6}$  dans nos calculs .

Pour l'étude des propriétés physiques des alliages ternaires, nous utilisons la VCA avec et sans désordre compositionnel. Cependant, les études expérimentaux et théoriques récentes sur plusieurs alliages semiconducteurs indiquent que la VCA est rompue quand la différence entre les propriétés électroniques des atomes constitutifs dépasse une certaine valeur critique [7, 8].

Les facteurs de formes du pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques ainsi que les paramètres du réseau des composés semiconducteurs binaires ZnTe et HgTe dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau (III-1).

Tableau (III-1) : Les facteurs de forme symétriques ( $V_s$ ) et antisymétriques ( $V_A$ ) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs ZnTe et HgTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau  $a$  en (u.a) et en ( $\text{Å}^\circ$ ).

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau $a$
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
HgTe	0.0725	0.2032	0.0353	0.0518	-0.0126	-0.1944	12.2097(u.a)
							6.4610( $\text{Å}^\circ$ )
ZnTe	-0.1261	0.1422	0.016 334	0.051 43	0.0	-0.2889	11.5345 (u.a)
							6.1037( $\text{Å}^\circ$ )

### III.2.1. Etude des gaps énergétiques de l'alliage ternaire $Zn_xHg_{1-x}Te$

Le gap est la bande interdite, c'est -à-dire le gap d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence. Il y a deux types de gap d'énergie, le gap direct et le gap indirect [9].

Il est important de remarquer la dépendance en composition des gaps d'énergie de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$ , nommés gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et gaps indirects  $E_{X}^{\Gamma}$  et  $E_{L}^{\Gamma}$  [4].

Dans notre calculs les gaps énergétiques pour les composées binaires  $HgTe$  et  $ZnTe$  pour la concentration de Zinc  $x = [0-1]$  avec et sans tenir compte l'effet du désordre compositionnel sont représentés dans le tableau III-2.

Tableau (III-2): Les gaps énergétiques aux points  $\Gamma$ , X et L de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$

Composé	Gaps d'énergie (eV)					
	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$		$E_{X}^{\Gamma}$		$E_{L}^{\Gamma}$	
	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.
HgTe	-0.15 <sup>a, b</sup>	0	2.9 <sup>c</sup>	0.91732	2.4 <sup>c</sup>	3.11667
Zn <sub>0.1</sub> Hg <sub>0.9</sub> Te	-	0,25358* 0**	-	1,16696* 0,8742**	-	3,3575* 3,10395**
Zn <sub>0.3</sub> Hg <sub>0.7</sub> Te	-	0,98865* 0,39747**	-	1,6381* 1,21483**	-	3,73446* 3,43437**
Zn <sub>0.5</sub> Hg <sub>0.5</sub> Te	-	1,72326* 1,09849**	-	2,07559* 1,64106**	-	3,88537* 3,73017**
Zn <sub>0.7</sub> Hg <sub>0.3</sub> Te	-	2,33924* 1,87759**	-	2,48345* 2,11051**	-	3,69874* 3,80052**
Zn <sub>0.9</sub> Hg <sub>0.1</sub> Te	-	2,56513* 2,50461**	-	2,86695* 2,63899**	-	3,11224* 3,38014**
ZnTe	2.38 <sup>b</sup> , 2.57 <sup>a, c</sup>	2.39087	3.05 <sup>c</sup> , 3.47 <sup>c</sup>	3.05203	3.07 <sup>c</sup>	2.68198

\* : Nos calculs sans désordre.

\*\* : Nos calculs avec désordre.

(a) Réf [10].

(b) Réf [11].

(c) Réf [12].

A partir du tableau (III-2) on observe que, surtout les composées binaires les résultats obtenus des gaps d'énergie sont en bon accord avec les autres résultats disponibles qui sont illustrés dans ce tableau.

Les figures (III.1-III.5) montrent la variation des gaps d'énergies de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  en fonction de la concentration x de Zinc, en allant de HgTe (x=0) vers ZnTe (x=1) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

On remarque que les courbes des trois gaps d'énergie (le gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et les gaps indirects  $E_{X}^{\Gamma}$  et  $E_{L}^{\Gamma}$ ), sont presque similaires et non linéaires en fonction de la concentration de Zinc, les interpolations sont ajustées selon les fonctions analytiques de la forme suivante:

$$E = a + bx + cx(1-x) \quad (\text{III-5})$$

Où  $c$ : est le paramètre de courbure du gap d'énergie.

Les expressions analytiques pour  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  son comme suite:

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = -0.16975 + 4.89483 x - 2.13765 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-6})$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma} = -0.22309 + 2.45749 x + 0.46 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-7})$$

L'unité du gap d'énergie est (eV).

D'après l'équation (III-6), on note que:

➤ Sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel (VCA) ( $P=0$ ), le bowing (le paramètre de courbure) est égal à (- 2.13765 eV), qui est en désaccord avec la valeur expérimental du bowing optique qui égale à 0.46 eV [10].

D'après l'équation (III-7), on note que:

➤ Si on ajoute le terme correctif, c'est à dire en utilisant la VCA Améliorée ( $P \neq 0$ ), qui fait intervenir le potentiel effectif dû à l'effet du désordre compositionnel dans le potentiel total du cristal le bowing est égale à ( $c=0.46$  eV) pour  $P=0.287605$ , il 'ya un très bon accord avec le bowing (le paramètre de courbure) expérimental ( $c=0,46$  eV).

Nous présentons la variation du gap d'énergie fondamental en fonction de la composition  $x$  de Zinc dans la figure (III-1).

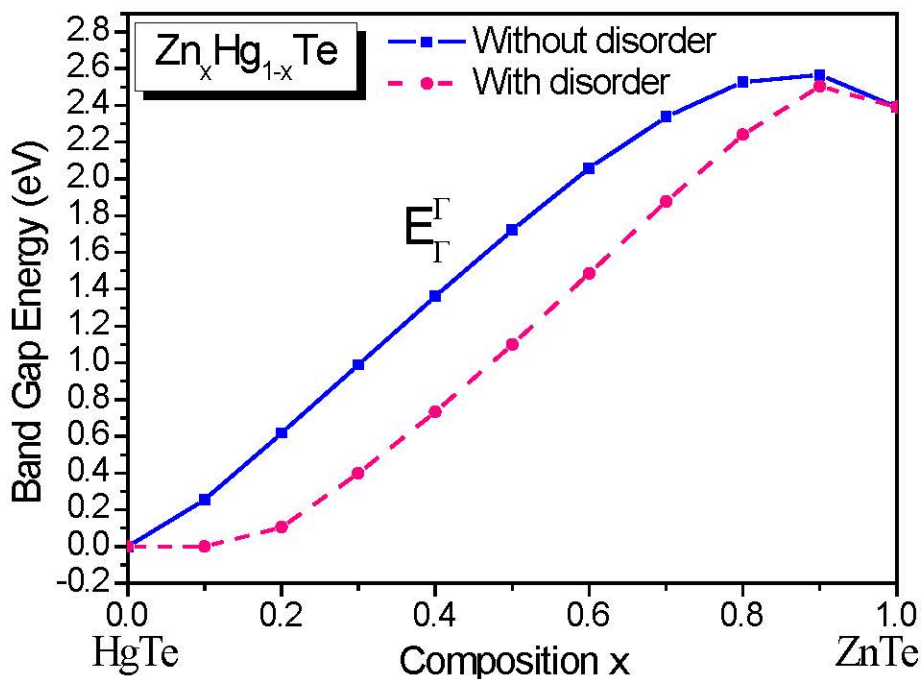


Figure (III-1): la variation du gap  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction de la concentration "x" de Zinc de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel

On remarque que le gap d'énergie fondamental augmente non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de Zinc à travers les équations (III-6), (III-7) sans et avec désordre, l'effet de désordre est très clair et on ne peut pas le négliger.

Les figures (III-2, III-3) représentent la variation des gaps d'énergies indirects  $E_T^L$  et  $E_T^X$  en fonction de la concentration  $x$  de Zinc en allant de 0 à 1, avec et sans tenir compte du désordre compositionnel.

On note que les deux figures ne sont pas similaires :

- Le gap d'énergie indirect  $E_T^L$  varie non linéairement avec la composition du zinc. On remarque que, lorsque on ne tient pas en compte l'effet du désordre ce gap  $E_T^L$  augmente jusqu'à la concentration  $x = 0.5$ , ensuite, il diminue. Et si on tient compte l'effet du désordre la concentration de diminution augmente à  $x = 0.7$  de zinc. On note que l'effet du désordre est très clair et il fait décaler le gap d'énergies  $E_T^L$ .
- Le gap d'énergie indirect  $E_T^X$  augmente non linéairement en fonction de la concentration  $x$  de Zinc. On remarque aussi que l'effet de désordre est très clair et on ne peut pas le négliger.

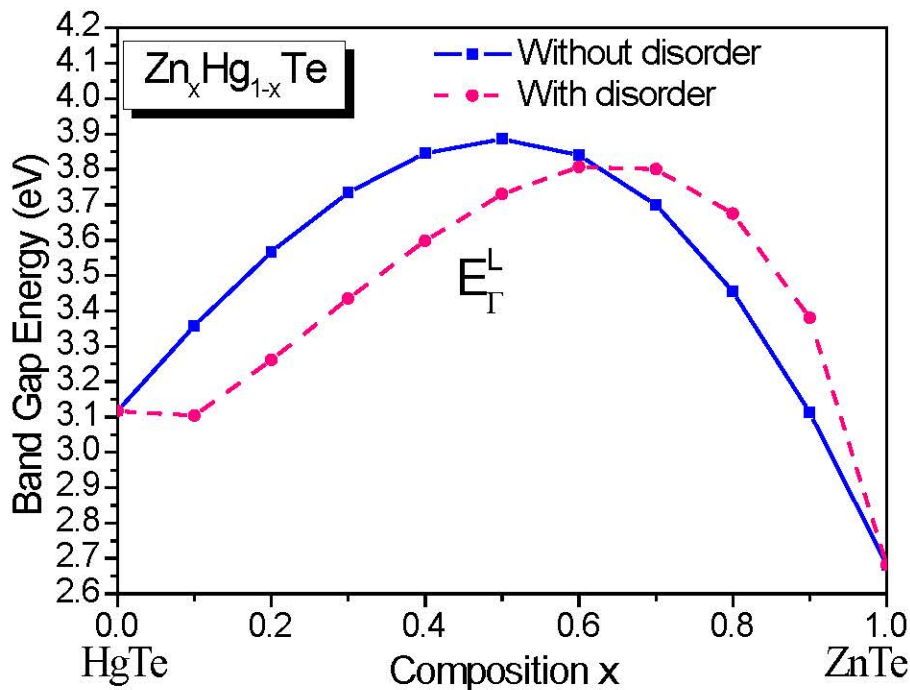


Figure (III-2): la variation du gap  $E_T^L$  en fonction de la concentration "x" de Zinc de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

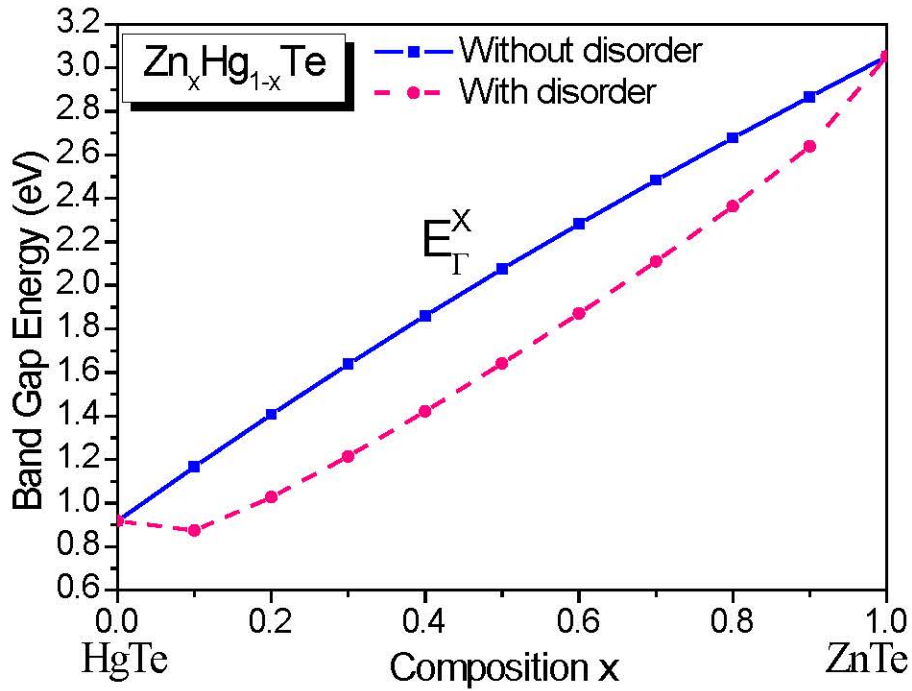


Figure (III-3): la variation du gap  $E_{\Gamma}^X$  en fonction de la concentration “x” de Zinc de l’alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l’effet du désordre compositionnel.

Les interpolations quadratiques des courbes  $E_{\Gamma}^L$  et  $E_{\Gamma}^X$  sont ajustées selon les expressions analytiques suivantes:

$$E_{\Gamma}^L = 3,05177 + 3,62068 x - 3,945 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-8})$$

$$E_{\Gamma}^L = 2,86983 + 3,41235 x - 3,31105 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-9})$$

$$E_{\Gamma}^X = 0,92087 + 2,49082x - 0,36367x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-10})$$

$$E_{\Gamma}^X = 0,84554 + 0,8707 x + 1,3095 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-11})$$

On constate que lorsqu’on néglige l’effet du désordre les paramètres de courbure sont négatifs. Lorsqu’on tient compte de l’effet du désordre les paramètres de courbure augmentent. Mais ce paramètre reste négatif pour le gap  $E_{\Gamma}^L$  et il devient positif pour le gap  $E_{\Gamma}^X$ . Une remarque très importante est que la valeur du paramètre de courbure c pour le gap indirect  $E_{\Gamma}^X$ , lorsqu’on tient compte de l’effet du désordre compositionnel est la plus grande comparativement avec les valeurs du paramètre de courbure c pour les gaps direct et indirect ( $E_{\Gamma}^I$  et  $E_{\Gamma}^L$ ), cela signifie que le gap énergétique  $E_{\Gamma}^X$  est fortement affecté par le désordre compositionnel.

Même constatation a été faite pour les gaps énergétiques  $E_X^X$  et  $E_L^L$  (figures III-4 et III-5) et leurs interpolations quadratiques (équations III-12 – III-15).



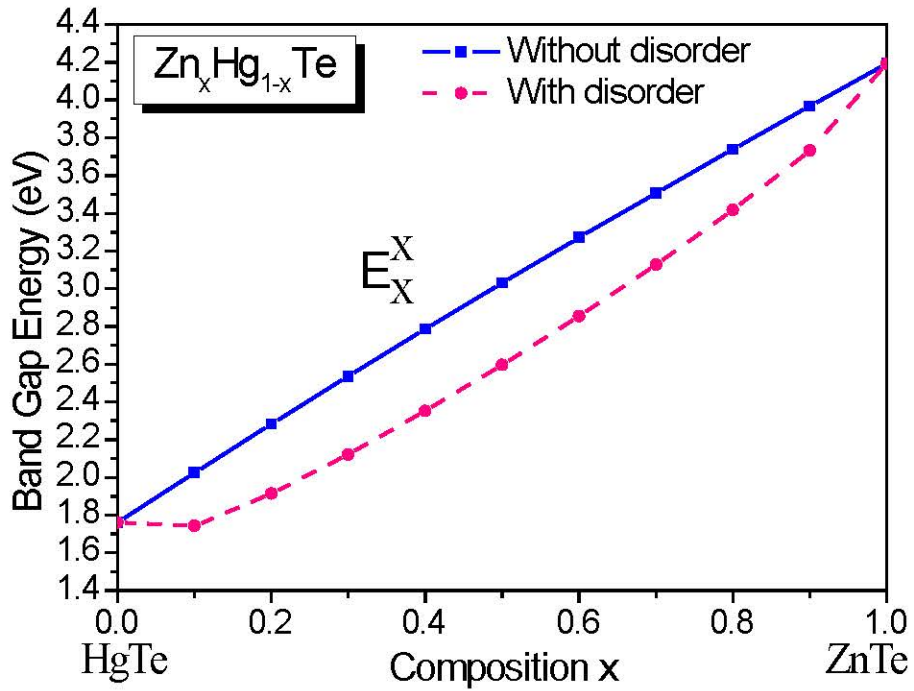


Figure (III-4) : la variation du gap d'énergie  $E_X^X$  en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

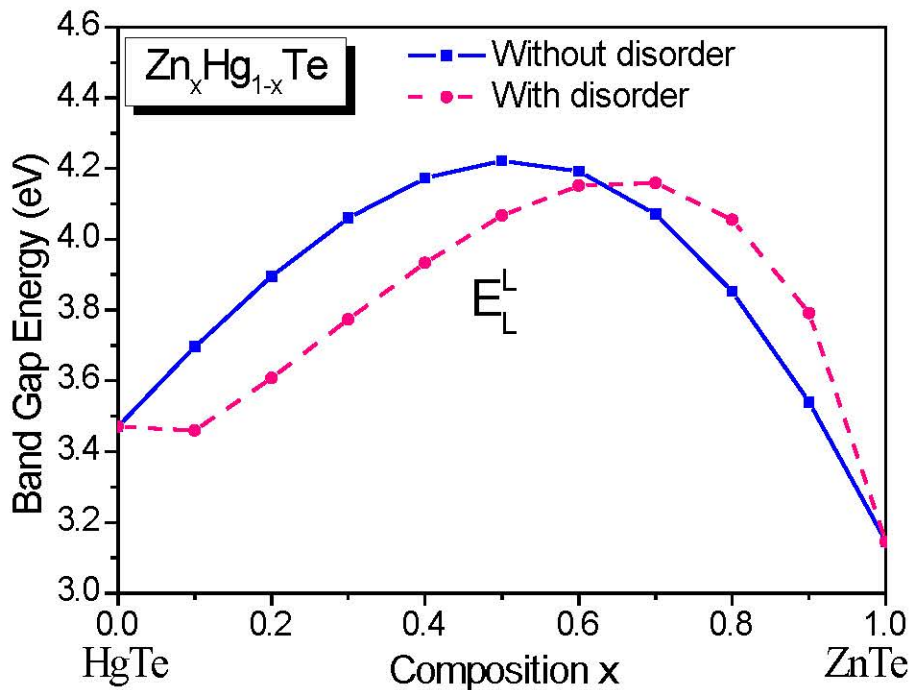


Figure (III-5) : la variation du gap d'énergie  $E_L^L$  en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

$$E_X^X = 1,7622 + 2,64354 x - 0,21384 x^2 \quad (VCA) \quad (III-12)$$

$$E_x^X = 1,69553 + 1,0052 x + 1,46207 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-13})$$

$$E_L^L = 3,405 + 3,44347 x - 3,65616 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-14})$$

$$E_L^L = 3,23739 + 3,208x - 3,02363 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-15})$$

Les figures (III-6) et (III-7) représentent la variation des gaps d'énergies directes et indirectes  $E_T^T$ ,  $E_T^X$  et  $E_T^L$  en fonction de la concentration  $x$  de Zinc de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

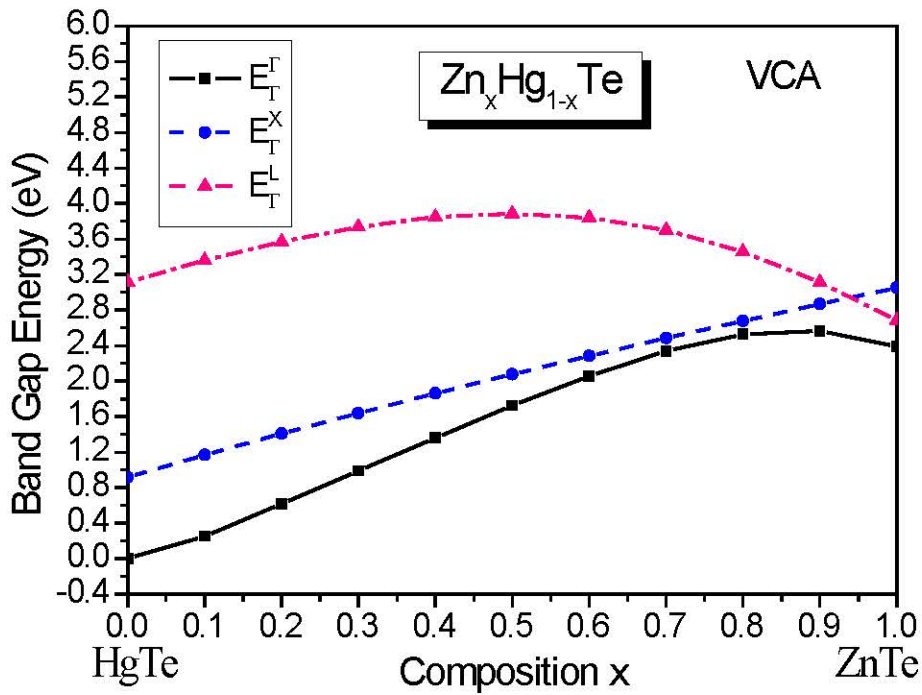


Figure (III-6): gaps d'énergies direct et indirects en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  calculés sans tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.

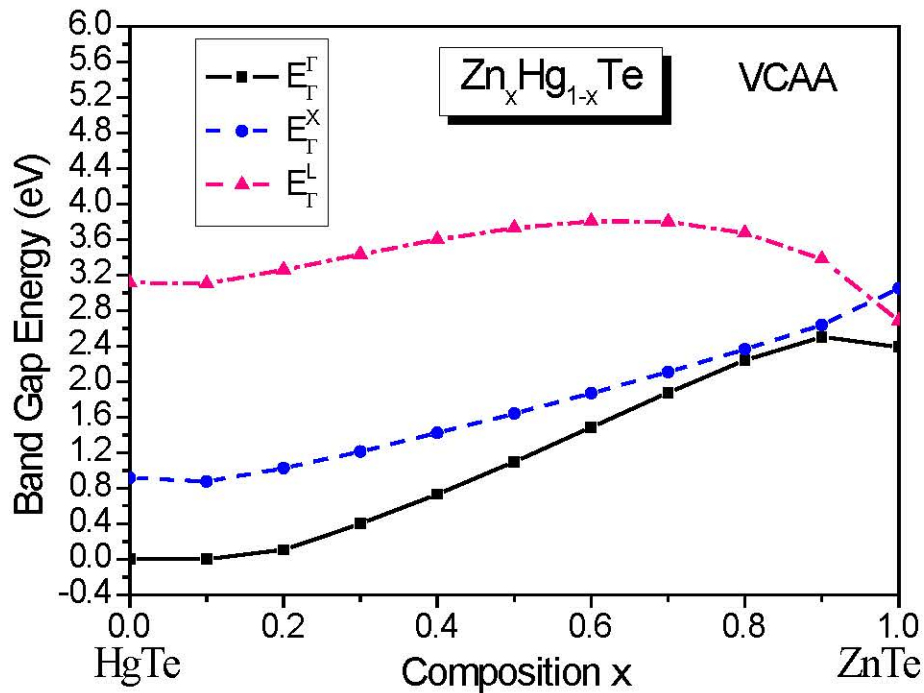


Figure (III-7): gaps d'énergies directs et indirects en fonction de la concentration "x" de Zinc dans l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.

- ❖ On peut constater que ces gaps d'énergies augmentent non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de Zinc.
- ❖ On constate le gap direct  $E_T^\Gamma$  est le plus bas énergétiquement et qu'il n'y a pas une transition entre le gap direct  $E_T^\Gamma$  et les gaps indirect  $E_T^X$  et  $E_T^L$ . Donc, notre alliage  $Zn_xHg_{1-x}Te$  a un gap direct  $E_T^\Gamma$  pour l'intervalle de la concentration x de Zinc [0, 1].
- ❖ Il faut signaler qu'il y a un gap entre la première et la deuxième bande de valence au point de haute symétrie "X". Ce gap est appelé le gap antisymétrique. Nos calculs de ce gap antisymétrique pour les alliages ternaires  $Zn_xHg_{1-x}Te$  est présenté dans le tableau (III-3) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Tableau (III-3): Le gap antisymétrique des alliages ternaires  $Zn_xHg_{1-x}Te$ 

Matériaux	Energie $E_{(2-1)v}^X$ (eV)
HgTe	10.91442
$Zn_{0.1}Hg_{0.9}Te$	10,09747 <sup>*</sup> 10,7879 <sup>**</sup>
$Zn_{0.3}Hg_{0.7}Te$	8,60377 <sup>*</sup> 9,55714 <sup>**</sup>
$Zn_{0.5}Hg_{0.5}Te$	7,29435 <sup>*</sup> 8,21728 <sup>**</sup>
$Zn_{0.7}Hg_{0.3}Te$	6,13687 <sup>*</sup> 6,89184 <sup>**</sup>
$Zn_{0.9}Hg_{0.1}Te$	5,06463 <sup>*</sup> 5,52952 <sup>**</sup>
ZnTe	4.53091

\* Nos calculs sans désordre

\*\* Nos calculs avec désordre

La figure (III-8) illustre la variation du gap antisymétrique d'énergie  $E_{(2-1)v}^X$ , en fonction de la composition  $x$  de Zinc de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. On constate qu'il y a une diminution considérable non linéaire du gap antisymétrique d'énergie  $Zn_xHg_{1-x}Te$  en fonction de la composition  $x$  de Zinc. On remarque aussi que l'effet du désordre est très clair et on ne peut pas le négliger.

Il a été rapporté dans la littérature que le gap antisymétrique (le gap entre la 1<sup>ère</sup> et la 2<sup>ème</sup> bande de valence au point X) est considéré comme une mesure qualitative de l'ionicité du cristal, cette hypothèse a été confirmée par la proposition de Chelikowsky et al. [13] et les calculs de Bouarissa et al. [14].

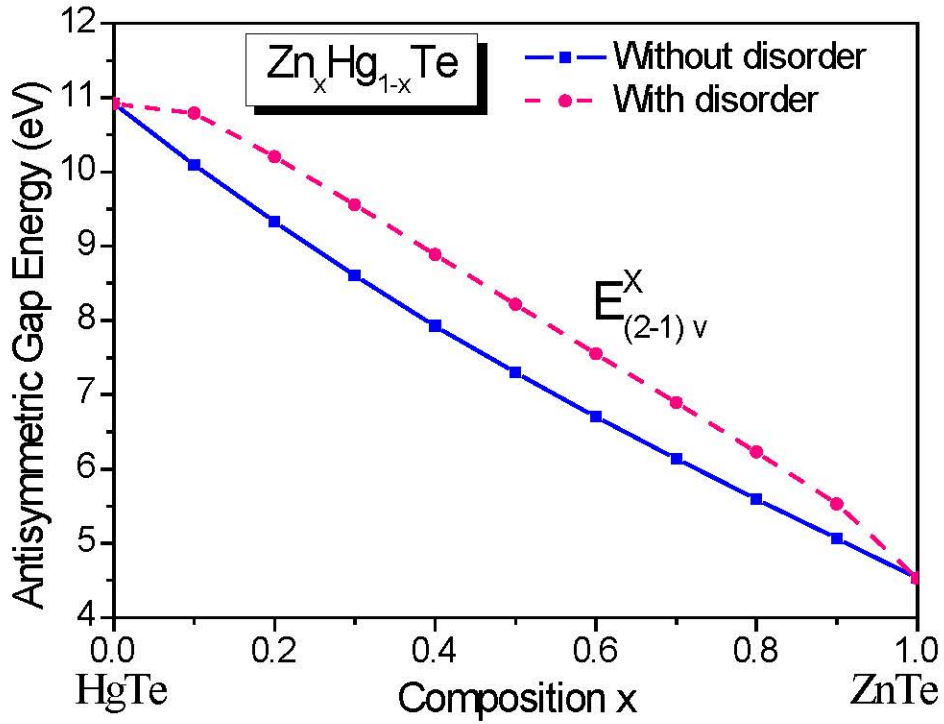


Figure (III-8): la variation du gap antisymétrique d'énergie  $E_{(2-1)v}^X$  en fonction de la composition "x" de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Les expressions analytiques de gap antisymétrique des alliages ternaires sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA) qui nous permet de tracer la courbe du gap antisymétrique sont:

$$E_{(2-1)v}^X = 10,88369 - 8,02248 x + 1,71303 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-16})$$

$$E_{(2-1)v}^X = 11,09659 - 4,67744 x - 1,8271 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-17})$$

Le gap énergétique entre la première et la quatrième bande de valence au point  $\Gamma$  est représenté dans le tableau (III-4) des alliages ternaires  $Zn_xHg_{1-x}Te$ . On constate que le gap pour  $HgTe$  est plus élevé que celui de  $ZnTe$ .

Tableau (III-4): La largeur de la bande de valence au point  $\Gamma$  des alliages ternaires  $Zn_xHg_{1-x}Te$ 

Matériaux	Energie $E_{\Gamma(1-4)v}^{\Gamma}$ (eV)
HgTe	13.34912
$Zn_{0.1}Hg_{0.9}Te$	12,64923 <sup>*</sup> 13,30435 <sup>**</sup>
$Zn_{0.3}Hg_{0.7}Te$	11,47585 <sup>*</sup> 12,31564 <sup>**</sup>
$Zn_{0.5}Hg_{0.5}Te$	10,615900 <sup>*</sup> 11,33452 <sup>**</sup>
$Zn_{0.7}Hg_{0.3}Te$	10,05889 <sup>*</sup> 10,5340 <sup>**</sup>
$Zn_{0.9}Hg_{0.1}Te$	9,775960 <sup>*</sup> 9,97059 <sup>**</sup>
ZnTe	9.72732

\*Nos calculs sans désordre

\*\*Nos calculs avec désordre

La figure (III-9) présente la variation de la largeur de bandes de valence  $E_{\Gamma(1-4)v}^{\Gamma}$  en fonction de la composition x de Zinc de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

On constate qu'il y a une diminution non linéaire de la largeur de bandes de valence  $E_{\Gamma(1-4)v}^{\Gamma}$  en fonction de la composition x de Zinc de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. On suggère à cet effet, la décroissance du caractère ionique et l'apparition du caractère covalent. On remarque aussi que l'effet du désordre est clair et on ne peut pas le négliger.

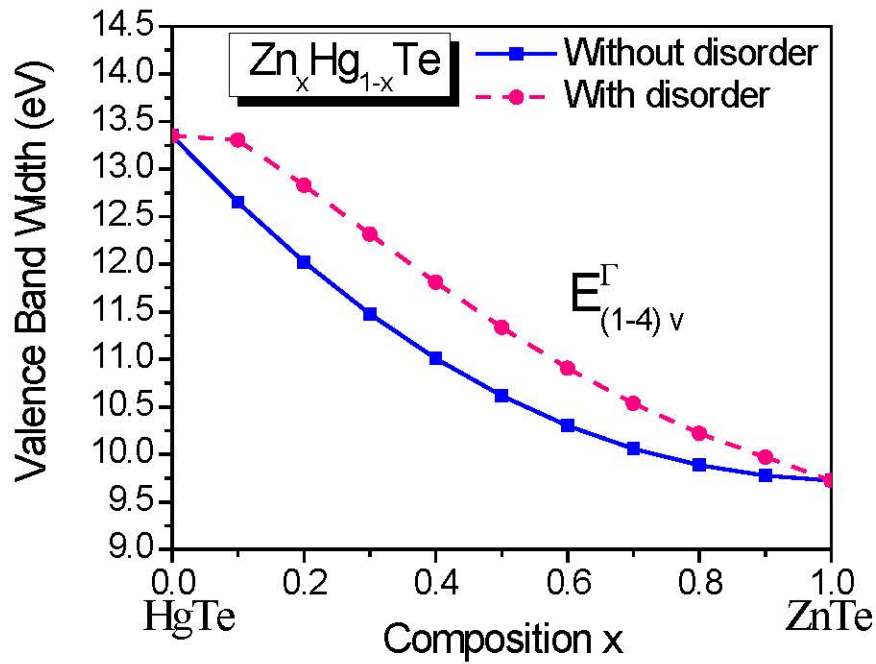


Figure (III-9) : la variation de la largeur de bandes de valence  $E_{(1-4)v}^{\Gamma}$ , en fonction de la composition  $x$  de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

### III.2.2. Etude des structures de bandes électroniques de l'alliage ternaire $Zn_xHg_{1-x}Te$ :

L'étude de la structure de bande électronique de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  est calculée pour des points de haute symétrie de la première zone de Brillouin, pour quelques valeurs de la concentration "x" de Zinc, avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Nos résultats pour les composés binaires  $HgTe$  et  $ZnTe$  sont présentées par les Figures (III-10) et (III-11) respectivement.

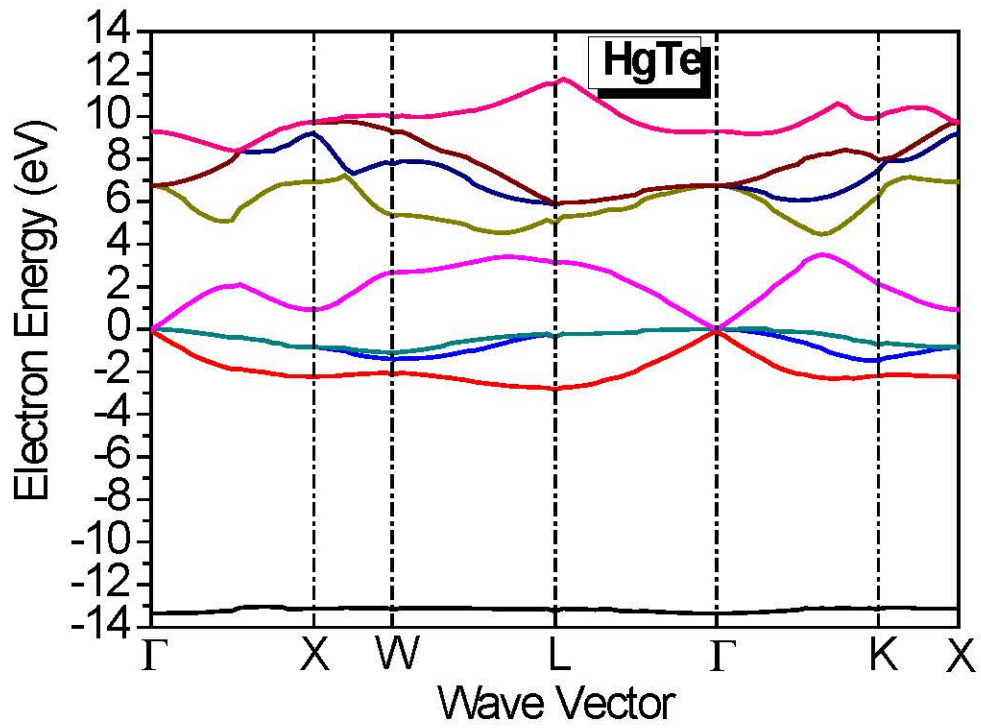


Figure (III-10): la structure de bande électronique de la composition binaire HgTe

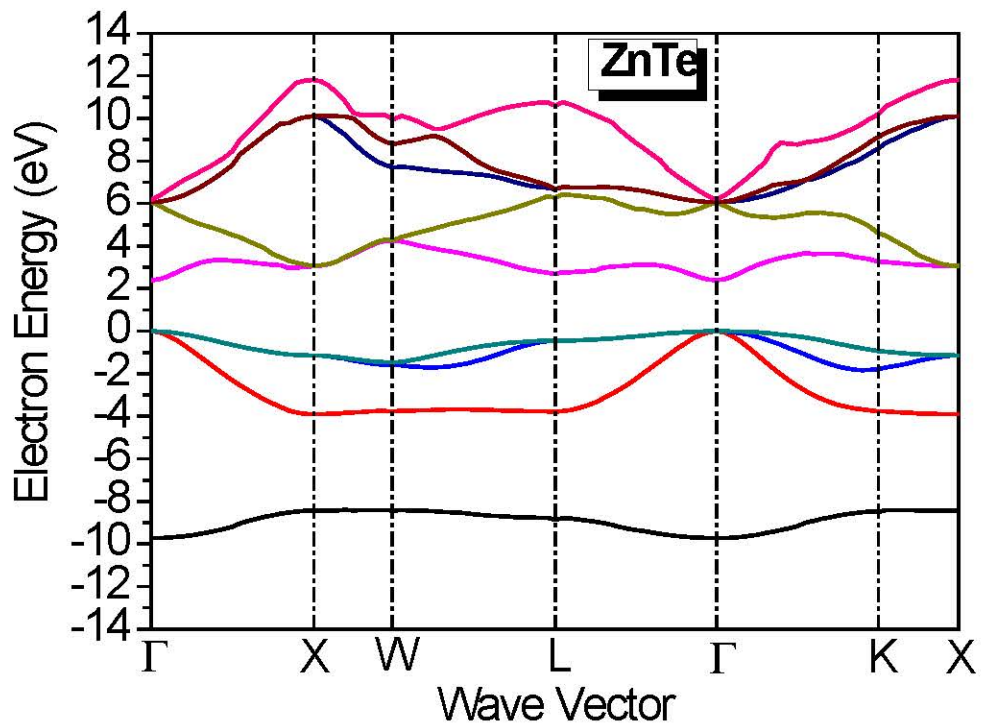


Figure (III-11): la structure de bande électronique de la composition binaire ZnTe



La figure (III-10) présente la structure de bande électronique du composé binaire  $HgTe$ , on remarque que le maximum de la bande de valence est au point  $\Gamma$  et le minimum de la bande de conduction est aussi au point  $\Gamma$ , mais les deux bande sont collé c.à.d qu'il n'y a pas un gap énergétique. Donc le composé binaire  $HgTe$  n'est pas un semiconducteur, mais un semi-métal. Ainsi, la figure (III-11) illustre la structure de bande électronique de la composition binaire  $ZnTe$ . On remarque aussi que le maximum de la bande de valence est au point de haute symétrie  $\Gamma$  et le minimum de la bande de conduction est aussi au point  $\Gamma$ , donc le composé binaire ( $ZnTe$ ) est un semi-conducteur à gap d'énergie direct  $E_T^\Gamma$ .

On remarque aussi dans les deux figures, que les bandes de conduction sont plus dispersées que celles des bandes de valences, cela est dû au fait que les électrons des bandes de conduction sont plus libres. Il faut noter qu'il y a un gap entre la première et la deuxième bande de valence au point de haute symétrie X, ce gap est relié à la différence des potentiels des cations Zn et Hg et anion Te. Ce gap «antisymétrique» a été proposé comme une mesure qualitative de l'ionicté du cristal ce qui confirme la proposition de Chelikowsky et al. [13]. Ainsi que les résultats trouvés par Bouarissa et al. [14], dans leurs études sur les semiconducteurs de type (IV-IV, II-VI, III-V). En fait, l'ionicté d'un semiconducteur est un paramètre important avec lequel on peut distinguer entre liaison covalente et ionique dans les solides [15, 16]. A cet égard, Chelikowsky et autres. [13] ont rapporté que le gap antisymétrique (l'écart d'énergie entre la première et la seconde bande de valence au point X) peut donner des renseignements sur le caractère ionique du matériau [17].

Le tableau (III-5) représente la variation du gap antisymétrique et l'ionicté du composé binaire de cet alliage. Les valeurs du gap antisymétrique des composés binaires  $HgTe$  et  $ZnTe$  sont respectivement 10.91442 eV et 4.53091 eV, l'ionicté de l'alliage  $Zn_xHg_{1-x}Te$  diminue avec l'augmentation de la concentration "x" de Zinc, donc le  $HgTe$  est plus ionique que le  $ZnTe$ . On remarque aussi que l'effet du désordre augmente le gap antisymétrique ce que signifie que l'effet du désordre augmente aussi l'ionicté de l'alliage. L'augmentation de l'ionicté s'accompagne aussi d'une diminution des forces de cohésion, donc d'une augmentation possible du nombre de défauts créés sous irradiation. L'augmentation d'intensité de l'émission satellite est donc due à une augmentation du remplissage d'états de défauts par piégeage et, dans une moindre part, à une possible augmentation du nombre d'états de défauts. L'ensemble de ces résultats démontre qu'il existe une relation entre l'ionicté, la densité des défauts et la probabilité de piégeage des charges par ces défauts [18].

Tableau (III.5): La variation du gap antisymétrique  $E^X_{(2-1)v}$  et l'ionicté des composants binaires

Matériaux	Energie $E^X_{(2-1)v}$ (eV)	Ionicté
HgTe	10.91442	0.650 <sup>a,b,d</sup> , 0.740 <sup>c</sup> , 0.78 <sup>d</sup>
Zn <sub>0.1</sub> Hg <sub>0.9</sub> Te	10,09747 <sup>*</sup> 10,78790 <sup>**</sup>	—
Zn <sub>0.3</sub> Hg <sub>0.7</sub> Te	8,60377 <sup>*</sup> 9,55714 <sup>**</sup>	—
Zn <sub>0.5</sub> Hg <sub>0.5</sub> Te	7,29435 <sup>*</sup> 8,21728 <sup>**</sup>	—
Zn <sub>0.7</sub> Hg <sub>0.3</sub> Te	6,13687 <sup>*</sup> 6,89184 <sup>**</sup>	—
Zn <sub>0.9</sub> Hg <sub>0.1</sub> Te	5,06463 <sup>*</sup> 5,52952 <sup>**</sup>	—
ZnTe	4.530910	0.609 <sup>a,b,d</sup> , 0.560 <sup>c</sup> , 0.68 <sup>d</sup>

\* Nos calculs sans désordre

\*\* Nos calculs avec désordre

(a) Réf [15].

(b) Réf [19].

(c) Réf [20].

(d) Réf [21].

Les figures (III-12-III-16) représentent les structures de bandes électroniques de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  pour certaines concentrations ( $x=0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ ) de Zinc le long des points de haute symétrie de la première zone de Brillouin avec et sans tenir compte de l'effet du désordre. On prend le maximum de la bande de valence comme une référence du zéro d'énergie, ces figures illustre que le maximum de la bande de valence est au point  $\Gamma$  et le minimum de la bande de conduction est aussi au point  $\Gamma$ , donc les alliages ternaires semiconducteurs  $Zn_{0.1}Hg_{0.9}Te$ ,  $Zn_{0.3}Hg_{0.7}Te$ ,  $Zn_{0.5}Hg_{0.5}Te$ ,  $Zn_{0.7}Hg_{0.3}Te$ ,  $Zn_{0.9}Hg_{0.1}Te$  ont un gap direct.

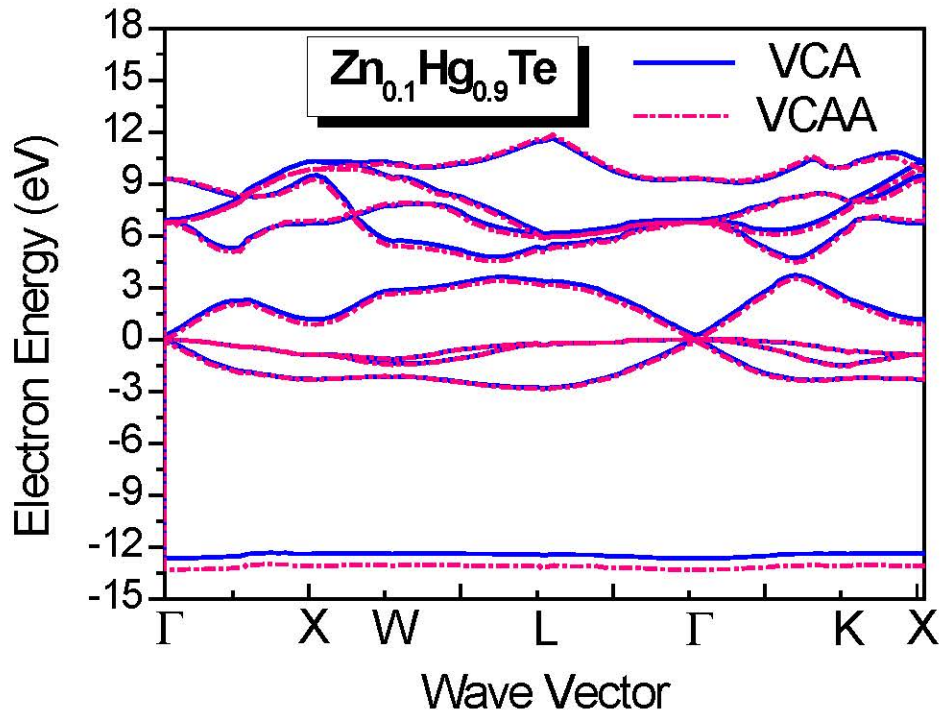


Figure (III-12): la structure de bande électronique de l'alliage ternaire  $Zn_{0.1}Hg_{0.9}Te$

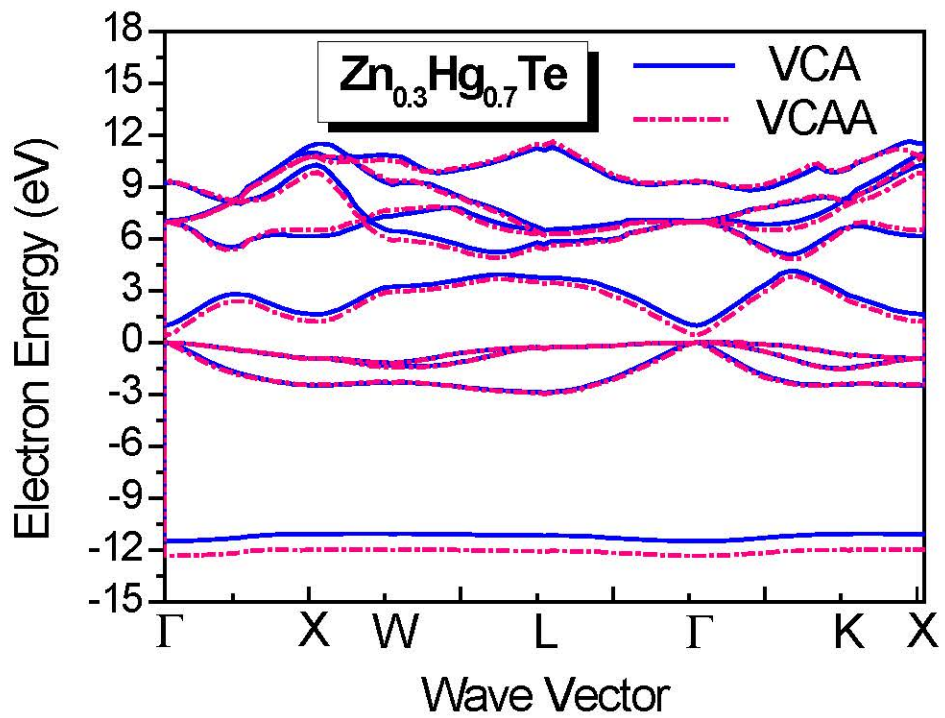


Figure (III-13) : la structure de bande électronique de l'alliage ternaire  $Zn_{0.3}Hg_{0.7}Te$

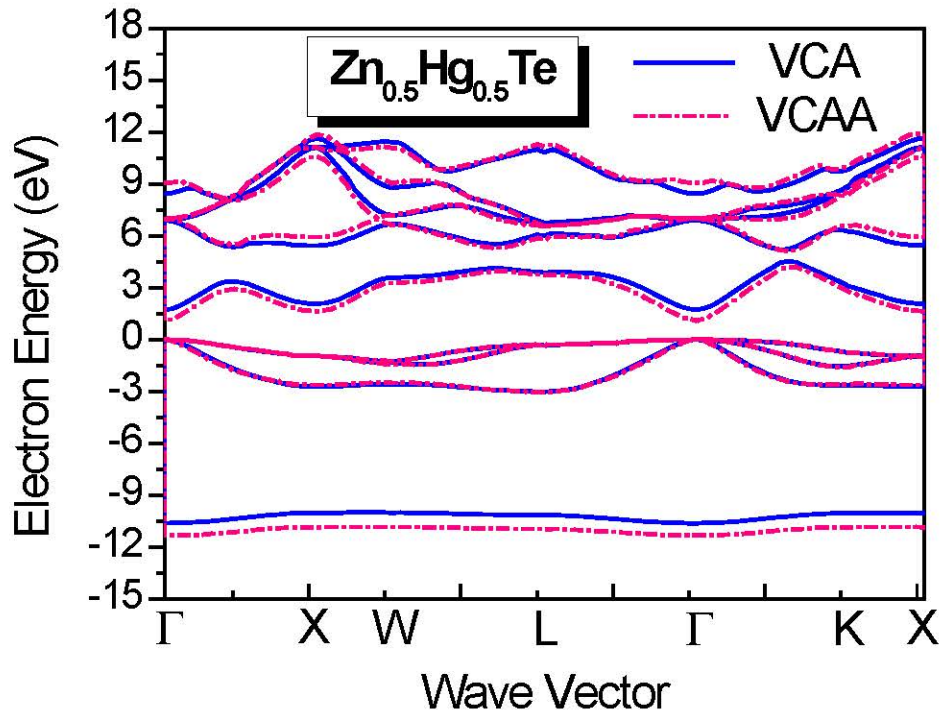


Figure (III-14): la structure de bande électronique de l'alliage ternaire  $Zn_{0.5}Hg_{0.5}Te$

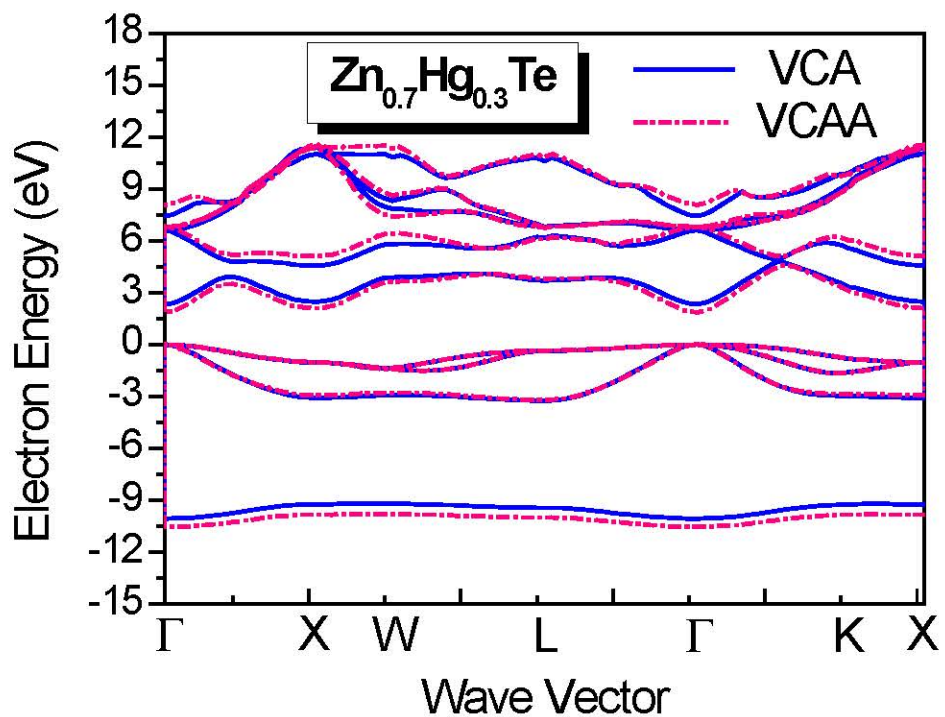


Figure (III-15): la structure de bande électronique de l'alliage ternaire  $Zn_{0.7}Hg_{0.3}Te$

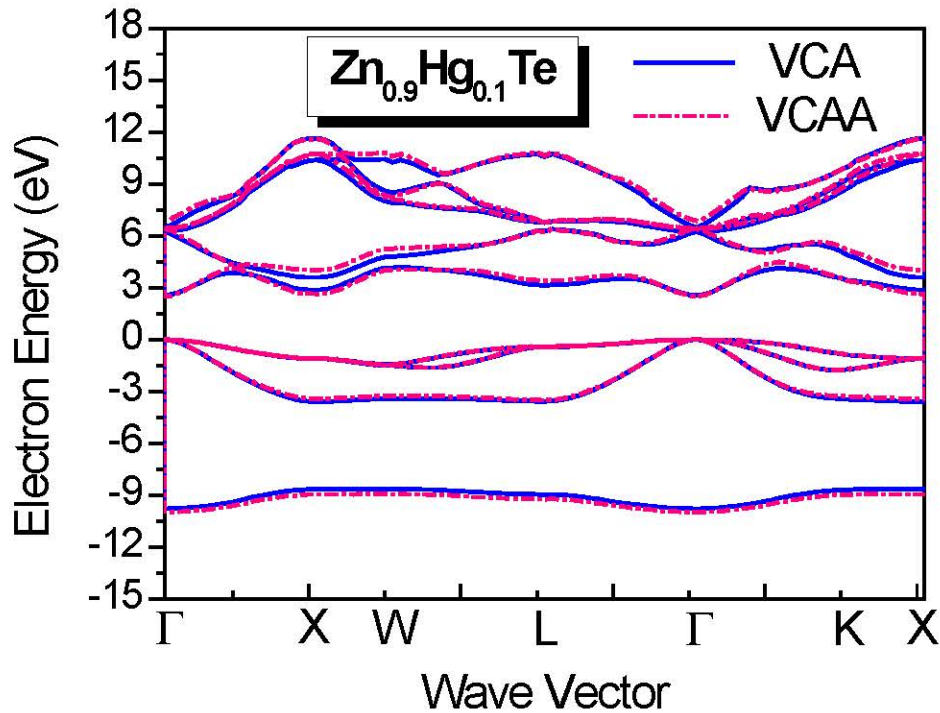


Figure (III-16): la structure de bande électronique de l'alliage ternaire  $Zn_{0.9}Hg_{0.1}Te$

On remarque lorsqu'on augmente la concentration de Zinc le gap direct (entre la 4<sup>ème</sup> bande de valence et 1<sup>ère</sup> bande de conduction au point de haute symétrie  $\Gamma$ ) augmente aussi. Mais l'effet du désordre fait diminuer le niveau de la première bande de conduction c.à.d cet effet fait diminuer le gap direct ( $\Gamma - \Gamma$ ).

Par contre lorsqu'on augmente la concentration de Zinc le niveau de la 1<sup>ère</sup> bande de valence au point de haute symétrie X diminue considérablement. Ce qui signifie la diminution de l'ionicté des alliages ternaires semiconducteurs  $Zn_{0.1}Hg_{0.9}Te$ ,  $Zn_{0.3}Hg_{0.7}Te$ ,  $Zn_{0.5}Hg_{0.5}Te$ ,  $Zn_{0.7}Hg_{0.3}Te$ ,  $Zn_{0.7}Hg_{0.3}Te$ ,  $Zn_{0.9}Hg_{0.1}Te$ . Mais l'effet du désordre fait diminuer le niveau de la 1<sup>ère</sup> bande de valence c.à.d l'effet du désordre fait augmenter l'ionicté de ces alliages. Autre constatation a été faite est que les bandes de conduction sont plus dispersées que les bande de valence. L'effet du désordre est très clair mais affecte faiblement les structures de bandes.

### III.2.3. L'effet de la concentration sur les structures de bandes

La figure (III-17) montre la structure de bande de l'alliage ternaire  $Zn_{0.9}Hg_{0.1}Te$  sous l'effet de la concentration de Zinc.

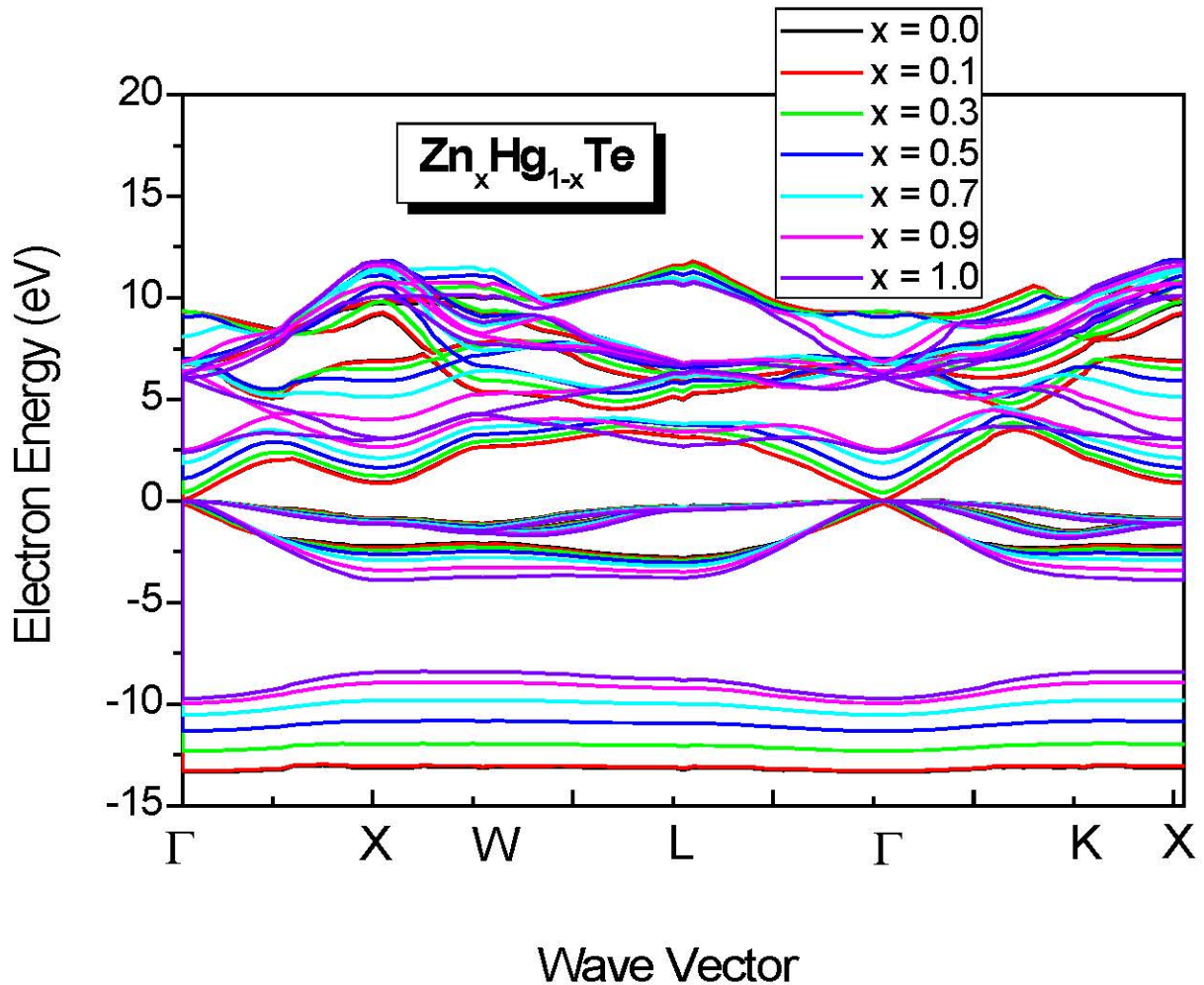


Figure (III-17): l'effet de la concentration « x » de Zinc sur les structures de bandes de l'alliage ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$

La figure (III-17) montre l'effet de la concentration « x » de Zinc sur la structure de bande, en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel. On constate que notre alliage  $Zn_xHg_{1-x}Te$  est un semiconducteur à gap direct pour l'intervalle [0-1] de la concentration « x » de Zinc.

Les bandes de valences et les bandes de conductions sont décalées à cause de l'effet de la concentration « x » de Zinc où les bandes de conductions sont décalées vers le haut. Mise à part, la 4<sup>ième</sup> bande de valence qu'elle est pris comme une référence du zéro d'énergie, il y a un décalage vers le bas de la 2<sup>ième</sup> bande de valence au point de haute symétrie X. Par contre, il y a un décalage vers le haut de la 1<sup>ième</sup> bande de valence au point de haute symétrie X. Ce décalage mène à un amincissement du gap antisymétrique au point de haute symétrie X. Cela nous conduit à dire que lorsqu'on incorpore plus de Zinc dans l'alliage  $Zn_xHg_{1-x}Te$ , l'ionicté diminue.

**Références :**

- [1] M. Lomascolo, G.H. Li, K. Syassen, R. Cingolani, I. Suemune, *Phys. Rev. B*, 1994, **50**, 14635.
- [2] S. Mouzali, thèse de doctorat, université Paris-Saclay, (France), 2015.
- [3] Y. Al- Douri, H. Abid, A. Zaoui, H. Aourag, *Physica B*, 2001, **301**, 295.
- [4] L. Hannachi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie), 2010.
- [5] H. Zenasni, mémoire de magister, université Abou-Bakr Belkaid de Tlemcen, (Algérie), 2008.
- [6] C. Frayret, thèse de doctorat, université de Bordeaux XI, (France), 2004.
- [7] P. Y. Yu, M. Cardona, *Physics and Materials properties*, Fourth edition, 2010.
- [8] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic structure and optical properties of semiconductors*, Springer series in solid-state sciences, 1988.
- [9] S. C. Jain. M. Willander. J. Narayan and R. Van. Overstraeten, *J. App. Phys*, 2000, **87**, 965.
- [10] S. Adachi, *Properties of semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons, 2009.
- [11] S. Kasap, P. Capper, *Springer hand book of electronic and photonic material*, Springer Science, 2017.
- [12] S. Adachi, *Handbook on physical properties of Semiconductor, II-VI Compound Semiconductors*, Kluwer Academic Publishers, 2004.
- [13] J. R. Chelikowsky, T. J. Wagener, J. H. Weaver, A. Jin, *Phys. Rev. (b)* **40**, 9644, (1989)
- [14] N. Bouarissa, R. N. West and H. Aourag, *Phys. Stat. Sol. (b)* **188**, 723 (1995).
- [15] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic Press, New York, 1973.
- [16] N. Bouarissa, *Physica (b)* **399**, 126, 2007.
- [17] W. Kara Mohammed, thèse de doctorat, université de Biskra, (Algérie), 2012.
- [18] C. Bonnelle, G. Blaise, C. Le Gressus et D. Tréheux, *les isolants*, Ed Lavoisier, ( Paris ) 2010.
- [19] N. E. Christensen, S. Satpathy, and Z. Pawlowska, *Phys. Rev. B* **36**, 1032 (1987).
- [20] W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* **8**, 4487 (1973).
- [21] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons , 2005.

## *Conclusion générale*



### Conclusion générale :

Dans ce travail, nous avons étudié quelques propriétés électroniques à savoir, le gap d'énergie, le gap antisymétrique et les structures de bandes des composés semiconducteurs binaires  $ZnTe$  et  $HgTe$  et leur alliage semiconducteur ternaire  $Zn_xHg_{1-x}Te$  dans la structure zinc-blende.

Nos calculs sont basés sur l'utilisation de la méthode du pseudo potentiel empirique (E.P.M) combiné avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Cette méthode a fait preuve d'une efficacité particulière pour l'estimation des gaps direct  $E_T^\Gamma$ ,  $E_X^X$ ,  $E_L^L$  et indirect  $E_T^X$ ,  $E_T^L$  et l'estimation du paramètre de courbure ( $c=0.46$  eV). Ce dernier a été parfaitement vérifié par une comparaison avec les valeurs expérimentales et théoriques. Les autres propriétés électroniques comme les structures de bandes sont en parfait accord avec les prédictions théoriques et expérimentales. Cela prouve la puissance de notre procédure d'ajustement et la qualité de nos facteurs de forme.

Nous avons calculé la variation des différents gaps d'énergie direct  $E_T^\Gamma$ ,  $E_X^X$ ,  $E_L^L$  et indirect  $E_T^X$ ,  $E_T^L$  en fonction de la composition « x » de Zinc pour l'alliage  $Zn_xHg_{1-x}Te$ , Nous avons trouvés que les gaps d'énergie  $E_T^\Gamma$ ,  $E_T^X$ ,  $E_X^X$  Augmentent d'une façon non linéaire avec l'augmentation de la concentration de Zinc avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Il y a une diminution non linéaire de la variation du gap antisymétrique d'énergie  $E_{(1-2)v}^X$  et la variation de la largeur de bandes de valence  $E_{(1-4)v}^X$  avec l'augmentation de la concentration de Zinc avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel d'une part, et d'autre part, il y a une augmentation jusqu' a une valeur précise puis une diminution avec l'augmentation de la concentration de Zinc pour les gaps d'énergie  $E_T^L$  et  $E_L^L$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Nous avons aperçus qu'il n'y a aucune transition du gap direct  $E_T^\Gamma$  et  $E_T^X$  pour les concentrations  $0 < x < 1$  de Zinc avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel, nos résultat montre que notre matériau est un semiconducteur a gap direct pour toute les concentrations de Zinc.

Nous avons déterminé les structures de bandes des composés binaire  $ZnTe$  et  $HgTe$  et leur alliages  $Zn_xHg_{1-x}Te$  le long des points de hautes symétries dans la première zone de Brillouin, avec et sans tenir compte de l'effet de désordre compositionnel et sous l'effet de la concentration «x» de Zinc.

Nous remarquons aussi que l'effet du désordre est important et très clair pour les gaps d'énergie direct  $E_{\Gamma}^F$ ,  $E_L^L$ , et indirect  $E_{\Gamma}^X$ ,  $E_{\Gamma}^L$  et les structures de bandes énergétiques, le gap énergétique antisymétrique  $E_{(1-2)v}^X$  et la largeur des bandes de valence  $E_{(1-4)v}^F$ .