



République Algérienne Démocratique et Populaire
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
Université 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 de la matière condensée

THEME

Etude de l'effet de l'Aluminium sur les propriétés optiques et diélectriques de l'alliage ternaire (Al, Ga)Sb

Présenté par :

Chayma Haroun et Habbala Ben difallah

Devant le jury

Labidi Herissi	MCB	Univ. Tébessa	Président
Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Amira El Hassasna	MAA	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le Mardi 25 / 06 / 2019 à 13^h:00



République Algérienne Démocratique et Populaire
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
Université 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 de la matière condensée

THEME

Etude de l'effet de l'Aluminium sur les propriétés optiques et diélectriques de l'alliage ternaire (Al, Ga)Sb

Présenté par :

Chayma Haroun et Habbala Ben difallah

Devant le jury

Labidi Herissi	MCB	Univ. Tébessa	Président
Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Amira El Hassasna	MAA	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le Mardi 25 / 06 / 2019 à 13^h:00



Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat

(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)



Nous soussignons

Nom, prénom: Haroun Chaïma & Bendjallati Habbala

N° de carte d'étudiant: (1) 200740 (2) 200128

Régulièrement inscrits (es) en **Master** au **Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2018/2019**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: Physique de la matière condensée

Intitulé du mémoire: Etude de l'effet de l'Aluminium sur les propriétés optiques et diélectriques de l'alliage ternaire (Al, Ga)Sb.

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusions définitive.

المجلس الشعبي البلدي

ويعتقد ان هذا العمل

هو من عمل الطالب

ويعتقد ان هذا العمل

هو من عمل الطالب

ويعتقد ان هذا العمل

هو من عمل الطالب

Fait à Tébessa, le:

Signature des étudiants (es):

(1):

(2):

ملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص الضوئية و خواص العزل الكهربائي للمركبات الثنائية AISb و GaSb و سبائكهما الثلاثية $Al_xGa_{1-x}Sb$ ذات البنية زنك- بلاند مع وبدون أخذ اعتبار لتأثير العشوائية التركيبية.

لدراسة هذا النوع من السبائك الثلاثية تم استعمال طريقة شبه الكمون التجريبية الموضوعية (EPM) المقترنة مع تقريب البلورة الافتراضية (VCA) بأخذ وعدم أخذ العشوائية التركيبية بعين الاعتبار، و بإشراك نموذج Harrison للمدارات المرتبطة (BOM) و قمنا بحساب كل من قرينة الانكسار n ، ثابتة العزل الكهربائي ذات التردد العالي ϵ_∞ وثابتة العزل الكهربائي الستاتيكي ϵ_0 . و قمنا بدراسة فعل العشوائية التركيبية و تأثير تركيز الألومنيوم x على هذه الخواص على المجال $x \in [0-1]$.

بصفة عامة، نتائجنا متوافقة جدا مع الطرق الحسابية الأخرى و الأعمال التجريبية المتوفرة.

الكلمات المفتاحية : AISb، GaSb، زنك- بلاند، شبه الكمون، تقريب البلورة

الافتراضية، نموذج المدارات المرتبطة، قرينة الانكسار، ثابتة العزل الكهربائي.

Abstract

In this work, we studied the optical and dielectric properties of binary AlSb, GaSb compounds, and its ternary $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ alloys in the zinc-blende structure with and without taking into account the effect of compositional disorder.

To study this type of ternary alloys, we used the local empirical pseudopotential (EPM) method coupled with virtual crystal approximation (VCA) with and without taking into account the effect of compositional disorder, associated with the Harrison bond orbital model (BOM), and we calculated the refractive index n , the high-frequency dielectric constant ϵ_∞ and the static dielectric constant ϵ_0 , and we studied the effect of the compositional disorder and the influence of the concentration x of the Aluminum on these properties in the meantime $x \in [0 - 1]$.

In general, our calculations agree well with other methods of calculation and experimental work available.

Key words: AlSb, GaSb, zinc-blende, pseudopotential, virtual crystal approximation, bound orbitals model, refractive index, dielectric constant.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés optiques et diélectriques des composés binaires AlSb, GaSb et ses alliages ternaires $Al_xGa_{1-x}Sb$ dans la structure zinc-blende avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Pour étudier ce type des alliages ternaires, nous avons utilisé la méthode du pseudopotentiel empirique locale (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel, associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM), et nous avons calculé l'indice de réfraction n , la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 , et nous avons étudiés l'effet du désordre compositionnel et l'influence de la concentration x de l'Aluminium sur ces propriétés dans l'intervalle $x \in [0-1]$.

En générale, nos calculs s'accordent bien avec les autres méthodes de calculs et les travaux expérimentaux disponibles.

Mots-clés: AlSb, GaSb, zinc-blende, pseudopotentiel, approximation du cristal virtuel, modèle des orbitales liées, indice de réfraction, constante diélectrique.

Remerciements

Louange à Dieu le clément qui a éclairé notre chemin vers la science, qui nous a donné la volonté, la santé, la chance de poursuivre et de terminer notre travail dans des bonnes conditions.

*Nos remerciements les plus vifs s'adressent à notre encadreur **Dr. Fella Benmakhlouf** Professeur, à l'Université de Tébessa, pour nous avoir dirigée tout le long de la réalisation de ce travail de recherche. Nous la remercions pour tout le temps qu'elle nous a consacré, pour sa patience, sa gentillesse et sa diplomatie dont elle a fait preuve.*

*Nous remercions sincèrement Monsieur **Labidi Herissi** Maître Assistant B à l'université de Tébessa pour avoir accepté de présider ce jury.*

*Nous adressons nos plus sincères remerciements aux membres de jury **Amira El Hassasna** Maître Assistant A à l'université de Tébessa, qui nous a fait l'honneur d'accepter de juger ce modeste travail.*

*Un grand merci au **Dr. Abderrachid Bechiri**, Professeur à l'Université de Tébessa, pour sa disponibilité et sa modestie.*

Nous adressons un vif remerciement à l'ensemble des enseignants qui ont assuré notre formation le long de toutes nos années d'études.

Enfin, merci à toutes les personnes que nous n'avons pas cité et qui nous ont aidé à entreprendre et à réaliser ce travail de mémoire.

إهداء

الحمد لله على إحسانه والشكر على توفيقه وامتنانه باسم الخلق الذي اسجد خاشعاً شاكراً لنعته
وفضله علياً في إتمام هذه الجهد

صاحب الفرنوس الأعلى وسراج الأمة المنير - محمد صلى الله عليه وسلم -

إلى من كان دمه يجري في عروفي إلى من حصد الأشواك عن طريقي لشق طريق العلم إلى من أحمل

اسمه بكل فخر إلى الذي أودعته إلى السولى

أبي الغالي - رحمه الله -

إلى من كانت الجنة تحت قدميها إلى بلسم جروحي إلى أفحوانة الدنيا والشسعة التي تنوب من أجل أن

تنير دربي إلى من ابتسامتها تزيل شقاي وسعادتها ترسم الابتسامة على وجهي

أمي الغالية حفظها الله وأطال في عمرها

إلى إخوتي رفقاء دربي إلى الذين تكون الحياة بدونهم لا شيء إلى سندي في هذه الحياة إلى الذين كنت

غابتهم حمايتي من لفحات الحياة

إخوتي الغوالي

إلى من وجودهم أكسبني قوة ومحبة لا حدود لها إلى زهرات حبتي إلى من عرفت معهن الحب والحنان

أخواتي الغاليات

إلى أخواتي اللاتي لم تلدهن أمي إلى من سهرت معهن في طريق النجاح ودروب الأمل

صديقتي العزيزات - الهام مفيدة حسناء -

أختي وصديقتي إلى توأم هنائي ورفيقتي في هذا العمل هائلة بن ضيف الله

إلى كل من أدخل السعادة إلى قلبي

ولكم مني أجمل التحيات وأعطر الباقات



إهداء

اهدي ثمرة هذا الجهد وعملي المتواضع إلى

الوالدين الكريمين

حفظهما الله

إلى كل أفراد الأسرة الكريمة

إلى جميع الأصدقاء

إلى كل طالب علم

وكل من كان سنداً لي

الطالبة: هبالة بن ضيف الله





Sommaire

Sommaire

Liste des tableaux.....	<i>i</i>
Liste des figures.....	<i>ii</i>
Liste des symboles.....	<i>iv</i>
Introduction générale.....	1
• Références.....	3

Chapitre I

La méthode de pseudopotentiel

I-1-Introduction.....	4
I.2.Théorie du pseudopotentiel.....	4
I.2.a Du potentiel au pseudopotentiel.....	4
I.2.b.Qu'est-ce qu'un pseudopotentiel ?.....	5
I.2.c. Construction des pseudopotentiels.....	5
I.3.La méthode du pseudo potentiel.....	5
I.4. Le formalisme mathématique.....	6
I.5.Les modèles du pseudopotentiel.....	7
I.5.1.Le modèle local.....	8
I.5.1.1. Modèle de Heine et Abarenkov.....	8
I.5.1.2.Modèle d'Ashcroft.....	8
I.5.2.Le modèle non local.....	9
I.5.2.a. Modèle de Heine Abarenkov.....	9
I.5.2.b.Modèle de Gauss.....	9
I.5.2.c.Le modèle d'Ashcroft.....	9
I.6.La méthode empirique du pseudopotentiel (EPM).....	11
I.7.La Méthode de calcul du (E.P.M).....	11
• Références.....	14

Chapitre II

Les propriétés optiques et diélectriques

II.1.Introduction.....	16
II.2.Interaction rayonnement-matière.....	16
II.2.1.Les propriétés optiques.....	16
II.2.2.Photons et électrons.....	16
a-Photon.....	16

b-électron.....	19
II.3. La réflexion des ondes planes.....	19
II.4. Interaction électron- photon (Transition radiative).....	20
II.5. Transition directe et indirecte.....	21
II.5.a.Semiconducteur à gap direct.....	21
II.5.b.Semiconducteur à gap indirect.....	22.
II.6. Propriétés diélectriques	23
II.6.1. Relation de dispersion.....	23
II.7.Calcul de l'indice de réfraction.....	24
La formule de Moss.....	25
L'expression proposée par Ravindra et ses collaborateurs.....	25
La relation empirique de Herve et Vandamme.....	25
II.8.Calcul de la constante diélectrique.....	25
L'expression proposée par Adachi.....	26
II.9. Densité de charge.....	26
II.9.1.Calcul de la densité de charge.....	26
• Références.....	28

Chapitre III

Résultats et discussions

III-1-Introduction.....	29
III.2.L'approximation du cristal virtuel (VCA).....	30
III.3.L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).....	30
III.4.Etude des gaps énergétiques de l'alliage ternaire $Al_x Ga_{1-x} Sb$	32
III.5.Etude des propriétés optiques et diélectriques.....	35
III.5.1.Indice de réfraction.....	35
III.5.2.Les constantes diélectriques.....	40
III.5.2.1.La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞	40
III-5-2-2- La constante diélectrique statique ϵ_0	44
• Références.....	52
Conclusion générale	53

Liste des tableaux

Tableau	Titre	page
Tableau III-1	Les facteurs de forme symétriques V_s et antisymétriques V_A ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs GaSb et AlSb dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a .	31
Tableau III-2	Gaps énergétiques sans désordre (P=0) avec désordre (P=0.098173).	32
Tableau III-3	Les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage $Al_x Ga_{1-x} Sb$ pour les concentrations $x= 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ et 1.0	33
Tableau III-4	L'indice de réfraction n calculé par les différentes relations et les gaps d'énergie fondamentaux des composés binaires semi-conducteurs GaSb, AlSb et leurs alliages.	36
Tableau III-5	La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs GaSb, AlSb et leurs alliages.	40
Tableau III-6	La constante diélectrique statique ϵ_0 calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs GaSb, AlSb et leurs alliages.	44

Liste des figures

Figure	Titre	Page
Figure I-1	Fonction de Heine et Abarenkov	10
Figure I-2	Fonction de Gauss	10
Figure I-3	Fonction d'Ashcrof	110
Figure I-4	L'organigramme de la méthode EPM	13
Figure II -1	Courbes de dispersion. a) Photons dans le vide et dans le semi-conducteur. b) Electrons dans le vide. c) Electrons dans un semi-conducteur à gap direct. d) Electrons dans un semi-conducteur à gap indirect.	18
Figure II-2	Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction a) semi-conducteur à gap direct, b) semi-conducteur à gap indirect, c) absorption direct des photons dans un semi-conducteur à gap indirect	22
Figure III-1	la variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de l'Aluminium de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	34
Figure III-2	La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculé par les différentes relations: sans désordre et avec désordre de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$.	37
Figure III-3	Comparaison de la variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculé avec les différentes relations de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$.	38
Figure III-4	La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculée par les différentes relations: sans désordre et avec désordre de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$.	41
Figure III-5	Comparaison de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculée par les différentes relations de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$.	42

Figure III-6	La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de l'Aluminium, calculée par les différentes relations: sans désordre et avec désordre de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.	45
Figure III-7	Comparaison de la variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculée avec les différentes relations de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.	46
Figure III-8	La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de concentration x de l'Aluminium, calculées par les différentes relations avec désordre de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.	47 48
Figure III-9	Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique à haute fréquence avec le gap d'énergie fondamental de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$. La courbe pleine avec des symboles remplis d'étoile est la graduation faite en utilisant la relation d'Adachi, les autres courbes sont les données du présent travail en utilisant les différentes relations	49
Figure III-10	Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique statique avec le gap d'énergie fondamental de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$. La courbe pleine avec des symboles remplis d'étoile est la graduation faite en utilisant la relation d'Adachi, les autres courbes sont les données du présent travail en utilisant les différentes relations.	49

Liste des Symboles

Symboles	
Chapitre I	
Ψ	La fonction d'onde du système.
φ	Les ondes planes.
φ_C	L'Etats atomique qui occupe le cœur
H	L'Hamiltonien
E_C	L'énergie du cœur.
E	L'énergie de valence.
V_R	Potentiel répulsive positif.
V_C	Potentiel attractif du cœur négatif.
\hbar	Constante réduite de Planck.
Z	le nombre des électrons de valence atomique.
r_c	Le rayon du cœur
A	Potentiel constant dans la région du cœur.
$V_{NL}(r)$	Potentiel non locale.
$V_L(r)$	Potentiel locale.
$A_I(E)$	L'énergie des états profonds.
$f_I(r)$	Une fonction simulant l'effet du cœur.
P_I	L'opérateur de projection.
\vec{R}	Vecteur du réseau direct.
$\vec{\tau}$	Vecteur de la translation réseau direct.
$V_a(\vec{G})$	Facteur de forme.
$S(\vec{G})$	Facteur de structure.
N_a	Nombre d'atome de base.
Chapitre II	
\vec{E}	Le champ électrique.
\vec{H}	Le champ magnétique.
K	Le vecteur d'onde.
ω	La pulsation.
λ	La longueur d'onde.
T	La période de l'onde.
$N(\omega)$	L'indice de réfraction complexe.
$n(\omega)$	L'indice de réfraction réelle.
$k(\omega)$	L'indice d'atténuation et le coefficient d'extinction.
r_n	L'amplitude de coefficients de réflexion pour les composantes normale de l'onde incidente.
r_p	L'amplitude de coefficients de réflexion pour les composantes parallèle de l'onde incidente.

Φ	L'angle d'incidence.
R	Le coefficient de réflexion.
$\varepsilon(\omega)$	La constante diélectrique complexe.
$\varepsilon_1(\omega)$	La partie réelle de la constante diélectrique complexe.
$\varepsilon_2(\omega)$	La partie imaginaire de la constante diélectrique complexe.
α	Le coefficient d'absorption.
c	La vitesse de la lumière dans le vide.
E_g	Le gap d'énergie fondamental.
n	L'indice de réfraction.
ε_∞	La constante diélectrique en haut fréquence.
α_p	La polarité.
$V_a(3)$	Les facteurs de formes antisymétriques à G(111).
$V_s(3)$	Les facteurs de formes symétriques à G(111).
α_c	La covalence du matériau.
ε_0	La constante diélectrique statique.

A decorative graphic of a scroll, oriented vertically. The scroll is white with a black outline and a grey shadow. It has a vertical bar on the left side and a small circular detail at the top right corner. The text "Introduction générale" is centered on the scroll.

Introduction générale

Introduction générale

Le développement de la physique des semi-conducteurs est la conséquence directe des progrès de la mécanique quantique, de la chimie des solides, et des techniques de calcul. Le progrès qui a été réalisé en physique des semi-conducteurs dépend principalement des matériaux de quatrième groupe et les composés III-V. le premier rapport qui a décrit la formation des composés III-V qui a été publiés en 1910 par Theil et Koelsch, qui ont synthétisé un composé à partir de l'Indium de Phosphore. Il en est de même pour l'antimoniure de l'Indium qui a été réalisé par Bolann et all en 1950 [1].

Les alliages ternaires des composés semi-conducteurs III-V, sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre du réseau, gap énergétique, indice de réfraction, constantes optiques et d'autres paramètres physiques qui peuvent être ajustés et contrôlés pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré [2]. Tous les semi-conducteurs III-V forment généralement un cristal avec un arrangement zinc blende où chaque atome trivalent (III) à une coordination tétraédrique avec quatre atomes pentavalents (V) [3]. Ces composés semi-conducteur III-V sont les plus importants du point de vue technologique, et ils ont permis l'application de nouveaux appareils électroniques tels que les transistors, les diodes pour les afficheurs, les diodes laser de nos lecteurs de DVD [2].

Dans notre travail, nous avons utilisé un alliage ternaire semi-conducteur de type III-V de la forme $A_x B_{1-x} C$. Ces types des alliages sont miscibles entre eux en toute proportion. Notre alliage d'intérêt à la forme $Al_x Ga_{1-x} Sb$.

Les alliages ternaires de type $A_x B_{1-x} C$ ont été connus comme semi-conducteurs très utiles pour la fabrication de nouveaux dispositifs optoélectronique. Ceci est du à la possibilité d'ajustement la largeur du gap en variant la concentration x de ces alliages. Plusieurs approches théoriques ont été élaborée pour l'étude des propriétés physique (optique, électronique, structural, mécanique, etc...) des alliages ternaires. L'approximation du cristal virtuel (VCA) à cause de sa simplicité est restée la méthode la plus préférée pour le traitement du désordre chimique des alliages semi-conducteurs [4].

L'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ est un matériau d'une très grande importance dans l'électronique rapide, et il est utilisé comme dispositif infrarouge dans l'optoélectronique, le paramètre de maille est de 6.09\AA pour le composant GaSb et de 6.14\AA pour le composant AlSb ce qui signifie qu'il y'a un assez bon accord de maille [5].

AlSb est un semi-conducteur d'un gap énergétique indirect avec une constante de réseau seulement légèrement plus grande que celle de GaSb. Ces dernières années il a trouvé l'utilisation considérable comme matériau de barrière dans les « mobilités électroniques élevées » [6] et des dispositifs à de longue longueur d'onde optoélectronique [7]. Le gap indirect dans AlSb a été mesuré en utilisant la spectroscopie de modulation par Alibert et al. [8] et ellipsométrie spectroscopique par Zollner et al [9].

La croissance de GaSb a débuté dans les années 60 et l'avènement de l'épitaxie à la fin des années 70 a fortement accentué la fabrication d'antimoniures [10]. Toutefois, les études fondamentales sur l'optimisation de croissance sont plus récentes et sont principalement issues des années 90 suivantes. Encore aujourd'hui, il est impossible de se procurer des substrats semi-isolants (SI) de GaSb. Il est particulièrement intéressant comme substrat parce qu'il présente un accord de maille avec plusieurs composant III-V ternaires, quaternaire et quinaires lesquels ont des gaps qui couvrent une large bande spectrale de $[0.8-4.3] \mu\text{m}$ [11]

Nous avons choisi la méthode du pseudopotentiel empirique (E.P.M), largement utilisée en simulation des propriétés électroniques des solides, en particulier pour les systèmes semi-conducteurs. En effet, elle couvre plusieurs applications [12,13] d'une part et d'autre part, cette méthode combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) donne aussi des résultats logiques comparativement avec ceux trouvés par l'expérience. Cependant l'approximation du cristal virtuel (VCA) est connue pour rendre les paramètres de courbure (bowing) du gap fondamental aussi faible que les résultats trouvés expérimentalement. Pour remédier à ce problème, on inclut l'effet du désordre par l'introduction d'un potentiel effectif du désordre dans l'approximation du cristal virtuel (VCA) [14]. Cela connu sur le nom de l'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).

Ce mémoire est structuré de trois chapitres en plus d'une introduction générale et une conclusion générale.

Le premier chapitre présente la méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M).

le deuxième chapitre regroupe une étude théorique sur les propriétés optiques et diélectriques de l'alliage ternaire.

le troisième chapitre est consacré à l'interprétation des résultats obtenus et la comparaison avec d'autres calculs.

Références

- [1] Compte rendu du G R D, Rapport d'activité, , Nitrures d'élément (Bn, AlN, GaN) (1996-1997).
- [2] N. Bouarissa, R. Bachiri, Phys **B.322** ,193(2002).
- [3] N. Kudayashankar and H. L Bhat Bull. Mater. SCI. **24** ,445,(2001)
- [4] S. J. Lee, T. S. Kwon, K. Nahm and C.K.K.Kim, J. Phys. Condens. Matter. **2**,3253, (1995).
- [5] M. Ayat, Mémoire de magister, Université d'Oran (Algérie), (2009).
- [6] D. H. Chow, H. L. Dunlap, W. Williamson, S. Enquist, B. K. Gilbert, S. Subramaniam, P. M. Lei, G. H. Bernstein., IEEE Electron Device Lett. **17**, 69,(1996).
- [7] J.R. Meyer, L.J. Olafsen, E.H. Aifer, W.W. Bewley, C.L. Felix, I. Vurgaftman, M.J. Yang, L. Goldberg, D. Zhang, C.-H. Lin, S.S. Pei, and D.H. Chow, IEE Proc.: Optoelectron. **145**, 275 (1998).
- [8] C. Alibert, A. Joullie, A. M. Joullie, and C. Ance, Phys. Rev. **B 27**, 4946,(1983).
- [9] S. Zollner, C. Lin, E. Schönherr, A. Böhringer and M. Cardona, J. Appl. Phys. **66**, 383,(1989).
- [10] P. S. Dutta, H. L. Bhat et V. Kumar : The physics and technology of gallium antimonide : An emerging optoelectronic material. Journal of Applied Physics, **81** (9):5821–5870,(1997). xiii, 23, 24, 25, 134, 182, 183.
- [11] A.G. Davies, E.H. Linfield, and M.B. Johnston, ' The development of THz sources And their applications ', Physics in Medicine and Biology ,**47**,p.3679,(2002).
- [12] J. Chelikowsky and M. L. Cohen Phys. Rev. **B14** 552,(1976).
- [13] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler and H. Statz, Proprieties of the thirty-two points groups, Massachussets Institute of Technology (1969).
- [14] P. J. L. Hervé, L.K.J. Vendamme, Infrared Phys. Technol. **35**, 609,(1994).

Chapitre I



Méthode du pseudopotentiel

Chapitre I

Méthode du pseudopotentiel

I-1 Introduction:

En 1934, Fermi a introduit pour la première fois le pseudo potentiel pour l'étude des niveaux atomiques des couches minces [1]. Dans les années qui succédèrent Hellman [2] proposa une approche du pseudo potentiel qui a été utilisé dans la détermination des niveaux énergétiques dans les métaux alcalins. Depuis, plusieurs autres suggestions ont vu l'apparition dans la littérature des états solides, et la théorie de la matière condensée continua à s'évaluer rapidement à partir de la fin des années cinquante et jusqu'à nos jours [3]. La méthode du pseudo potentiel [4,5] est une extension de la méthode O.P.W ou Philips Kleinman [6,7] a démontré, avec son théorème d'annulation, que les électrons de valence présentent expérimentalement un potentiel répulsif lorsqu'ils sont proches du cœur ionique. Ce potentiel répulsif agit pour retenir les électrons de valence en dehors du cœur, où en d'autres termes, les fonctions d'ondes des électrons sont contraintes à être orthogonalité aux états du cœur. Une fois le potentiel répulsif sommé avec le potentiel attractif des électrons du cœur, ceci engendre un potentiel très faible, c'est le pseudo potentiel. Ce pseudo potentiel peut être traité en utilisant la théorie des électrons presque libres N.F.E.M [8], [9] ou d'autre technique pour résoudre l'équation de Schrödinger.

I.2. Théorie du pseudopotentiel:

Il est bien connu que la plupart des propriétés physiques des solides dépendent des électrons de valence beaucoup plus que ceux du cœur, car les premiers sont les seuls à intervenir dans l'établissement des liaisons chimiques. Les fonctions d'ondes de valence oscillent rapidement dans la région occupée par les électrons du cœur et ceci est dû au potentiel ionique fort dans cette région. Ces oscillations permettent de conserver l'orthogonalité entre les fonctions d'onde du cœur et celles de valence, "condition oblige" du principe d'exclusion.

L'idée fondamentale du "pseudopotentiel" est de remplacer un problème par un autre.

L'application primordiale dans la structure électronique, consiste à remplacer le potentiel fort de Coulomb, provenant des noyaux et des effets des électrons du cœur étroitement liés, par un potentiel ionique effectif agissant sur un ensemble de pseudo-fonctions d'onde. Plutôt que sur les vraies fonctions d'onde de valence. La plupart des pseudopotentiel sont construits à partir de calculs sur l'atome isolé impliquant tous les électrons, et ensuite utilisés pour déterminer les propriétés des électrons de valence dans le cas des molécules ou des solides [10].

I.2.a Du potentiel au pseudopotentiel:

Le pseudopotentiel est idéalement construit, c'est -à- dire que les propriétés de diffusion ou les déphasages pour la pseudo fonction d'onde sont identiques aux propriétés de diffusion de

l'ion et des électrons du cœur pour les fonctions d'onde de valence. Ceci de façon à ce que les pseudo fonctions d'onde n'aient pas de nœuds radiaux dans la région du cœur. Pour chaque nœud que les électrons du cœur sera plus grand de π que celui produit par l'ion et les électrons de valence dans la même région. A l'extérieur de la région du cœur, les deux potentiels sont identiques[10].

I.2.b. Qu'est-ce qu'un pseudopotentiel?

Dans les molécules et les composées solides, les électrons de valence sont les seuls à intervenir dans liaisons chimiques, les électrons du cœur, qui sont sur les couches les plus internes, proches du noyau, sont très peu sensible à l'environnement, en outre elles sont difficiles à représenter sur une base d'onde plane car elles possèdent généralement de fortes oscillations autour du noyau. On peut donc regrouper les électrons du cœur avec les noyaux, pour former des ions rigides, dont les états électroniques resteront inchangés quel que soit l'environnement dans lequel l'atome sera placé; **c'est l'approximation du cœur gelé** [11].

On peut aller plus loin en remplaçant l'interaction des électrons de valence avec l'ensemble (noyaux, et électrons de cœur) par un potentiel effectif, beaucoup moins attractif que le potentiel créé par le noyau avec tous les électrons, c'est ce potentiel effectif qu'on appelle un pseudopotentiel.

I.2.c. Construction des pseudopotentiels:

Le pseudopotentiel doit vérifier un certain nombre de propriétés:

- ❖ Il doit être additif, c'est à dire il doit être la somme des pseudo potentiels lorsque plusieurs atomes sont en présence.
- ❖ Il doit être transférable c'est à dire qu'on doit pouvoir utiliser le même Pseudopotentiels dans des environnements chimiques différents.
- ❖ Il induit des variations de potentiel plus faibles que dans le cas du potentiel de cœur réel par la réduction du nombre d'onde planes nécessaires à la description des fonctions d'onde.

Les méthodes de construction des pseudopotentiels sont divisées en deux catégories selon la base utilisée pour développer les pseudo-fonctions. La méthode de conservation de la norme et la méthode de la non-conservation de la norme [12].

I.3. La méthode du pseudopotentiel:

Un pseudopotentiel est un potentiel analytique dans lequel sont baignés les électrons de l'atome non inclus dans le cœur. Son rôle est de simuler le vrai potentiel engendré par le noyau et les électrons de cœur afin de n'avoir à traiter explicitement que les électrons de valence de l'atome.

La décomposition en ondes planes orthogonalisées (OPW) est une méthode éprouvée qui est associée à l'utilisation de pseudopotentiel pour représenter l'interaction entre les électrons de valence et les noyaux atomiques écrantés par les électrons de cœur.

Le formalisme de cette théorie a été introduit par Philips et Kleiman en 1959 [13, 14], puis par Bassini et Celli en 1966 et fut par la suite développé par des autres chercheurs [13]. Ce formalisme s'appuie sur un concept qui stipule que les états cristallins des bandes de conduction et de valence doivent être orthogonaux aux états du cœur. Cette idée a constitué le principe de base de l'OPW [13,15]. Grâce à cette théorie beaucoup de problèmes ont été résolus, ainsi elle a permis de prédire les caractéristiques essentielles de la structure quantique des solides bien avant que ces caractéristiques ne soient déterminées expérimentalement. Le principe de cette méthode de calcul considère seulement les électrons de valences. Les électrons de cœur sont supposés être « gèles » dans une configuration atomique et les électrons de valence circulent sous un faible potentiel [13]. C'est-à-dire, le pseudo-potentiel permet d'une part de limiter le nombre d'électrons de chaque type d'atome qui seront pris en compte explicitement pour construire le gaz des particules fictives et d'autre part de réduire la taille des bases d'ondes planes nécessaires à la représentation de ces états fictifs.

I.4. Le formalisme mathématique:

La fonction d'onde ψ est donnée par la somme d'ondes planes Φ et des états atomiques occupés du cœur Φ_c [16].

$$\psi = \Phi + \sum_c b_c \Phi_c \quad (\text{I-1})$$

La fonction d'onde ψ doit être orthogonale aux états du cœur Φ_c :

$$\langle \Phi_c | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{I-2})$$

Ce qui nous donne:

$$\Psi = \Phi - \sum_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle \Phi_c \quad (\text{I-3})$$

Avec:

Ψ :est la fonction d'onde, elle satisfait l'équation de Schrödinger.

$$H \Psi = E \Psi \quad (\text{I-4})$$

En remplaçant la fonction d'onde par son expression dans l'équation de Schrödinger on obtient:

$$H \Phi + \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle = E \Phi \quad (\text{I-5})$$

Philips et Kleinman ont noté que l'orthogonalisation des ondes planes aux états du cœur est formellement équivalente à l'introduction d'un terme répulsive V_R , donc on peut réécrire l'équation (I-5) d'une façon condensée comme suit [17, 18]:

$$H \Phi + \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle = (H + V_R) \Phi = E \Phi \quad (\text{I-6})$$

V_R représente le potentiel répulsif défini comme suit:

$$V_R \Phi = \sum_C (E - E_C) \Phi_C \langle \Phi_C | \Phi \rangle \quad (I-7)$$

valeur propre de l'énergie E n'est pas un pseudo énergie mais la vraie énergie somme du potentiel cristallin et le potentiel V_R :

$$H + V_R = T + V_C + V_R = T + V_P \quad (I-8)$$

Où:

$V_P = V_C + V_R$ est le pseudo potentiel, le pseudo équation de Schrödinger est donné par:

$$(H + V_R) \Phi = E \Phi \quad (I-9)$$

Le potentiel V_R s'oppose au potentiel attractif cristallin V_C . Il est important de noter que V_R est très faible ce qui justifie l'utilisation de la méthode N.F.E.M pour résoudre l'équation de Schrödinger [19]. L'équation (I-9) devient:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_C + V_R \right) \Phi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \right) \Phi \quad (I-10)$$

V_P devient faiblement attractif dans la région du cœur et faiblement répulsif dans la région des électrons de valence.

Le pseudopotentiel est considéré comme une perturbation, V_C est négatif (Potentiel attractif près du cœur), les éléments de matrice du pseudopotentiel V_R sont donnés par:

$$\Psi V_R \Psi = \sum_C (E_V - E_C) \left| \int d\mathbf{r} \Psi_C^* \Psi \right|^2 \quad (I-11)$$

Étant donné que E_V est légèrement supérieur à E_C , donc V_R est toujours positif ainsi V_P 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 pseudo potentiel devient local et dépend explicitement de la position r , il peut être écrit comme suit [20]:

$$V_R = V(r, r') = \sum_C (E - E_C) |\Phi(r)\rangle \langle \Phi_C(r) | \Phi \rangle \quad (I-12)$$

Où la fonction Φ dépend de r .

Si on tient compte de l'effet du cœur, le pseudo potentiel devient non local. L'expression non locale du pseudo potentiel est réservée pour le moment angulaire, puisque V_R est la somme sur les états « c » occupés du cœur [21].

I.5. Les modèles du pseudopotentiel:

L'approche de Philips et Kleinman [14, 22] n'a pas une large application comme méthode de calcul pour obtenir la structure de bande d'un cristal malgré le fait que le pseudopotentiel V_p dépend fondamentalement des composantes du moment angulaire présents dans les états du cœur, donc pour résoudre un certain nombre de problèmes, on utilise des modèles et des potentiels empiriques [17].

Il est important de réaliser que supposant que l'interaction d'échange des électrons ne sont pas explicitement traités ce qui justifie et permettent d'ignorer les non-localités du pseudopotentiel et de le supposer comme fonction simple de la position. C'est le pseudopotentiel local [23].

I.5.1. Le modèle local:

Le pseudo Hamiltonien pour un électron dans un cristal est donné par:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad (I-13)$$

Selon le potentiel $V(r)$ on peut distinguer plusieurs modèles, le modèle le plus simple consiste en un potentiel de coulomb à une distance large et un potentiel constant dans la région du cœur ; le potentiel $V(r)$ est donné par la relation:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ -\frac{Ze}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad (I-14)$$

Avec: Z : le nombre d'électrons.

r_c : le rayon du cœur, il sert à ajuster les données atomiques..

I.5.1.1. Modèle de Heine et Abarenkov [8] :

Heine et Abarenkov ont introduit un potentiel A considéré comme constant dans la région du cœur dans ce cas le potentiel est:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (I-15)$$

I.5.1.2. Modèle d'Ashcroft:[5, 24]

Enfin Ashcroft proposa une autre forme de potentiel similaire est qui est beaucoup utilisée, c'est le potentiel des cœurs inoccupés « the empty core potential » donnée par:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-16})$$

Les énergies des semiconducteurs sont généralement, des données expérimentales prises des spectres optiques, diffraction des rayons X, réflexion...

Et pour ce fait le potentiel V_p utilisé pour le calcul des énergies s'écrit sous la forme d'un développement en série de Fourier où les constantes $V(G)$ sont des paramètres expérimentaux.

I.5.2. Le modèle non local:

Cette approche apparaît en 1976 pour apporter une correction de la dépendance énergétique du potentiel répulsif [25].

Le pseudo potentiel est à l'origine non local, il dépend de r et de l'énergie E , ce non localité traduit la différence d'énergie existant entre les électrons du cœur et celles de valence. Elle est calculée pour chaque moment angulaire. Une correction non locale qui simulerait les effets répulsifs à l'intérieur du cœur doit être apportée au potentiel local. Le pseudo potentiel non local est donné par [26].

$$V_p = V_{NL} = \sum_I A_I(E) f_I(r) P_I \quad (\text{I-17})$$

Où:

$A_I(E)$: est appelée énergie des états profonds, c'est la constante de la dépendance du potentiel en énergie des états du cœur.

P_I : est l'opérateur de projection de la $l^{\text{ème}}$ composante des moments angulaires.

$f_I(r)$ est la fonction qui représente l'effet de l'état du cœur, elle a plusieurs formes telle que la forme Gaussienne [27, 28] carré, et la forme d'Ashcroft [1, 27].

I.5.2.a. Modèle de Heine Abarenkov:(Figure I-1)

La forme carrée de la fonction de Heine et Abarenkov [29] est très utilisée vue sa simplicité:

$$f_I(r) = \begin{cases} 1 & r \leq r_c \\ 0 & r > r_c \end{cases} \quad (\text{I-18})$$

r_c :le rayon du cœur ionique.

I.5.2.b. Modèle de Gauss:(Figure I-2)

Les résultats de ce modèle sont les plus réalistes, et qui s'accordent avec les résultats empiriques. Et La fonction de Gauss est donnée par [5]:

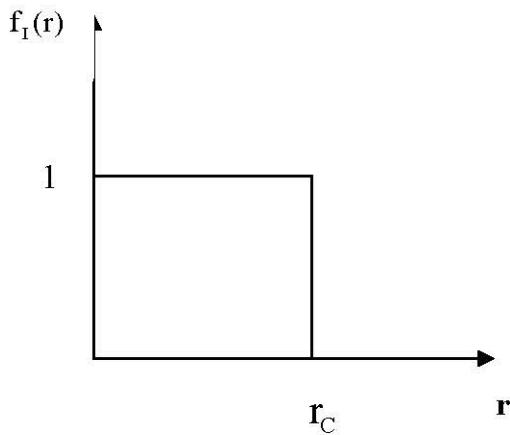
$$f_I(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{r_c^2}\right) \tag{I-19}$$

I.5.2.c. Le modèle d'Ashcroft [27, 28]:(Figure I-3)

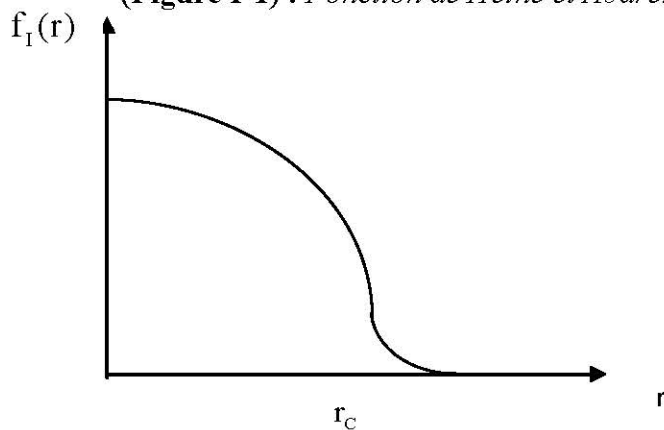
La fonction d'Ashcroft est:

$$f_I(r) = 0 \tag{I-20}$$

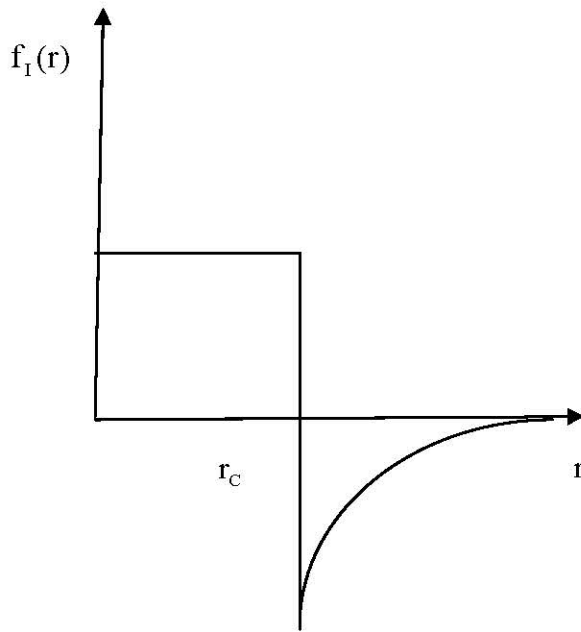
Pour choisir une forme de $f_I(r)$ on emploie la forme carrée à cause de sa simplicité,



(Figure I-1) : Fonction de Heine et Abarenkov



(Figure I-2) : Fonction de Gauss



(Figure I-3) : Fonction d'Ashcrof

I.6. La méthode empirique du pseudopotentiel (EPM):

C'est une autre image de la méthode du pseudo potentiel, elle a été appliquée avec succès aux semi-conducteurs de structure diamant et de structure zinc blende [28]. L'idée générale de cette approche consiste à remplacer le potentiel réel du solide par un autre dont l'utilisation permet une très bonne description du système, et en même temps, réduit considérablement le coût de calculs [30]. L'E.P.M résout le problème des facteurs d'ajustement de forme expérimentaux $V(\vec{G})$ que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux, du pseudopotentiel $V_p(r)$ p qui représente la superposition linéaire des potentiels atomiques [31].

$$V_p(\vec{r}) = \sum_{R,\tau} V_a(\vec{r} - \vec{R} - \vec{\tau}) \tag{I-21}$$

Où:

R : est un vecteur du réseau direct.

τ : est le vecteur de translation du réseau direct.

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

$$V_p(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} S(\vec{G}) V_a(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \tag{I-22}$$

$V_a(\vec{G})$: est le facteur de forme, $S(G)$ est le facteur de structure donné par:

$$S(\vec{G}) = \frac{1}{N_a} \sum_{\vec{r}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} \quad (\text{I-23})$$

N_a : étant le nombre d'atomes de base.

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

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_p(\vec{r}) \right] \Psi_{n,k}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \Psi_{n,k}(\vec{r}) \quad (\text{I-24})$$

Où:

n : représente l'indice de la bande.

Les fonctions $\Psi_{n,k}(\vec{r})$ ont la forme d'une fonction de Bloch et peuvent être développées en une série d'ondes planes [21].

I.7. La Méthode de calcul du (E.P.M):

Sur la figure (I-4) on présente le diagramme logique de cette méthode résumant ainsi les différentes étapes de calcul [28].

1. Premièrement; on commence par choisir les facteurs de forme $V(\vec{G})$.
2. On fait la substitution dans la relation du potentiel qui contenant les facteurs des structures, donc on peut résoudre l'équation de Schrödinger est trouvé les énergies propres $E(\vec{k})$ et les fonctions d'onde propres $\Psi_{n,k}(\vec{r})$.
3. Finalement; on fait la comparaison entre nos résultats avec l'expérience, si on trouve des résultats on accord avec l'expérience on arrête si non on change les facteurs de forme $V(\vec{G})$ jusqu'à trouver des résultats on accord avec l'expérience [32].

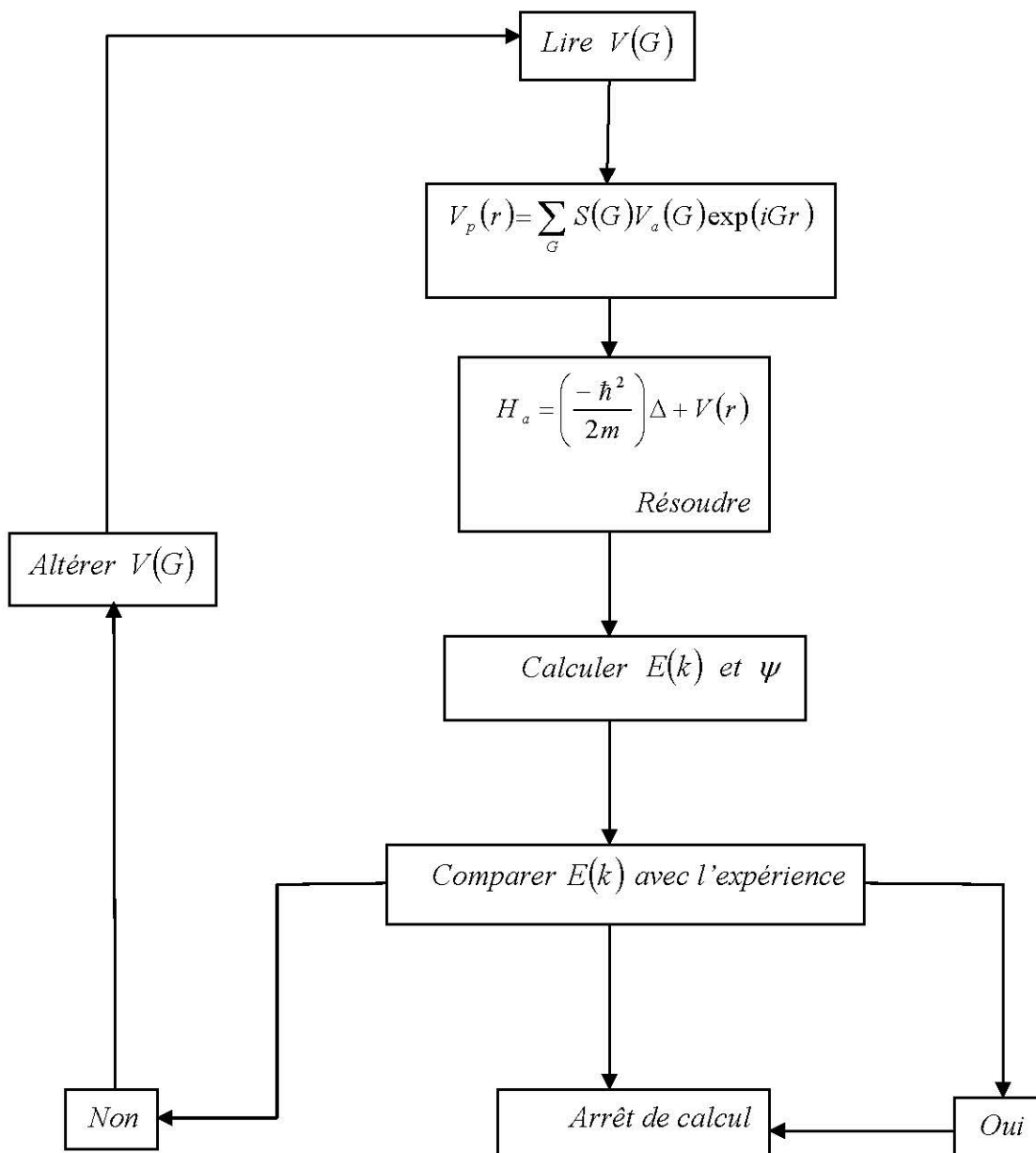


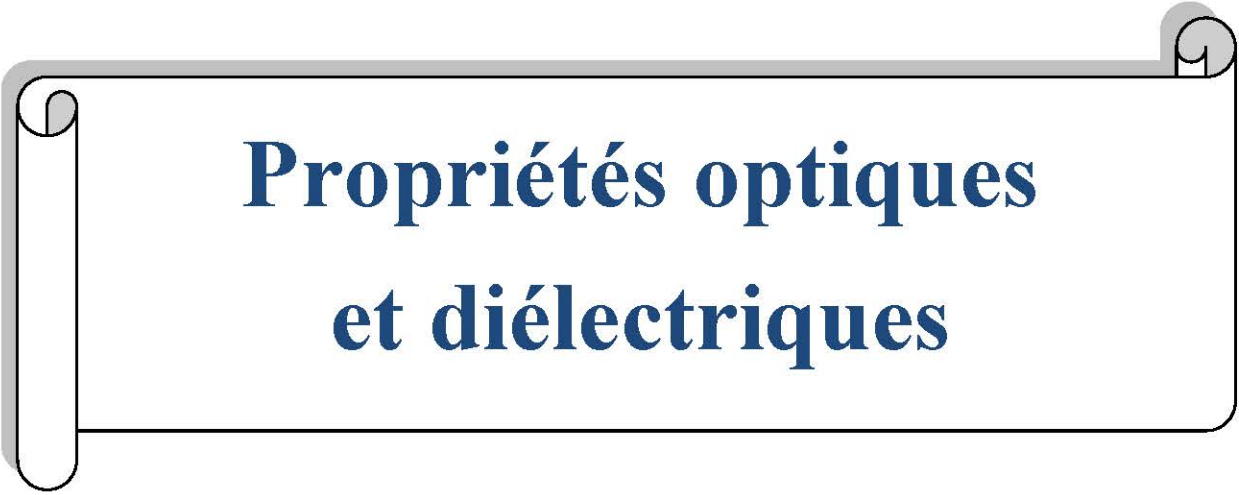
Figure (I-4): L'organigramme de la méthode EPM

Références

- [1] S. Laoui, Mémoire de magister, Université de Stif (Algeria), (1996).
- [2] H. Hellmann, W. Kassatotschkin, Acta., Physico, Chim.,**5**, 23,(1936).
- [3] M. L.Cohen, J. R. Chelikowsky, Electronic structure and optical proprieties of semi- conducteur Spring-Verlag, Berlin, (1989).
- [4] J.R Chelikowsky and M. L Cohen, Phys. Rev.**B**,**14**, 552,(1976).
- [5] I. V. Abarenkov and V. Heine, Phil. Mag,**13**, 529,(1965).
- [6] B. J. Austin, V. Heine and L. I. Shen, Phy., Rev.**B**,**127**, 2765,(1998).
- [7] J. C. Phillips. Phy., Rev.**B**, **112**, 685,(1958).
F. Bassani and V. Celli, J. Phys. Chem
- [8] M. L. Cohen and V. Heine, Solid State Physics 24, Eds, H. Enrenreich, F. Seitz and D. Turnbull, Academic press, New-York, (1970).
- [9] V. Heine, The Physics of metals, Cambridge, Univ., Press., London and New-York, (1968).
- [10] K.Fatima, Thèse de doctorat, université de Metz, (France) (2007).
- [11] U.Von Barth, C.D. Gellat, phys. Rev.**B** **12**, 2222,(1980).
- [12] D.J.Shadi M. L, Cohn. J. Phys. Rev. **B**. **8**, 5747,(1973).
- [13] H. I. Berrezoug, Thèse de Doctorat, Université de Tlemcen, Algérie (2010).
- [14] J. C. Philips, K. J. Kleinman, Phys. Rev. **116** ,287,(1959).
- [15] G. Herring, Phys. Rev. **57** ,1169,(1940).
- [16] H. Mzenasni, Mémoire de magister, Université de Tlemcen, Algerie (2008).
- [17] F. D. Murnaghan, Proc. Natl.Acad.Sci.USA.**30** ,244,(1944).
- [18] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot, D.Wolf, Phys. Rev. **B**,**52** ,12627,(1995).
- [19] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med.Sci. 2, Université Tokoku 7,(1993).
- [20] A. Kan Garlu, Phys.Rev. **B** **38** ,9790,(1988).
- [21] G. Böhan, K. Unger, Phys. Stat .Sol. B **216** ,961,(1999).
- [22] J. C. Phillips. Phy., **Rev.B**, **112**, 68 , (1958);
F. Bassani and V. Celli, J. Phys. Chem. Solid, **20**, 64, (1961).
M. L. Cohen and V. Heine, Phy, Rev.**B**,**122**, 1821; (1961).
B. I. Austin, V. Heine and L. I. Shen, Phy, Rev.**B**, **127**, 276 ,(1962).
- [23] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot, D. Wolf, Phys. Rev.**B**, **52**, 12627, (1995).
- [24] W. A. Harisson, Pseudopotentiels in theory of metals, Benjamin, New York, (1966).
- [25] N. W. Aschroft, Phys. Rev. Lett, **23**, 48, (1966).
- [26] M. Kimura, Z. Qin, S. Dost, H. Udono, A. Tanaka, T. Sukegawa, Appl. Surf. Sci. **113** ,567,(1997).

- [27] C. S.Wang, B. M. Klein, Phys. Rev. **B24** ,3417,(1981).
- [28] F. Ben Salem, Mémoire de Magister, Université de M'Sila, Algérie ,(2004).
- [29] H. Nara and T. Kobayasi, J. Phys. Soc. 41 Japan ,1429, (1976).
- [30] H. Aourag, Thèse de Doctorat, Université d'Oran, Algérie ,(1990).
- [31] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. **B 14** ,556,(1976).
- [32] S. Yousfi, Mémoire de Magister, Université de M'Sila, Algérie ,(2004).

Chapitre II



Propriétés optiques et diélectriques

Chapitre II

Les propriétés optiques et diélectriques

II.1.Introduction:

Comme nous l'avons vu, pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux, nous devons tenir compte des différents rôles joués par l'électron dans la structure des solides.

Dans ce chapitre, nous verrons que notre connaissance du comportement des électrons va jusqu'à nous expliquer la réflexion de la lumière par certains solides, alors que quelques-uns l'absorbent et que d'autres sont transparents. Elle nous apporte aussi l'explication pour certains solides de pouvoir sous certaines conditions, émettre de la lumière [1]. Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [2]. Les alliages ternaires semi-conducteurs III-V sont considérés comme une classe des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leurs paramètres physiques ; l'étude de leurs propriétés optiques, diélectriques et leur variation en fonction de la concentration en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel [3].

II.2.Interaction rayonnement-matière:**II.2.1.Les propriétés optiques:**

L'objectif de ce travail là est l'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) Cette étude a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [3].

II.2.2.Photons et électrons:**a-Photon :**

A la fin du dernier siècle, l'Anglais Maxwell a réussi à unifier l'ensemble de l'électricité, de la radioélectricité, du magnétisme et de l'optique sous la forme de quatre équations différentielles seulement. Ces équations sont rappelées ci dessous [4-5].

$$\text{rot } \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (\text{II-1-a})$$

$$\text{rot } \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (\text{II-1-b})$$

$$\text{div } \vec{E} = 0 \quad (\text{II-1-c})$$

$$\text{div } \vec{H} = 0 \quad (\text{II-1-d})$$

Où $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ est le constant diélectrique du milieu.

Les champs électriques et magnétiques vibrent perpendiculairement l'un par rapport à l'autre et à la direction de propagation. La similarité de leurs comportements permet de ramener la représentation du rayonnement à la seule expression du champ électrique qui s'écrit:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (\text{II-2})$$

Avec $\omega = 2\pi \nu$ est la pulsation.

\vec{E}_0 : représente l'amplitude et polarisation.

\vec{k} : le vecteur d'onde.

L'expression (II-2) est la solution des équations (II-1) [4,6,7].

En portant cette expression dans les équations on obtient facilement la relation :

$$\omega = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r}} k = \frac{c}{n} k = V k \quad (\text{II-3})$$

n : L'indice de réfraction

V : La vitesse de propagation de l'onde dans le vide et dans un milieu de constant diélectrique relatif ϵ_r alors $n = \sqrt{\epsilon_r}$

L'expression (II-2) peut s'écrire sous la forme suivante:

$$E = E_0 e^{i2\pi\left(\frac{t}{T} - \frac{r}{\lambda}\right)} \quad (\text{II-4})$$

T : La période de l'onde représente la périodicité dans le temps.

λ : La longueur d'onde représente la périodicité dans l'espace.

Le terme $(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})$ est la phase de l'onde, le groupe ou l'ensemble des points de l'espace correspondant à une même phase constitue une surface d'onde.

Les surfaces d'onde se déplacent avec la vitesse $V = \frac{\omega}{k}$ que l'on appelle vitesse de phase.

L'onde réelle est constituée de paquets d'ondes qui se propagent avec une vitesse $V_g = \frac{d\omega}{dk}$ que l'on appelle vitesse de groupe.

La représentation ondulatoire du rayonnement que nous venons de rappeler est bien adaptée l'étude des interactions rayonnement-rayonnement.

Dans le cas des interactions rayonnement - matière, et plus particulièrement lorsqu'il y a échange d'énergie, comme c'est le cas dans les composants optoélectroniques, la représentation corpusculaire du rayonnement est mieux adaptée. Einstein a suggéré que l'énergie du rayonnement n'était pas étalée dans tout l'espace mais concentrée dans certaines régions se propageant comme des particules qu'il a appelées des photons. L'énergie du photon est donnée par [3,7]:

$$E = h\nu = \hbar\omega \tag{II-5}$$

Où:

h : est le constant de Planck et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

La relation de dispersion du photon, qui relie l'énergie au vecteur d'onde, s'écrit [8] :

$$E = \frac{\hbar c}{\sqrt{\epsilon_r}} k \tag{II-6}$$

Le semi-conducteur est quant à lui communément caractérisé par son gap mesuré en électronvolt.

Dans l'étude des composants optoélectroniques, qui mettent en jeu l'interaction rayonnement-semi-conducteur, il est utile d'avoir en permanence à l'esprit la relation énergie longueur d'onde, pour traduire en (eV) la caractéristique d'un rayonnement définie en (μm)

$$E = \frac{h}{T} = \frac{hc}{\lambda} \tag{II-7}$$

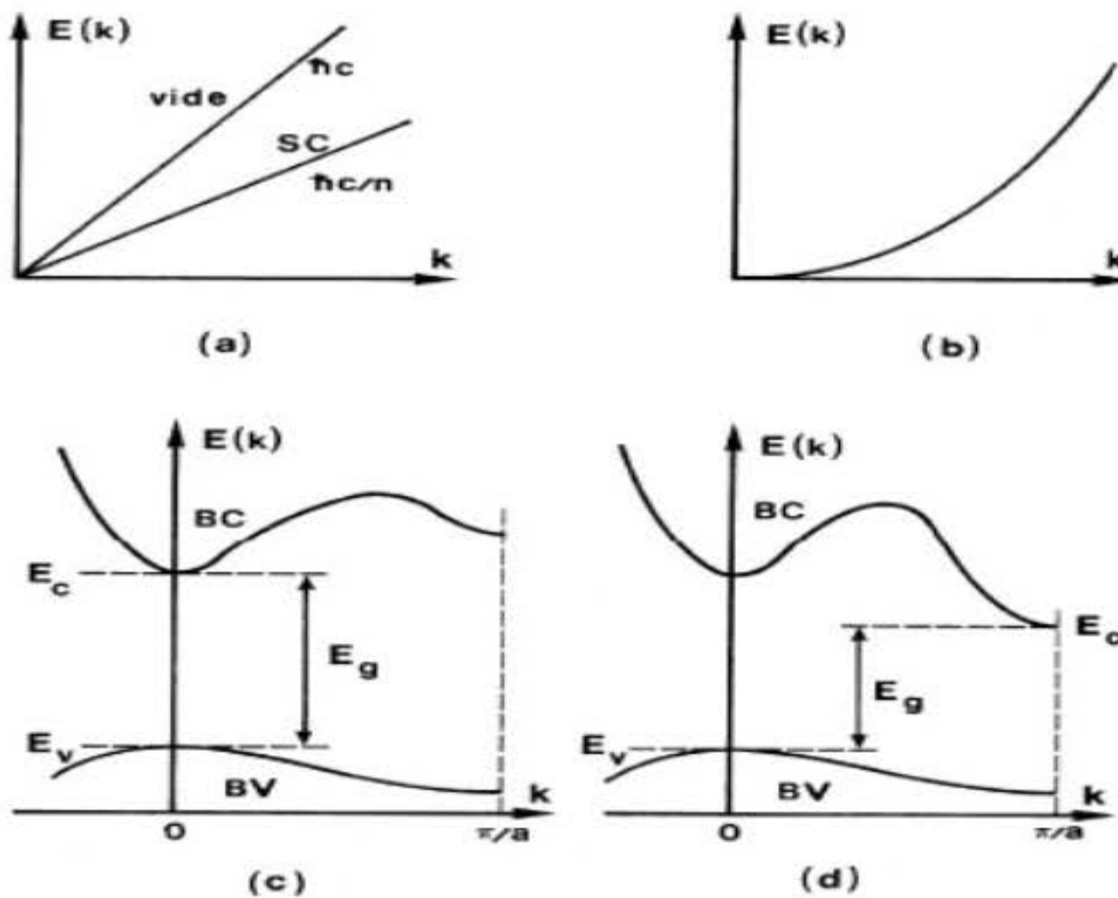


Figure II -1 : Courbes de dispersion. a) Photons dans le vide et dans le semi-conducteur. b) Electrons dans le vide. c) Electrons dans un semi-conducteur à gap direct. d) Electrons dans un semi-conducteur à gap indirect [9].

Les courbes de dispersion d'un semi-conducteur à gap direct et d'un semi-conducteur à gap indirect sont schématisées sur la figure II-1.

Il faut noter que lorsque le semi-conducteur est indirect, le minimum de la bande de conduction est situé en bord de zone de Brillouin (ou à son voisinage dans le cas du silicium), c'est-à-dire Pour $k \approx \frac{\pi}{a}$ où a représente la maille du réseau cristallin.

b-électron :

Un électron libre dans le vide, sa quantité de mouvement et son énergie cinétique sont données par:

$$\vec{P} = m \vec{V} \quad (\text{II-8})$$

$$E = \frac{1}{2} m V^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{II-9})$$

De même qu'Einstein a proposé qu'à une onde plane de fréquence ν et de longueur d'onde λ

On devait associer une particule, le photon d'énergie $E = h\nu$ de quantité de mouvement $p = \frac{h}{\lambda}$, Louis de Broglie a proposé, en 1924 qu'à une particule matérielle d'énergie E et de quantité de mouvement p , on devait associer une onde de fréquence $\nu = \frac{E}{h}$ de longueur d'onde

$\lambda = \frac{h}{p}$. Ainsi la quantité de mouvement de la particule et le vecteur d'onde de l'onde qui lui est

associée sont liés par la relation :

$$P = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (\text{II-10})$$

Où, en représentation vectoriel:

$$\vec{P} = \hbar \vec{k} \quad (\text{II-11})$$

Il en résulte, compte tenu des relations (II-7-8), que la dispersion de l'électron libre s'écrit [10,11]:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{II-12})$$

II.3. La réflexion des ondes planes:

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constantes diélectriques différents, elle sera divisée en deux, une onde réfléchie et une onde réfractée, leurs amplitudes seront déterminées par les conditions aux limites qu'exigent que la composante tangentielle du champ \vec{E} doit être la même dans les deux milieux ainsi que la composante tangentielle du champ \vec{H}

Pour une onde électromagnétique d'angle incidente Φ se propage du vide sur les limites du milieu d'indice de réfraction complexe N donné par:

$$N = n + ik \quad (\text{II-13})$$

Où:

n : étant l'indice de réfraction réelle.

k : est l'indice d'atténuation appelé aussi coefficient d'extinction.

Les conditions aux limites mènent à la formule de Fresnel [12]:

$$r_n = \frac{\cos \Phi - (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}}{\cos \Phi + (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}} \quad (\text{II-14})$$

$$r_p = \frac{N^2 \cos \Phi - (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}}{N^2 \cos \Phi + (N^2 - \sin^2 \Phi)^{1/2}} \quad (\text{II-15})$$

Les quantités r_n et r_p sont les amplitudes des coefficients de réflexion pour les composantes normale et parallèle de l'onde incidente, respectivement, définissent par:

$$E_{r_n} = r_n E_n \quad (\text{II-16})$$

$$E_{r_p} = r_p E_n \quad (\text{II-17})$$

Les intensités des coefficients de réflexion r_n et r_p sont souvent appelés coefficients de réflexion déterminés par le rapport entre l'onde incidente et celle réfléchi alors [12]:

$$\begin{aligned} R_n &= |r_n|^2 \\ R_p &= |r_p|^2 \end{aligned} \quad (\text{II-18})$$

Pour une incidence normale ($\Phi=0$), les équations (II-14) et (II-15) mènent au résultat suivant [6,2]:

$$R_n = R_p = R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{II-19})$$

Pour $k=0$, n est réel; le coefficient de réflexion devient:

$$R = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} = \left(\frac{\sqrt{\epsilon_r} - 1}{\sqrt{\epsilon_r} + 1} \right)^2 \quad (\text{II-20})$$

La mesure de la réflexion de la lumière fournit l'information la plus complète sur les systèmes électroniques [10].

Pour tous les semi-conducteurs, R varie entre 0.25 et 0.35, ainsi dans les meilleurs conditions c'est à dire en incidence normale, 30% du rayonnement est réfléchi par le semi-conducteur [7].

II.4. Interaction électron- photon (Transition radiative):

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

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

➤ Un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec l'émission d'un photon, c'est l'émission spontanée. Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs des rayonnements tels que les diodes électroluminescentes.

➤ Un photon présent dans le semi-conducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence avec l'émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semi-conducteurs [4,6].

Ces différents processus sont conditionnés par les règles de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement $\vec{P} = \hbar \vec{k}$

Si on repère par les indices i et f , les états: initial et final de l'électron, et par p l'état du photon, les règles de conservation s'écrivent:

$$E_f - E_i = \pm E_p \quad (\text{II- 21})$$

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \pm \vec{k}_p \quad (\text{II-22})$$

Où le signe (+) correspond à l'absorption et le signe (-) à l'émission.

Notant en outre que si le rayonnement est communément caractérisé par sa longueur d'onde dans le vide mesurée en (μm), le semi-conducteur est quant à lui communément caractériser par son gap d'énergie mesuré en (eV).

Dans l'étude des composants optoélectroniques, il est utile d'avoir en permanence à l'esprit, la relation énergie (-) longueur d'onde, pour traduire en (eV) la caractéristique d'un rayonnement définie en (μ) [3,6,7,13].

$$E = h \nu = \frac{h}{T} = \frac{h c}{\lambda} \quad (\text{II-23})$$

Soit:

$$E(\text{eV}) = \frac{1.24}{\lambda(\mu)} \quad (\text{II-24})$$

II.5. Transition directe et indirecte:

II.5.a. Semi-conducteur à gap direct:

Un semi-conducteur à gap direct a la particularité d'avoir le minimum de sa bande de conduction aligné dans l'espace réciproque (k) avec le maximum de sa bande de valence. Cette propriété permet l'émission d'un photon dont l'énergie est proche de celle du gap sans faire intervenir un phonon du réseau cristallin. L'énergie d'émission est égale à l'énergie du gap diminuée de l'énergie de liaison de l'exciton (3) (voir figure II.2). Ceci est vrai si le matériau ne possède pas de défauts engendrant des états localisés (4) (voir figure II.2) dans la bande interdite. Dans le cas contraire, le spectre de photoluminescence présente des pics à des énergies inférieures au gap du matériau. Enfin certains défauts provoquent une désexcitation sans émission de photon comme par exemple l'effet Auger [14].

II.5.b. Semi-conducteur à gap indirect:

Cette fois ci, la bande de conduction n'étant plus alignée avec la bande de valence, pour qu'un électron puisse traverser la bande interdite, il faut qu'un phonon du réseau cristallin interagisse avec lui. La probabilité de formation d'un phonon étant très défavorable, l'émission de photon se voit fortement diminuée par rapport au semi-conducteur à gap direct. (Photo direct)

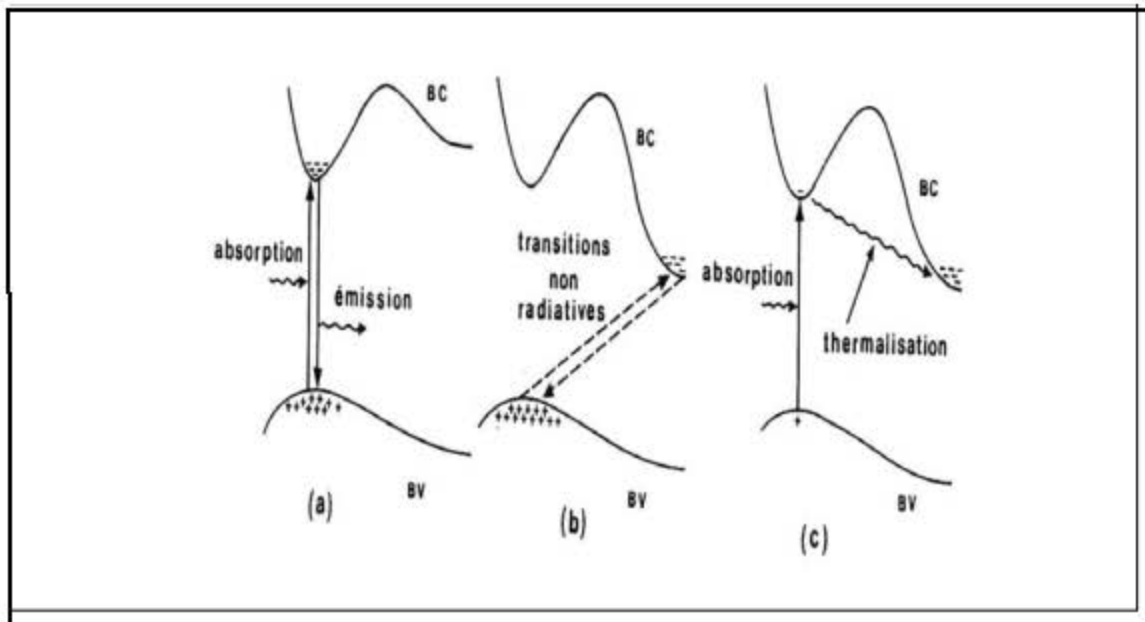


Figure II-2: Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction a) semi-conducteur à gap direct, b) semi-conducteur à gap indirect, c) absorption direct des photons dans un semi-conducteur à gap indirect [3,7].

Dans ce cas un phonon est absorbé par le réseau, création d'une paire électron- trou, et à cause de l'interaction photon - réseau, un phonon est souvent généré; la longueur d'onde λ est donnée par:

$$h\nu = E_g + h\nu_{ph} \quad (\text{II-25})$$

$$\lambda = \frac{hc}{E_g + h\nu_{ph}} = \frac{1.237}{(E_g + 4.14 * 10^{-15} \nu_{ph})} \quad (\text{II-26})$$

Si:

E_g est exprimé en (eV),

ν_{ph} en(Hz)

et λ en (μm).

Dans l'équation (II-25):

$h\nu_{ph}$: énergie du phonon.

ν_{ph} : fréquence du phonon.

L'énergie du phonon est typiquement estimée :

$$h\nu_{ph} \approx 0.01 \text{ à } 0.03 \text{ eV} \ll E_g$$

Cependant dans la plupart des cas, l'absorption dans les processus direct et indirect est identique [4, 6,7].

II.6. Propriétés diélectriques :

II.6.1. Relation de dispersion :

La réponse d'un cristal à un champ électrique appliqué \vec{E} est complètement décrite par la fonction diélectrique complexe $\varepsilon(\omega, \vec{k})$ [17]. Cette fonction a des conséquences importantes sur les propriétés physiques des solides [10].

Les relations de dispersions relient la partie réelle et imaginaire d'une quantité complexe qui décrit une relation linéaire entre deux grandeurs ; les conditions à l'infini et la relation de causalité sont accomplies, ils sont appelés relations de Kramers-Kronig pour le travail original de Kramers-Kronig (1926) sur la dispersion des rayons X.

La constante diélectrique complexe est donnée par [16]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{II-27})$$

Elle relie linéairement le champ électrique $\vec{E}(\omega)$ au déplacement $\vec{D}(\omega)$ par le biais de l'équation suivante :

$$D(\omega) = \varepsilon(\omega) E(\omega) \quad (\text{II-28})$$

Cependant on peut ainsi formuler la relation de dispersion pour $\varepsilon_1(\omega)$ et $\varepsilon_2(\omega)$ [12,2,16] :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{II-29})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega')}{(\omega')^2} d\omega' \quad (\text{II-30})$$

Dans ces équations, la dispersion dans l'espace (variation avec \vec{k}) est négligée, car pour la plupart des phénomènes optiques, la longueur d'onde de la lumière est grande comparée aux dimensions du système. Ces résultats ne sont valables également qu'en l'absence du champ magnétique.

Dans le cas d'un milieu isotrope ou d'un cristal cubique, ε se réduit à un scalaire, la réponse du système à une onde plane électromagnétique peut alors être décrite à l'aide d'un indice de réfraction scalaire complexe [16]:

$$\varepsilon = N^2 = \varepsilon_1 + i \varepsilon_2 \quad (\text{II-31})$$

Où N est une fonction de ω .

$$N(\omega) = n(\omega) + i k(\omega) \quad (\text{II-32})$$

Il est possible d'écrire les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique en fonction de l'indice de réfraction n et l'indice d'atténuation k comme suit:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\omega) &= n^2 - k^2 \\ \varepsilon_2(\omega) &= 2nk \end{aligned} \quad (\text{II-33})$$

Ces simples équations indiquent le sens physique (expérimental) de la fonction diélectrique. Le paramètre physique ε détermine la propagation d'une onde électromagnétique dans un matériau, l'absorption et la réflexion.

Si une onde électromagnétique se propage dans le vide dans la direction x, le champ électrique \vec{E} est donné par:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{(-i\omega t - \frac{i\omega x}{c})} \quad (\text{II-34})$$

Dans un cristal d'indice N, ce champ devient:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{(-i\omega t - i\frac{n\omega x}{c})} \cdot e^{(-\alpha x)} \quad (\text{II-35})$$

Où $\alpha = \frac{\omega k}{c}$ est le coefficient d'absorption.

Ce résultat est bien connu, la partie réelle de N correspond à l'indice de réfraction normal du cristal dans une région de transparence, tandis que la partie imaginaire conduit à une absorption optique du cristal [15].

II.7. Calcul de l'indice de réfraction:

Les constantes diélectriques et l'indice de réfraction sont très importants dans l'étude des propriétés optiques et électriques des cristaux.

Plusieurs approches ont été envisagées pour corréler le gap énergétique des semi-conducteurs à leur indice de réfraction [3].

L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques dans les structures optoélectroniques comme les diodes laser à hétérojonctions, les amplificateurs optiques, les fibres optiques [3,17].

En effet, il existe plusieurs relations empiriques reliant l'indice de réfraction au gap énergétique pour un grand ensemble de semi-conducteurs [18,19].

Cependant, dans ces relations l'indice de réfraction n est indépendant de la température et de l'énergie du photon incident.

Les modèles suivants ont été utilisés:

❖ **La formule de Moss:**

Moss était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction n et le gap d'énergie E_g basé sur le modèle atomique [18]:

$$E_g n^4 = k \quad \text{Donc} \quad n = \sqrt[4]{\frac{k}{E_g}} \quad (\text{II-35})$$

Où E_g : est le gap d'énergie.

k : Une constante égale à 108 (eV).

n : L'indice de réfraction.

❖ **L'expression proposée par Ravindra et ses collaborateurs:**

Ravindra et ses collaborateurs donnent une relation linéaire entre n et E_g donnée par [20] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{II-36})$$

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

❖ **La relation empirique de Herve et Vandamme:**

Herve et Vandamme proposeront un modèle basé sur la théorie des oscillations classiques

Pour $\omega \ll \omega_0$ [19] :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{II-37})$$

Avec $A = 13,6 (\text{eV})$.

$B = 3,4 (\text{eV})$.

ω_0 : La fréquence de résonance ultra violet.

II.8. Calcul de la constante diélectrique:

En haut fréquence la constante diélectrique est donnée par [3] :

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \quad (\text{II-38})$$

n: L'indice de réfraction.

Le modèle de Harisson « bond-orbital model » est utilisé pour investir la dépendance en composition de la constante diélectrique statique ϵ_0 en utilisant la relation qui lie la constante diélectrique statique ϵ_0 à la constante diélectrique en haut fréquence ϵ_{∞} donnée par [19]:

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_{\infty} + 1} = 1 + \mathfrak{G} \quad (\text{II-39})$$

Où \mathfrak{G} : est donnée par [21]:

$$\mathfrak{G} = \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{II-40})$$

α_p : Est la polarité, et déterminée en utilisant la définition de Vogl [22]:

$$\alpha_p = -\frac{V_a(3)}{V_s(3)} \quad (\text{II-41})$$

Où $V_a(3)$: le facteur de forme antisymétrique.

$V_s(3)$: Le facteur de forme symétrique.

α_c : est la covalence du matériau définie comme :

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (\text{II-42})$$

❖ L'expression proposée par Adachi :

Adachi a proposé un modèle basé sur la variation de ϵ_{∞} et de ϵ_0 avec le gap d'énergie

fondamental E_g [16] :

$$\epsilon_{\infty} = 11.26 - 1.42E_g \quad (\text{II-43})$$

$$\epsilon_0 = 18.52 - 3.08E_g \quad (\text{II-44})$$

II.9. Densité de charge

La densité de charge électronique est l'une des caractéristiques qui découle de la structure de bande, elle est d'une utilité primordiale, lorsque les propriétés chimiques et physiques présentent un intérêt dans les matériaux semi-conducteur. Elle nous permet de connaître le type de liaisons établit entre les composant du matériau d'où les propriétés optiques et électroniques.

Contrairement aux propriétés électroniques un grand intérêt est apporté récemment sur les propriétés structurales, et en particulier sur les propriétés de liaison des semi-conducteurs et une idée réaliste sur la distribution de charge électronique est obtenue d'un traitement des densités de charges qui s'effectue dans l'espace direct, donnant ainsi une vue réelle sur le caractère ionique de la liaison [23]

II.9.1. Calcul de la densité de charge:

Après avoir résolu l'équation de Schrödinger pour les fonctions d'ondes $\Psi(\mathbf{r})$

$$H \Psi_{n,k}(\mathbf{r}) = E_{n,k}(\mathbf{r}) \quad (\text{II-45})$$

$\Psi_{n,k}(\mathbf{r})$: pseudo fonction d'onde.

n, k: sont respectivement le numéro de la bande et le vecteur d'onde de l'état.

La densité de charge électronique peut être calculée comme une fonction positionnelle dans le cristal en élevant au carré la fonction d'onde pour chaque état sommant par la contribution de tous les états.

$$\rho_n(\mathbf{r}) = e \sum_{n,k} (\Psi_{n,k}(\mathbf{r}))^2 \quad (\text{II-46})$$

Dans le cas, Où on s'intéresse à une certaine région spatiale de la zone de Brillouin:

$$\rho(\mathbf{r}) = e (\Psi_{n,k}(\mathbf{r}))^2 \quad (\text{II-47})$$

Le calcul de la densité de charges totale nécessite la connaissance des fonctions d'ondes dans toute la zone de Brillouin. Plusieurs méthodes d'approximation ont été développées dans le but de réduire le temps de calcul nécessaire. Ainsi, les densités de charges de quelques semi-conducteurs ont été calculées par J.P. Walter et al [22,25] en utilisant un échantillonnage régulier de 3360 points de coordonnées.

$$\frac{1}{16} (2s + 1.2m + 1.2n + 1) \text{ unité de } \frac{2\pi}{a} \quad (\text{II-48})$$

s, m et n: sont des entiers.

Références:

- [1] B. Chalmers, structure et Propriétés des Solides, Ed Masson, Paris, New York, 65, (1987).
- [2] F. Abelès, optical Properties of Solids, North-Holland, Publishing Company 3, 24, 25,26, (1972).
- [3] F. Mezrag, Mémoire de magister, université de M'sila, Algérie, (2003).
- [4] H. Saheb, Mémoire de magister, université de Tébessa, Algérie, (2012).
- [5] D. Sénéchal, physique subatomique, Université de Sherbrooke 79, (2010)
- [6] S. Ouendadji, Thèse de doctorat, Université de Annaba, Algérie, (2010).
- [7] H. Mathieu, physique des Semi-conducteurs et des Composants Électroniques, 4 Ed. Masson 21, 23, 24, 25, 33, 419, 420, (1998).
- [8] G. Debionne, la lumière, club d'astronomie , (2010).
- [9] H.Mekahlia, Mémoire de master, Université de Tébessa (Algeria),(2016).
- [10] C. Kittel, physique de l'état solide, Ed. Dunod Université, (1983).
- [11] R. Mouici, Mémoire de magister, université de Tébessa, Algérie, (2012).
- [12] P. Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties, 4 ed. Springer-Verlag, Berlin, (1999).
- [13] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 285,(1998).
- [14] G. Guillaume. Thèse de doctorat, université de luminy. Marseille (France), (2002).
- [15] Y. Farge, M. Fontana, Perturbations électroniques et vibrationnelles localisées dans les solides ioniques. ed Masson, Cle Editeurs, paris, (1974).
- [16] S. Adachi, Properties of Semiconductor alloys Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, (2005).
- [17] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T. V. R. Rao, Infrared. Phys, **34**, 95,(1993).
- [18] V. P Gupta et N. M. Ravindra 1980 Phys. Stat. Sol. **B,100**, 715,(1980).
- [19] P. J. L. Herve et L. K. J. Vandamme, Infrared. Phys. Techno, **35**, 609, (1994).
- [20] N. M. Ravindra, S. Auluck et V. K. Srivastava, Phys. Stat. Sol. B, **93**, k155, (1979).
- [21] S. Y. Davydov and S. K. Tikhonov, Semiconductors, **32**, 947, (1998).
- [22] P. Vogl, J. Phys. **C,11**, 251,(1978).
- [23] S. Yousfi, Thèse de magister, Université de M'sila, Algeria, (2004).
- [24] J.P. Walter and M. L.Cohen Phys. Rev **B4**,1877,(1971).
- [25] A. Balderschi, Phys. **B7**,5212,(1973).

Chapitre III



Résultats et discussions

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1 Introduction:

Vu l'épanouissement de la technologie, de l'information et des besoins de l'industrie, les composés semi-conducteurs III-V ont été un sujet de spéculation et extrapolation, en particulier à cause de leurs applications potentielles dans la réalisation et le développement des dispositifs optiques et optoélectroniques [1]. Compte tenu de l'importance technologique, il est devenu indispensable la connaissance de ces matériaux et leurs propriétés électroniques ceci réside dans l'étude de la structure de bandes qui est calculée en se basant sur la méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) qui est combinée avec l'approximation du cristal virtuel introduisant l'effet du désordre comme un potentiel effectif, elle est utilisée pour étudier les propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs.

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 des bandes électroniques [2].

Le pseudopotentiel est défini comme étant une superposition des pseudopotentiels atomiques de la forme:

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

Où: $V_L(\vec{r})$: La partie locale.

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

Dans ce travail, on a pris en considération que la partie locale où la partie non locale est omise, donc la formule (III-1) prend la forme suivante:

$$V_p(\vec{r}) = V_L(\vec{r}) = \sum_G V_a(\vec{G}) S(\vec{G}) \exp(i\vec{G}\vec{r}) \quad (\text{III-2})$$

Avec $S(G)$: Le facteur de structure et $V_a(G)$: Le facteur de forme.

Les paramètres du pseudopotentiel empirique sont déterminés par la méthode non linéaire des moindres carrés [3], 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 [4, 5]:

$$\delta = \left[\sum_{ij} \left(\frac{\Delta E_{ij}}{m-n} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-3})$$

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

E_{ij}^{exp} et sont respectivement, les énergies mesurées et celles calculées entre le $i^{\text{ém}}$ état au vecteur d'onde $k = k_i$ et le $j^{\text{ém}}$ état au vecteur d'onde $k = k_j$ dans les m paires choisies (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 δ [6].

III.2.L'approximation du cristal virtuel (VCA):

L'approximation du cristal virtuel VCA, est l'approche la plus préférée grâce à sa simplicité, elle postule que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen. L'Hamiltonien H considéré pour la VCA est donné par:

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{AC}(r) \right] + x [V_{AB}(r) - V_{AC}(r)] \quad (\text{III-5})$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + [xV_{AB}(r) + (1-x)V_{AC}(r)] \quad (\text{III-6})$$

Où: V_{AB} et V_{AC} sont respectivement les potentiels périodiques des éléments AB et AC [7].

La méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA reste la plus simple et offre des résultats compatibles et raisonnables pour la structure de bandes [8]. Le gap énergétique pour la plupart des alliages ternaires est approximativement donné sous la forme d'une fonction quadratique [9]:

$$T_{ABC}(x) = xT_{AB} + (1-x)T_{AC} + Cx(1-x) \quad (\text{III-7})$$

Avec: T_{AB} et T_{AC} sont les gaps énergétique du composé AB, AC respectivement.

C'est souvent nommé « paramètre de courbure » ou « bowing » ou « paramètre non linéaire » et prouvé par l'expérience. Cependant la VCA donne des paramètres de courbure (bowing) du gap énergétique déviant d'une valeur importante de celle fournie par l'expérience. Pour remédier à cela, il est nécessaire d'introduire l'effet du désordre compositionnel dans le formalisme de la VCA, en ajoutant un terme correctif à l'Hamiltonien appelé potentiel du désordre effectif [8].

III.3.L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA):

Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel dû au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système devient [10, 11]:

$$V(r) = V_{VCA} + V_{\text{dés}} \quad (\text{III-8})$$

$$V(r) = V_{VCA} - P(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{III-9})$$

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

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

L'équation (III-9) peut être écrite sous une forme plus étendue [12]:

$$V(r) = xV_{AB}(r) + (1-x)V_{AC}(r) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}(V_{AB}(r) - V_{AC}(r)) \quad (III-10)$$

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

$$V(r) = \sum_G V(G) \exp(iGr) \quad (III-11)$$

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

$$V_{A_xB_{1-x}C}(G) = xV_{AC}(G) + (1-x)V_{BC}(G) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}[V_{AC}(G) - V_{BC}(G)] \quad (III-12)$$

$V_{AB}(G)$ et $V_{AC}(G)$ sont les facteurs de formes des composés AB et AC respectivement.

Ces facteurs de formes ont été utilisés pour calculer la densité de charge électronique de l'alliage ternaire $Al_x Ga_{1-x} Sb$ en faisant varier la valeur du paramètre p jusqu'à avoir un bon accord avec les valeurs expérimentales. La valeur de p dans notre étude est égal à ($p = 0.098173$) correspondant à un bowing optique expérimental ($c=0.044$).

Les facteurs de formes de cet alliage sont calculés selon l'expression (III-12) d'où:

$$V_{Al_xGa_{1-x}Sb} = xV_{AlSb}(G) + (1-x)V_{GaSb}(G) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}[V_{AlSb}(G) - V_{GaSb}(G)] \quad (III-13)$$

Les facteurs de forme du pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires semiconducteurs GaSb et AlSb 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 semi-conducteurs GaSb et AlSb dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en (Å).

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau a
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
AlSb	-0.233314	0.068246	0.02599	0.057	0.058960	0.016475	11.5946 (u.a)
							6.1355 (Å)
GaSb	-0.195373	0.005	0.045073	0.040776	0.03	0.000	11.5162 (u.a)
							6.09403 (Å)

III.4. Etude des gaps énergétiques de l'alliage ternaire $Al_x Ga_{1-x} Sb$:

Les alliages semi-conducteurs fournissent des moyens naturels d'accorder l'importance de gap interdit afin d'optimiser et élargir les applications des dispositifs semi-conducteurs. Les alliages

semi-conducteurs III.V ont ouvert de nouvelles générations d'applications de dispositif pendant les dernières décennies [13,14].

Il est important de remarquer la dépendance en composition des gaps d'énergie de l'alliage ternaire $Al_x Ga_{1-x} Sb$, nommés gap direct E_{Γ}^{Γ} et gap indirect E_{Γ}^X et E_{Γ}^L [6].

Dans nos calculs les gaps énergétiques pour les composés binaires AlSbetGaSb pour la concentration de l'Aluminium ($x=0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ et 1) avec et sans tenir compte l'effet du désordre compositionnel sont représentés dans le tableau III-2.

Tableau III.2: Les gaps énergétiques pour les composés binaires AlSb et GaSb et leurs alliages ternaires.

Composé	Gaps d'énergie (eV)					
	E_{Γ}^{Γ}		E_{Γ}^X		E_{Γ}^L	
	Exp.	Cal.	Exp.	Cal.	Exp.	Cal.
GaSb	0.72 ^{a,b}	0.72601	1.05 ^{a,b}	1.02992	0.76 ^{a,b}	0.80994
$Al_{0.1}In_{0.9}Sb$	-	0.90690* 0.85465**	-	1.11638* 1.09392**	-	0.97377* 0.92745**
$Al_{0.3}In_{0.7}Sb$	-	1.25205* 1.177**	-	1.26656* 1.23839**	-	1.28369* 1.21783**
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	-	1.57586* 1.49907**	-	1.39087* 1.36581**	-	1.57192* 1.5050**
$Al_{0.7}In_{0.3}Sb$	-	1.87944* 1.81355**	-	1.49367* 1.47511**	-	1.84053* 1.78337**
$Al_{0.9}In_{0.1}Sb$	-	2.16417* 2.12383**	-	1.57845* 1.56878**	-	2.09151* 2.05661**
AlSb	2.27 ^{a,b}	2.29991	1.615 ^{a,b}	1.61501	2.211 ^{a,b}	2.21097

*Nos calculs sans désordre.

**Nos calculs avec désordre.

^aRéf.: [15] , ^bRéf.: [16]

A partir du tableau (III.2) on observe que, les résultats obtenus des gaps d'énergies sont en bon accord avec ceux trouvés par l'expérience pour les composés binaires AlSbetGaSb. On constate aussi que les gaps d'énergies directes et indirectes de l'alliage ternaire $Al_x Ga_{1-x} Sb$ augmentent avec l'augmentation x de l'Aluminium. Par contre l'effet du désordre diminue les gaps d'énergies en allant du GaSb ($x=0$) vers AlSb ($x=1$).

Nous avons résumé les gaps d'énergie fondamentaux E_g de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ pour les concentrations x de l'Aluminium avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel dans le tableau III-3.

Tableau III-3: Les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ pour les concentrations $x= 0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ et 1.0 .

Matériaux	E_g (eV)
GaSb	0.72601 0.72 ^{a,b}
$Al_{0.1}Ga_{0.9}Sb$	0.90690 ^{**} 0.85465 ^{***}
$Al_{0.3}Ga_{0.7}Sb$	1.25205 ^{**} 1.177 ^{***}
$Al_{0.5}Ga_{0.5}Sb$	1.39087 ^{**} 1.36581 ^{***}
$Al_{0.7}Ga_{0.3}Sb$	1.49367 ^{**} 1.47511 ^{***}
$Al_{0.9}Ga_{0.1}Sb$	1.57845 ^{**} 1.56878 ^{***}
AlSb	1.61501 1.615 ^{a, b}

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

a Réf.: [15], b Réf.: [16]

La figure III-1 représente la variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de l'Aluminium de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ ternaire avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

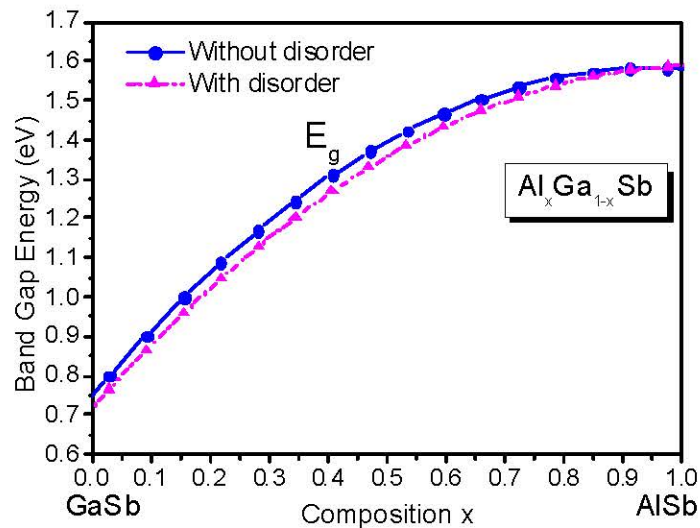


Figure III-1: la variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de l'Aluminium de l'alliage ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

On remarque que, les gaps d'énergies fondamentaux E_g de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$ augmentent non linéairement en fonction de la concentration x de l'Aluminium, et l'effet de désordre est faible et on peut le négliger.

Les ajustements quadratiques de ces courbes sont sous la forme d'expression analytique suivante:

$$E_g = A + Bx + Cx(1-x) \quad (\text{III-14})$$

C: est le paramètre de courbure du gap d'énergie.

Les expressions analytiques des gaps fondamentaux E_g avec (VCA) et (VCAA) des alliages ternaires $Al_xGa_{1-x}Sb$ sont données par les relations suivantes:

$$E_g = 0.75278 + 0.82685x - 0.92812x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-15})$$

$$E_g = 0.72097 + 0.86755x - 0.81543x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-16})$$

On remarque que l'effet de désordre est faible et on peut le négliger.

III.5. Etude des propriétés optiques et diélectriques:

L'étude des propriétés optiques et diélectriques des solides a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux.

Dans la physique du solide les gaps d'énergie et les constantes optiques (l'indice de réfraction n) et les constantes diélectriques (la constante diélectrique statique ϵ_0 et la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞) sont des paramètres importants [6, 17, 18].

III.5.1. Indice de réfraction:

La connaissance du gap d'énergie nous a permis de calculer l'indice de réfraction n et de voir sa dépendance en fonction de la concentration x suivant les relations (II-35, II-36, II-37) données au chapitre II. Nos résultats comparés aux données de la littérature sont présentés dans le Tableau III-4 avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Les valeurs de l'indice de réfraction n obtenues en employant les relations de Moss, de Ravindra et ces collaborateurs, de Herve et Vandamme respectivement, sont : 3.49, 3.63, 3.44, pour GaSb, et 2.85, 3.08, 2.89, pour AlSb.

Noter que pour GaSb, le décalage de l'accord entre nos résultats et les données connues est dans les intervalles [8.57% - 6.11%-9.47%], [4.87% - 2.31%-13.91%] et [9.82% - 7.40%-7.97%] en employant les relations de Moss, Ravindra et ces collaborateurs, Herve et Vandamme respectivement. Pour AlSb, nos résultats sont conformes aux données connues de [10.35% - 34.25%], [3.36% - 44.72%] et [9.393% -35.69%] en employant les relations (II-35), (II-36) et (II-37) respectivement.

On remarque que, nos résultats sont en bon accord par rapport aux autres travaux surtout en employant la relation de Ravindra.

Donc nous constatons que le meilleur modèle est celle du Ravindra.

Dans la figure III-2, nous avons tracé les courbes de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculée par les différentes relations.

Nous observons qu'il y a une diminution de l'indice de réfraction en augmentant la concentration x de l'Aluminium et cette diminution est non linéaire pour les différents modèles utilisés. On constate aussi, que l'effet du désordre fait augmenter l'indice de réfraction n en allant du composé GaSb ($x=0$) vers le composé AlSb ($x=1$), cet effet est faible pour $x \geq 0.4$, C'est-à-dire on peut le négliger.

La dépendance de la concentration x de l'Aluminium avec l'indice de réfraction n est montrée dans la figure III-3 pour les trois modèles. On observe la même tendance de n pour tous les modèles utilisés. L'augmentation de la concentration de l'Aluminium mène à une diminution monotone de n .

D'après la figure III-3, L'allure de la courbe de l'indice de réfraction calculé par la relation de Herve et ses collaborateurs et celle de l'indice de réfraction calculé par la relation de Moss est presque semblable surtout pour les concentrations supérieures de 0.1 de l'Aluminium par contre la relation de Ravindra donne des valeurs de n un peu élevé que les deux autres relations.

Tableau III-4 :L'indice de réfraction n calculé par les différentes relations et les gaps d'énergies fondamentaux des composés binaires semi-conducteurs GaSb, AlSb et leurs alliages ternaires.

Composé	E _g (eV)		n			
	Cal.	Autres	Moss	Ravindra	Herve	Autres
GaSb	0.72601	0.72 ^{a,b}	3.49237032	3.6338738	3.44451566	3.82 ^{(c), (d), (e)} 3.72 ^(f) 3.19 ^(g)
Al _{0.1} Ga _{0.9} Sb	0.90690 ^{**} 0.85465 ^{***}	-	3.30343745 ^{**} 3.35280939 ^{***}	3.5217220 ^{**} 3.554117 ^{***}	3.312283 ^{**} 3.34927293 ^{***}	-
Al _{0.3} Ga _{0.7} Sb	1.25205 ^{**} 1.177 ^{**}	-	3.04754776 ^{**} 3.09500834 ^{***}	3.3077290 ^{**} 3.35426 ^{***}	3.08974355 ^{**} 3.13513811 ^{***}	-
Al _{0.5} Ga _{0.5} Sb	1.39087 ^{**} 1.36581 ^{***}	-	2.96848121 ^{**} 2.982005 ^{***}	3.2216606 ^{**} 3.2371978 ^{***}	3.00971828 ^{**} 3.02380121 ^{***}	-
Al _{0.7} Ga _{0.3} Sb	1.49367 ^{**} 1.47511 ^{***}	-	2.91603192 ^{**} 2.92516142 ^{***}	3.1579246 ^{**} 3.1694318 ^{***}	2.95354004 ^{**} 2.96349761 ^{***}	-
Al _{0.9} Ga _{0.1} Sb	1.57845 ^{**} 1.56878 ^{***}	-	2.87606192 ^{**} 2.88048374 ^{***}	3.1053610 ^{**} 3.1113564 ^{***}	2.90905292 ^{**} 2.91404595 ^{***}	-
AlSb	1.61501	1.615 ^{a,b}	2.85964508	3.0826938	2.89035971	3.19 ^{(h), (i)} 2.13 ^{(k), (l)}

*Nos calculs sans désordre.

**Nos calculs avec désordre.

^(a) Réf.: [15], ^(b) Réf.: [16], ^(c) Réf.: [11], ^(d) Réf.: [19], ^(e) Réf.: [20], ^(f) Réf.: [21], ^(g) Réf.: [22]

^(h) Réf.: [23], ⁽ⁱ⁾ Réf.: [24], ^(k) Réf.: [25], ^(l) Réf.: [26].

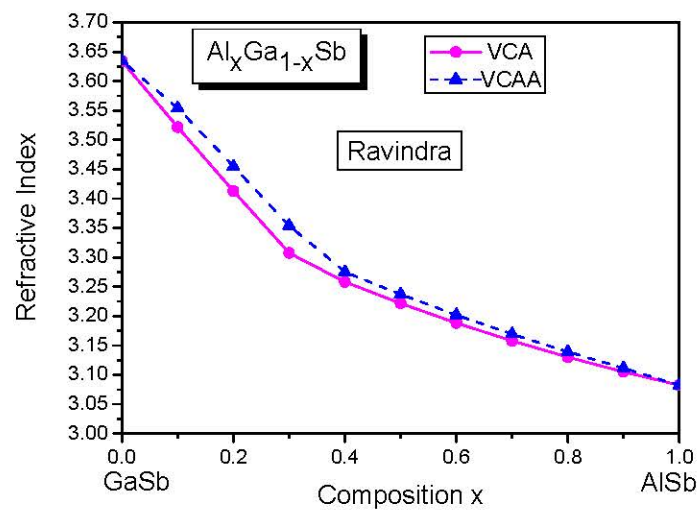
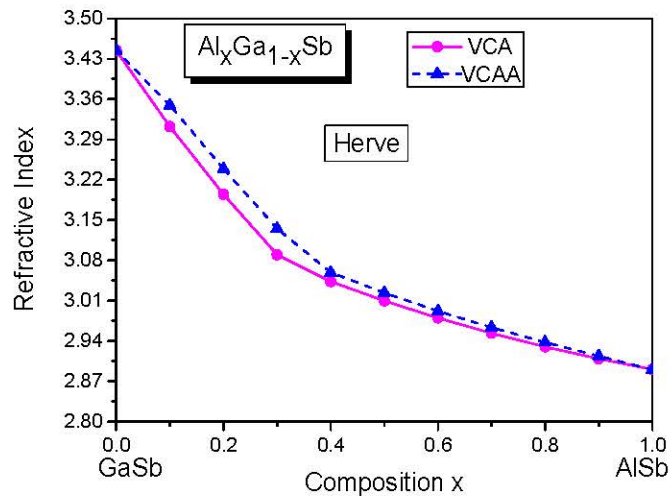
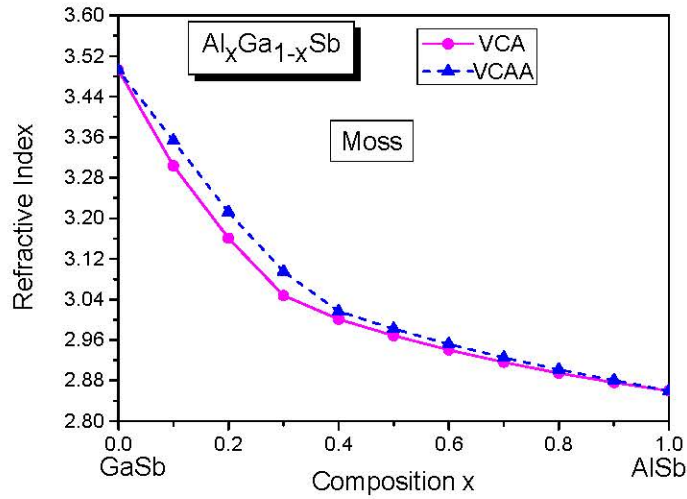


Figure III-2: La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculé par les différentes relations: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.

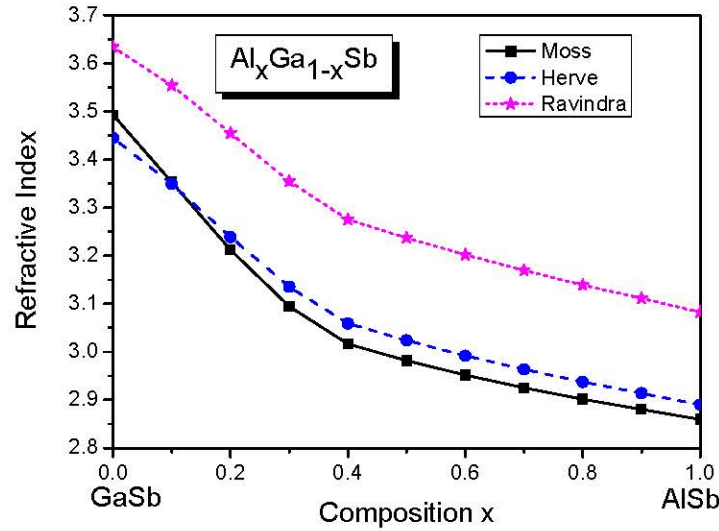


Figure III-3: Comparaison de la variation de l'indice de réfraction n en fonction de la $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ concentration x de l'Aluminium, calculé avec les différentes relations de l'alliage.

Les interpolations quadratiques de ces courbes sont ajustées selon la fonction analytique de la forme suivante:

$$n = A + Bx + Cx(x-1) \quad (\text{III-17})$$

C: est le paramètre de courbure de l'indice de réfraction n . Leurs expressions analytiques sont comme suites :

$$n = 3.4431 - 1.4031x + 0.8582x^2 \quad (\text{Moss VCA}) \quad (\text{III-18})$$

$$n = 3.4721 - 1.3863x + 0.8055x^2 \quad (\text{Moss VCAA}) \quad (\text{III-19})$$

$$n = 3.6173 - 1.0881x + 0.5754x^2 \quad (\text{Ravindra VCA}) \quad (\text{III-20})$$

$$n = 3.637 - 1.0434x + 0.5056x^2 \quad (\text{Ravindra VCAA}) \quad (\text{III-21})$$

$$n = 3.4184 - 1.161x + 0.6597x^2 \quad (\text{Herve VCA}) \quad (\text{III-22})$$

$$n = 3.4408 - 1.1283x + 0.5987x^2 \quad (\text{Herve VCAA}) \quad (\text{III-23})$$

Nous observons que les paramètres de courbure (bowing) en utilisant les différentes relations sont positifs, et ils diminuent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre compositionnel mais ces diminutions sont faibles.

On remarque aussi que la valeur du bowing pour l'indice de réfraction calculé avec la relation du Moss est la plus grande comparativement avec les valeurs du bowing pour l'indice de

réfraction calculé avec les deux autres modèles ,Cependant la valeur du bowing pour l'indice de réfraction n calculée avec la relation de Herve est très faible.

III.5.2. Les constantes diélectriques:

III.5.2.1. La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} :

D'après la relation (II-38) qui est présenté dans le chapitre II on peut calculer la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} pour les trois modèles (Moss, Herve et Ravindra) en fonction de la concentration x de l'Aluminium dans l'intervalle [0-1] de l'alliage semi-conducteur ternaire $Al_xGa_{1-x}Sb$.

Le tableau (III-5) présente les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en employant les relations de Moss, de Ravindra et ses collaborateurs, de Herve et ses collaborateurs, respectivement, sont 12.19,13.20,11.86 pour GaSb ;8.17,9.50,8.35 pour AlSb.

Noter que pour GaSb, le décalage de l'accord entre nos résultats et les données connues est dans les intervalles [15.53% - 14.10%],[17.83% - 16.44%] et [29.16% - 27.96%] en employant les relations de Moss, Ravindra et ces collaborateurs, Herve et Vandamme respectivement. Pour AlSb, nos résultats sont conformes aux données connues de [20.1409% - 13.4198% - 16.29% et 17.23%], [7.19% - 31.80% - 2.73% et 3.81%] et [18.41% - 15.86% - 14.49% et 15.44].

Donc nos résultats sont en bon accord avec les autres travaux disponibles.

Il est clair de ces comparaisons que l'accord est bon entre les résultats obtenus et les données connues (voir tableau (III-5)).

La figure III-4 montre l'évolution de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration de l'Aluminium de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$, calculée par les trois relations. Noter qu'en augmentant la concentration x de l'Aluminium, la constante diélectrique à haute fréquence diminue non linéairement en fonction de la concentration x de l'Aluminium pour tous les modèles. Ce n'est pas étonnant selon l'équation (II-38), on peut s'attendre à ce qu'un tel comportement de ϵ_{∞} soit qualitativement semblable à celui de l'indice de réfraction n .

L'effet de désordre compositionnel influe sur la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} mais cette influence est moins importante pour des concentrations supérieures à $x=0.4$ dans ce cas on peut le négligé.

la figure III-5 qui représente la comparaison de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

Pour des concentrations plus grandes que 0.1 de l'Aluminium, l'allure de courbe de la constante diélectrique à haute fréquence calculée par les deux relations de Moss, de Herve et ses collaborateurs est presque la même ,par contre la relation de Ravindra est en désaccord avec les deux autres relations.

Tableau III-5: La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs GaSb, AlSb et leurs alliages.

Composé	E_g (eV)	ϵ_{∞}				
	Cal.	Moss	Ravindra	Herve	Adachi	Autres
GaSb	0.72601	12.1966504	13.2050388	11.8646881	10.2290658	14.44 ^{(a), (b)} 14.2 ^(c)
Al _{0,1} Ga _{0,9} Sb	0.90690 ^{**}	10.9126990 ^{**}	12.4025258 ^{**}	10.9712187 ^{**}	9.972202 ^{**}	-
	0.85465 ^{***}	11.2413308 ^{***}	12.6317476 ^{***}	11.2176292 ^{***}	10.046397 ^{***}	
Al _{0,3} Ga _{0,7} Sb	1.25205 ^{**}	9.28754736 ^{**}	10.9410711 ^{**}	9.54651519 ^{**}	9.482089 ^{**}	-
	1.177 ^{***}	9.5790766 ^{***}	11.2510601 ^{***}	9.82909098 ^{***}	9.58866 ^{***}	
Al _{0,5} Ga _{0,5} Sb	1.39087 ^{**}	8.81188068 ^{**}	10.3790970 ^{**}	9.05840414 ^{**}	9.2849646 ^{**}	-
	1.36581 ^{***}	8.8923538 ^{***}	10.4794496 ^{***}	9.14337376 ^{***}	9.3205498 ^{***}	
Al _{0,7} Ga _{0,3} Sb	1.49367 ^{**}	8.50324218 ^{**}	9.97248778 ^{**}	8.72339874 ^{**}	9.1389886 ^{**}	-
	1.47511 ^{***}	8.55656934 ^{***}	10.0452979 ^{***}	8.78231809 ^{***}	9.1653438 ^{***}	
Al _{0,9} Ga _{0,1} Sb	1.57845 ^{**}	8.27173215 ^{**}	9.64326694 ^{**}	8.46258889 ^{**}	9.018601 ^{**}	-
	1.56878 ^{***}	8.29718657 ^{***}	9.68053865 ^{***}	8.49166382 ^{***}	9.0323324 ^{***}	
AlSb	1.61501	8.17756999	9.50300106	8.35417923	8.9666858	10.24 ^{(d), (e)} 7.21 ^(d) 9.77 ^(d) 9.88 ^(f) 10.24 ^(b)

^{**} Nos calculs sans désordre.

^{***} Nos calculs avec désordre.

Réf.: [19], ^(b) Réf.: [20], ^(c) Réf.: [27], ^(d) Réf.: [28], ^(e) Réf.: [29], ^(f) Réf.: [15].

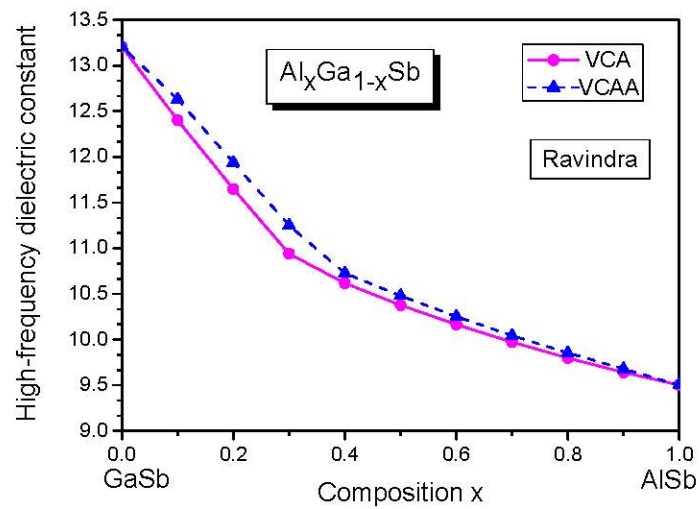
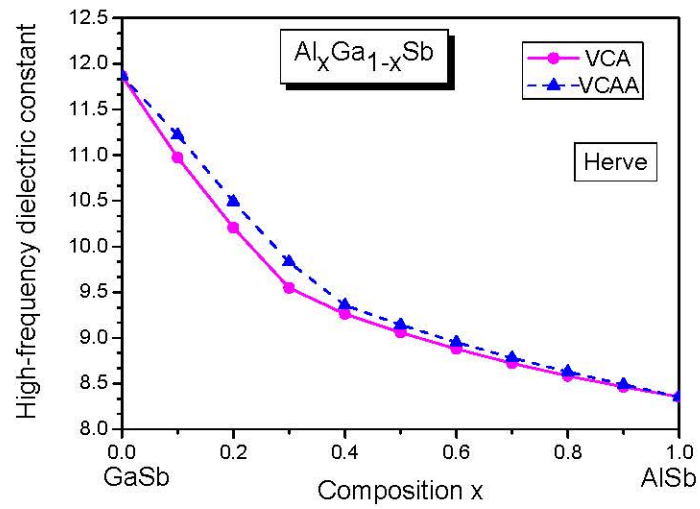
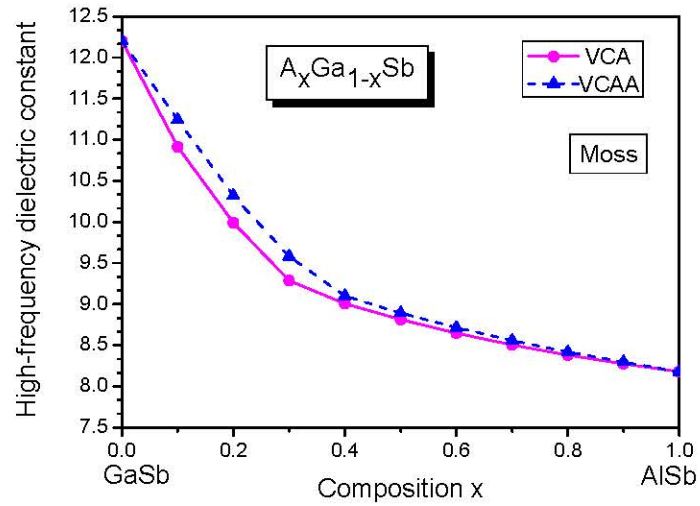


Figure III-4: La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculée par les différentes relations: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$.

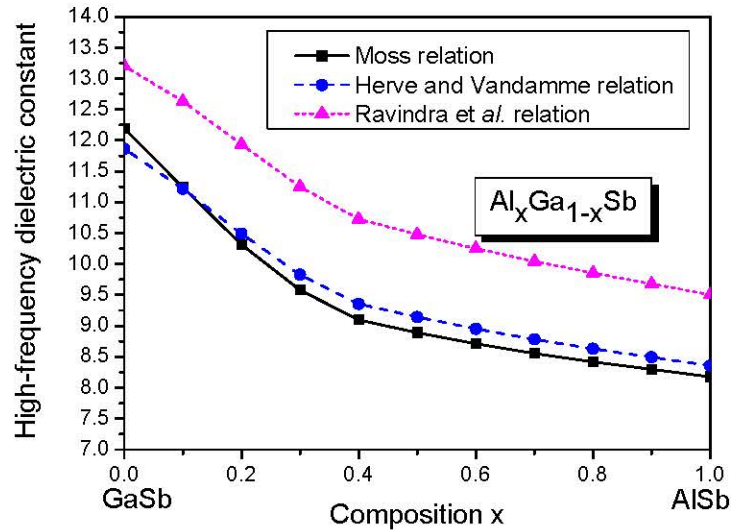


Figure III-5: Comparaison de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculée par les différentes relations de l'alliage $Al_xGa_{1-x}Sb$

L'interpolation quadratique de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ ci-dessus est ajustée sous la forme suivante:

$$\epsilon_\infty = A + Bx + Cx(x-1) \tag{III-24}$$

C: est le paramètre la courbure de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ .

Leurs expressions analytiques sont comme suites:

$$\epsilon_\infty = 11.8402 - 9.0685x + 5.6668x^2 \tag{Moss VCA} \tag{III-25}$$

$$\epsilon_\infty = 12.0314 - 9.0045x + 5.3684x^2 \tag{Moss VCAA} \tag{III-26}$$

$$\epsilon_\infty = 13.0706 - 7.5029x + 4.0951x^2 \tag{Ravindra VCA} \tag{III-27}$$

$$\epsilon_\infty = 13.2101 - 7.235x + 3.6491x^2 \tag{Ravindra VCAA} \tag{III-28}$$

$$\epsilon_\infty = 11.6716 - 7.5186x + 4.3842x^2 \tag{Herve VCA} \tag{III-29}$$

$$\epsilon_\infty = 11.8201 - 7.3456x + 4.0241x^2 \tag{Herve VCAA} \tag{III-30}$$

Nous observons que les valeurs du bowing pour la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculé avec les trois relations sont positives, et l'effet de désordre compositionnel est très faible.

On remarque que la valeur du bowing de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculé à partir de la relation de Moss est la grande comparativement aux valeurs du bowing pour la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculé avec les deux autres modèles.

III.5.2.2. La constante diélectrique statique ϵ_0 :

Pour calculer la constante diélectrique statique ϵ_0 , nous avons utilisé le model de Harrison qui relie la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ avec la constante diélectrique statique ϵ_0 (relation II- 39).

Le tableau III-6 regroupe nos calculs concernant les valeurs de la constante diélectrique statique ϵ_0 avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.

Les valeurs de la constante diélectrique statique ϵ_0 en employant les relations de Moss, de Ravindra et ses collaborateurs, de Herve et Vandamme, respectivement, sont 12.97,14.05,12.61 pour GaSb;8.87,10.32,9.06 pour AlSb .

Noter que pour GaSb, le décalage entre les résultats et les données connues est dans les intervalles [17.31% - 16.30% - 17.36%], [10.44% - 9.58% - 10.50%] et [19.57% - 18.59% - 9.62%] en employant les relations de Moss, Ravindra et ces collaborateurs, Herve et Vandamme respectivement. Pour AlSb, nos résultats sont conformes aux données connues de [26.28% - 24.78% - 28.48% et 20.82%], [14.20% - 12.46% - 16.76% et 7.85%] et [24.67% - 23.14% - 26.92% et 19.09%].

Il est clair de ces comparaisons que ces résultats sont en concordance avec les données connues (voir tableau III-6).

La Figure III-6 représente la variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de l'Aluminium, calculée par les différentes relations.

Nous observons qu'il y a une diminution de la constante diélectrique statique en augmentant la concentration de l'Aluminium et cette constante varie non linéairement avec la concentration de l'Aluminium et il montre presque le même comportement qualitatif que celui de ϵ_∞ et de l'indice de réfraction n .

Pour des concentrations supérieures à 0.1 de l'Aluminium, l'allure de la courbe des constantes diélectriques statiques ϵ_0 calculées par les deux relations de Moss, de Herve et Vandamme est presque la même. (voir figure III-7).

Dans la figure III-8 nous observons le même comportement de la constante diélectrique statique ϵ_0 et la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ en fonction de la concentration x de l'Aluminium.

Tableau III-6: La constante diélectrique statique ϵ_0 calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs GaSb, AlSb et leurs alliages ternaires.

Composé	E_g (eV)	ϵ_0				
	Cal.	Moss	Ravindra	Herve	Adachi	Autres
GaSb	0.72601	12.9731566	14.0514784	12.6181722	16.2838892	15.69 ^(a) , (b) 15.5 ^(c) 15.7 ^(d) , (e)
Al _{0.1} Ga _{0.9} Sb	0.90690 [*]	11.6296770 [*]	13.2272618 [*]	11.6924293 [*]	15.726748 [*]	-
	0.85465 ^{***}	11.973141 ^{***}	13.4629122 ^{***}	11.9477457 ^{***}	15.887678 ^{***}	
Al _{0.3} Ga _{0.7} Sb	1.25205 [*]	9.93529887 [*]	11.7180614 [*]	10.2145075 [*]	14.663686 [*]	-
	1.177 ^{***}	10.2384885 ^{***}	12.0389854 ^{***}	10.5077197 ^{***}	14.89484 ^{***}	
Al _{0.5} Ga _{0.5} Sb	1.39087 [*]	9.46667473 [*]	11.1652556 [*]	9.73386185 [*]	14.2361204 [*]	-
	1.36581 ^{***}	9.54305316 ^{***}	11.2609999 ^{***}	9.81476891 ^{***}	14.3133052 ^{***}	
Al _{0.7} Ga _{0.3} Sb	1.49367 [*]	9.17335529 [*]	10.7738189 [*]	9.41317399 [*]	13.9194964 [*]	-
	1.47511 ^{***}	9.22222668 ^{***}	10.8420972 ^{***}	9.46786162 ^{***}	13.9766612 ^{***}	
Al _{0.9} Ga _{0.1} Sb	1.57845 [*]	8.95984837 [*]	10.4611700 [*]	9.16876568 [*]	13.658374 [*]	-
	1.56878 ^{***}	8.98207322 ^{***}	10.4952615 ^{***}	9.19480337 ^{***}	13.6881576 ^{***}	
AlSb	1.61501	8.87541111	10.3297076	9.06919123	13.5457692	12.04 ^(f) 11.80 ^(f) 12.41 ^(f) 11.21 ^(g) 12.04 ^(h) (i) (j)

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

(a) Réf.: [19], (b) Réf.: [20], (c) Réf.: [27], (d) Réf.: [30], (e) Réf.: [31], (f) Réf.: [28], (g) Réf.: [15]

(h) Réf.: [32] (i) Réf.: [29] (j) Réf.: [20]

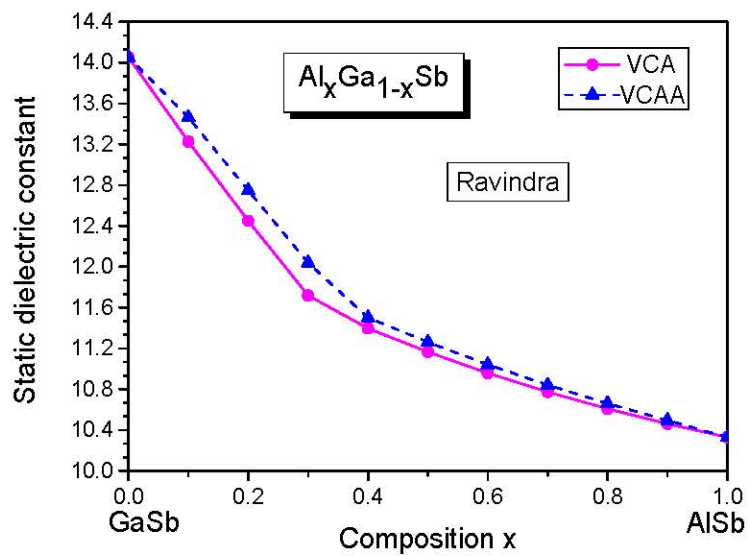
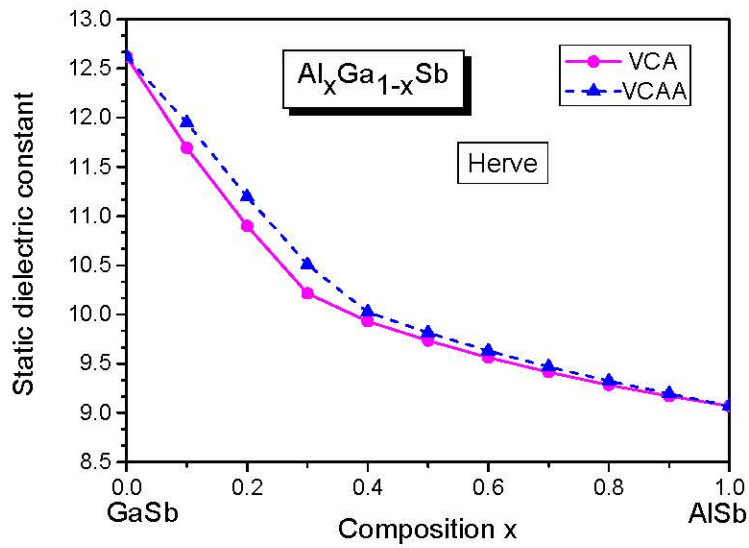
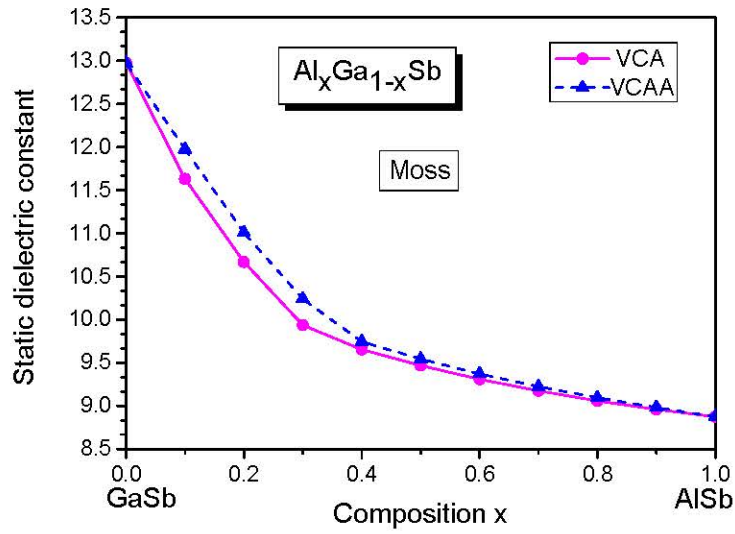


Figure III-6: La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de l'Aluminium, calculée par les différentes relations: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.

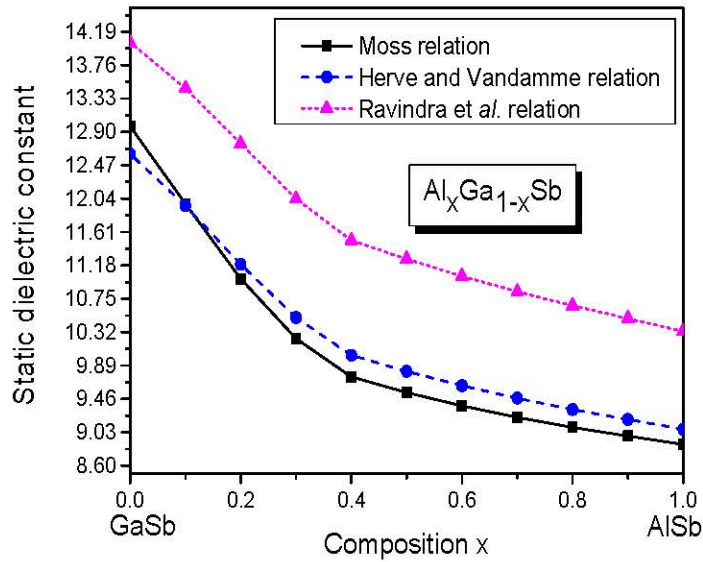


Figure III-7: Comparaison de la variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de l'Aluminium, calculée avec les différentes relations de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.

Les interpolations quadratiques de la variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de l'Aluminium sont exprimées par les expressions analytiques suivantes :

$$\epsilon_0 = 12.5952 - 9.4515x + 6.0094x^2 \quad (\text{Moss VCA}) \quad (\text{III-31})$$

$$\epsilon_0 = 12.7975 - 9.417x + 5.726x^2 \quad (\text{Moss VCAA}) \quad (\text{III-32})$$

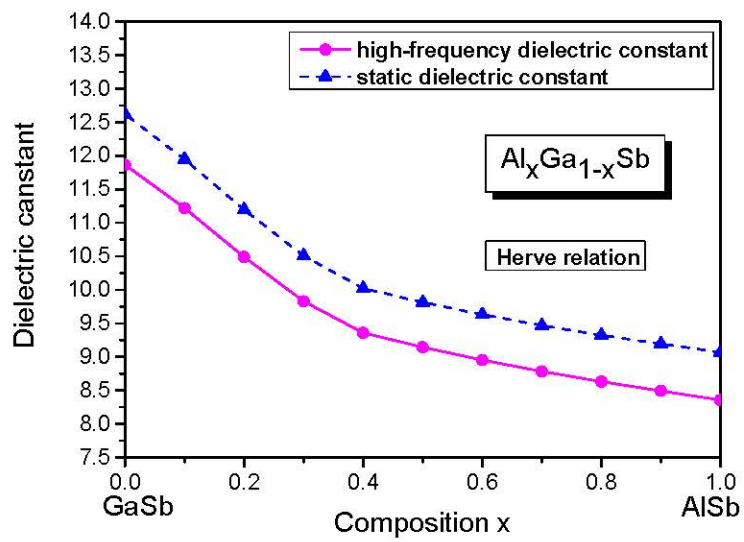
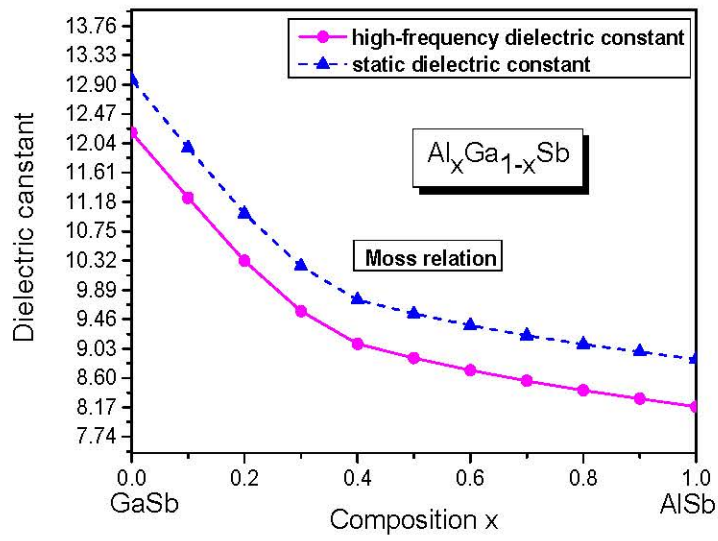
$$\epsilon_0 = 13.9106 - 7.7228x + 4.3115x^2 \quad (\text{Ravindra VCA}) \quad (\text{III-33})$$

$$\epsilon_0 = 14.057 - 7.4769x + 3.8776x^2 \quad (\text{Ravindra VCAA}) \quad (\text{III-34})$$

$$\epsilon_0 = 12.4146 - 7.784x + 4.6331x^2 \quad (\text{Herve VCA}) \quad (\text{III-35})$$

$$\epsilon_0 = 12.571 - 7.634x + 4.2849x^2 \quad (\text{Herve VCAA}) \quad (\text{III-36})$$

Nous observons que les valeurs du bowing pour la constante diélectrique statique ϵ_0 calculé avec les trois relations sont positives, et ils diminuent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre mais ces diminutions sont faibles. Et on remarque que la valeur du bowing pour la constante diélectrique statique ϵ_0 calculé avec la relation du Moss est grande comparativement aux valeurs du bowing pour la constante diélectrique statique ϵ_0 calculé avec les deux autres modèles.



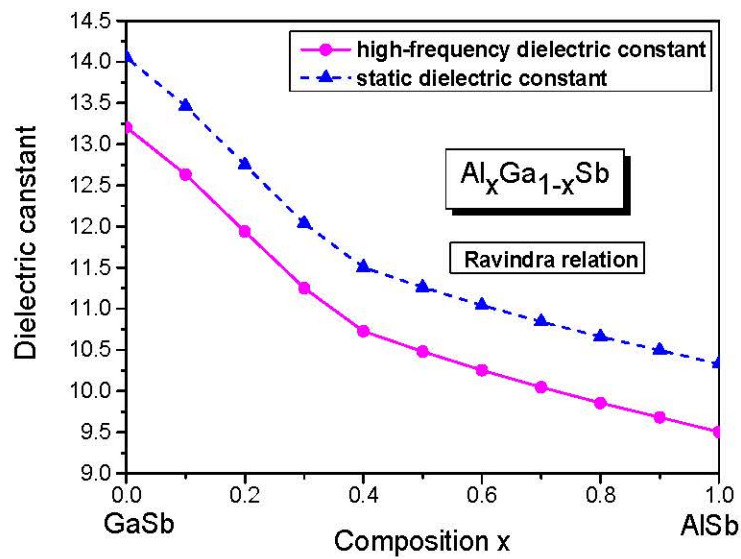


Figure III-8: La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de concentration x de l'Aluminium, calculées par les différentes relations avec désordre de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$.

Les figures III-9 et III-10 représentent La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction du gap d'énergie fondamental.

Nous observons que les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 diminuent linéairement avec l'augmentation des gaps d'énergies pour le modèle de Adachi, Par contre cette variation est non linéaire pour les modèles de Moss, de Herve et de Ravindra.

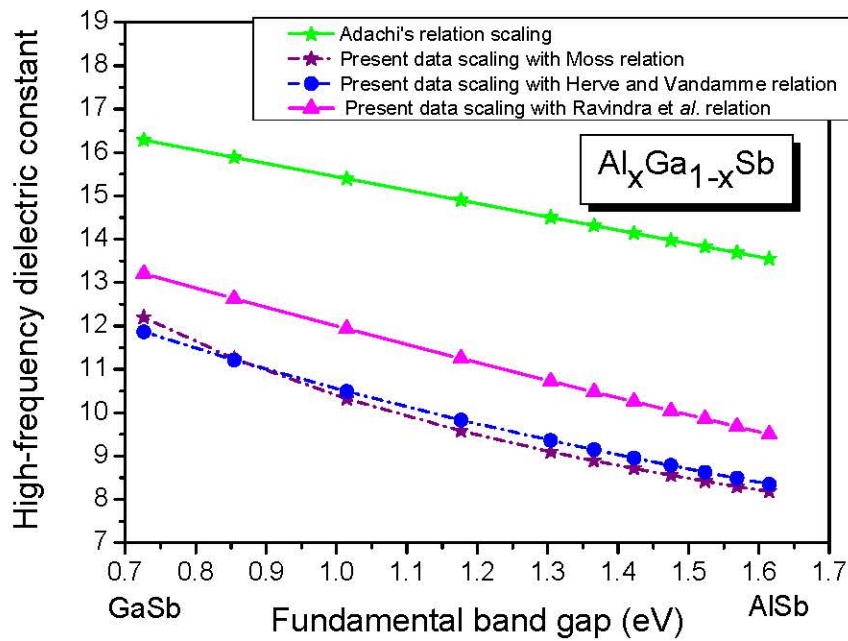


Figure III-9: Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique à haute fréquence avec le gap d'énergie fondamental de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$. La courbe pleine avec des symboles remplis d'étoile est la graduation faite en utilisant la relation d'Adachi, les autres courbes sont les données du présent travail en utilisant les différentes relations.

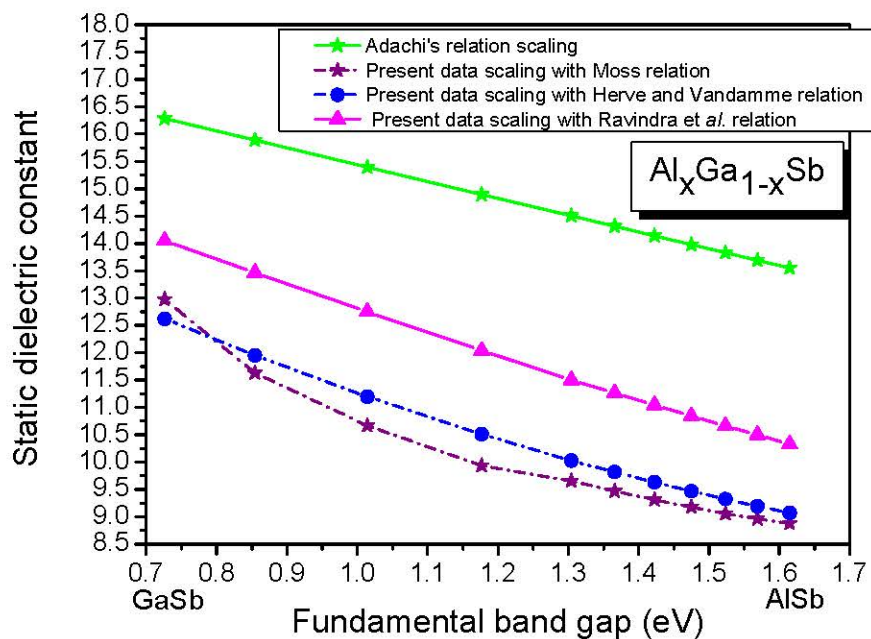


Figure III-10: Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique statique avec le gap d'énergie fondamental de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$. La courbe pleine avec des symboles remplis

d'étoile est la graduation faite en utilisant la relation d'Adachi, les autres courbes sont les données du présent travail en utilisant les différentes relations.

Une graduation de nos données concernant ε_∞ et ε_0 avec E_g , en utilisant un ajustement quadratique, donne les relations suivantes:

$$\varepsilon_\infty = 18.7087 - 11.1306 E_g + 2.8706 E_g^2 \quad (\text{Moss}) \quad (\text{III-37})$$

$$\varepsilon_\infty = 16.6791 - 5.0642 E_g + 0.3844 E_g^2 \quad (\text{Ravindra}) \quad (\text{III-38})$$

$$\varepsilon_\infty = 16.2064 - 6.9203 E_g + 1.2776 E_g^2 \quad (\text{Herve}) \quad (\text{III-39})$$

$$\varepsilon_0 = 20.0361 - 12.1774 E_g + 3.2762 E_g^2 \quad (\text{Moss}) \quad (\text{III-40})$$

$$\varepsilon_0 = 17.8765 - 5.7287 E_g + 0.6515 E_g^2 \quad (\text{Ravindra}) \quad (\text{III-41})$$

$$\varepsilon_0 = 17.3594 - 7.6765 E_g + 1.5759 E_g^2 \quad (\text{Herve}) \quad (\text{III-42})$$

$$\varepsilon_\infty = 11.26 - 1.423 E_g + 1.88304 E_g - 15 E_g^2 \quad (\text{Adachi}) \quad (\text{III-43})$$

$$\varepsilon_0 = 18.52 - 3.08 E_g + 1.99916 E_g - 14 E_g^2 \quad (\text{Adachi}) \quad (\text{III-44})$$

Les équations (III-37 – III-42) obtenus par nos données de l'alliage ternaires $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ indiquent clairement que notre échelle des données à un comportement non linéaire en fonction du gap d'énergie E_g qui est différent du comportement linéaire estimé à partir des relations (III-43) et (III-44) rapporté par Adachi.

Références

- [1] G. J. Ackland, Rep. Prog. Phys. **64**, 483, (2001).
- [2] F. Mezrag, Mémoire de magistère, université de M'sila (Algérie), (2003).
- [3] T. Kobayasi. H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci., Tohoku. Univ, **2**, 7, (1993).
- [4] N. Bouarissa and M. Boucenna, Phys. Ser, **79**, 1570, (12009).
- [5] A. Mujica, A. Munoz, S. Radescu and R. J. Needs, Phys. Stat. Sol **B**, **211**, 345, (1999).
- [6] L. Hannachi, Thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie), (2010).
- [7] A.M. Ledger, Appl. Opt, **18**, 2979, (1979).
- [8] S. Yamaga, A. Yoshokawa, H. Kasain, Cryst. Growth, **86**, 250, (1998).
- [9] T.E. Varitimos, R.W. Tustison, Thin Solide Films, **151**, 27, (1987).
- [10] S. Kasap, P. Capper, Spring Handbook of Electronic and Photonic Materials, (2006).
- [11] Marvin J- Weber, Hand book of optical Materials, (2003).
- [12] M.Rohlfing, P. Kruger, and J. Pollmann, Phys. Rev, **B 57**, 6485, (1998).
- [13] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. **89**, 5815 and references cited therein, (2001).
- [14] A. Hamdi Bacha, Mémoire de master, Univ. Tébessa, Algérie, (2011).
- [15] S. Adachi, Proprieties of semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, Ed. John Wiley & Sons (2009).
- [16] S. Adachi, III-V Ternary and Quaternary Compounds, in Springer handbook of electronic and photonic material, S. Kasap, P. Capper (Eds.) Springer Science, (2006).
- [17] F. Abelés, optical Properties of Solids, North-Holland, Pblishing Company, (1972).
- [18] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.VR. Rao, Infrared Phys, No.1, **34**, 103, (1993).
- [19] T. Steiner, "Semiconductor Nanostructures for Optoelectronic Applications". Artech House, Inc (2004).
- [20] J. Piprek, "Semiconductor Optoelectronic Devices". Elsevier Science (2003).
- [21] A. A. Attia, M.M.El-Nahass, M.Y.El-Bakry, D.M.Habashy. Optics Communications **287** 143, (2013).
- [22] P. Hervé, L. K. J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. **35**, 609, (1994).
- [23] R.R. Reddy, K. Rama Gopal, K. Narasimhulu, L. Siva Sankara Reddy, K. Raghavedra Kumar, C.V. Krishna Reddy, Syed Nisar Ahmed, Optical Materials **31**, 209–212, (2008).
- [24] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu and C. L. N. Sarma, J. Phys. Chm. Solids **54**, 635-637, (1993).
- [25] M. A. Salem, Chinese J. Phys. **41**, 288, (2003).
- [26] R. R. Reddy, Y. N. Ahammed, P. A. Azeem, K. R. Gopal, B. Sasikaladevi, T. V. R. Rao, Def. Sci. J. **53**, 239, (2003).

- [27] S. Kasap, P. Capper, "Spring Hand book of electronic and photonic materials".Spring science, Inc (2006).
- [28] A S Verma, Naresh Pal, B K Sarkar, R Bhandari and V K Jindal, Phys. Scr. **85**,015705, (2012).
- [29] O. Madelung, ebook-"Semiconductors: Data Handbook", 3rd edition, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg,(2004).
- [30] M. Razeghi," Semiconductor Nanostructures for optoelectronic Applications", Artech House, Inc(2004).
- [31] S. M. Sze,"Semiconductor Devices physics and Technology", John wiley and Sons, Inc (2002).
- [32] U. K. Mishra and , J. Singh, Semiconductor Device Physics and Design, Springer,(2008).

A decorative graphic of a scroll, oriented vertically. The scroll is white with a black outline and a grey shadow. It has a vertical strip on the left side and a small circular detail at the top right corner. The text "Conclusion générale" is centered within the scroll.

Conclusion générale

Conclusion générale

Le présent travail est réalisé dans le cadre de l'étude des propriétés optiques et diélectriques de l'alliage ternaire semi-conducteur $Al_x Ga_{1-x} Sb$. La méthode utilisée est celle du pseudopotentiel empirique local (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui inclut l'effet du désordre compositionnel par l'introduction d'un potentiel effectif du désordre, et combinées avec le modèle des orbitales liées de Harrison (bond-orbital -model). Cette méthode est simple et donne des résultats rapides et en général fiables.

Dans nos résultats, nous avons trouvé que les gaps d'énergies fondamentaux E_g augmentent non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium. Pour les propriétés optiques et diélectriques nous avons trouvé que l'indice de réfraction n , la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 diminuent non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium pour les trois relations de Moss, de Ravindra et de Herve.

Nous avons trouvé aussi que les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 diminuent linéairement avec l'augmentation des gaps d'énergies pour le modèles de Adachi ,Par contre cette variation est non linéaire pour les modèles de Moss ,de Herve et de Ravindra .

Il faut noter que les résultats prouvés par le modèle de Ravindra et al, donnent des meilleures valeurs qui sont en bon accord avec des autres travaux, et le comportement des constantes diélectriques est qualitativement semblable à celui de l'indice de réfraction.

L'effet du désordre compositionnel influe faiblement sur les constantes optiques et diélectriques, mais cette influence est presque négligeable pour des concentrations supérieures à $x=0.4$ de l'Aluminium.

En générale, nos calculs s'accordent bien avec les autres méthodes de calculs et les travaux expérimentaux disponibles.